

Universidad Nacional de Córdoba
Facultad de Matemática, Astronomía,
Física y Computación

Trabajo especial de la Licenciatura en Física

Comportamiento bosónico de pares de fermiones con interacción de contacto 1D

Martín Jiménez

Supervisoras: Dra. Ana Majtey y Dra. Eloisa Cuestas

Diciembre 2019



Esta obra está bajo una [Licencia Creative Commons](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)
Atribución-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional.

Resumen

Para determinar cuán bosónico es el comportamiento de pares de fermiones distinguibles interactuantes con interacción de contacto en un sistema unidimensional continuo se propusieron dos modelos: partículas libres y partículas en una trampa armónica. Para cada uno de ellos se determinó de manera analítica el estado fundamental de un sólo par mediante la resolución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. A partir de dicho estado, se extrajo información acerca del comportamiento bosónico del par interactuante en función de la intensidad de la interacción. Se estudió el régimen atractivo para ambos modelos y también el régimen repulsivo para partículas en una trampa armónica.

En el régimen atractivo, se verificó para ambos modelos que en el límite de interacción muy fuerte los pares de fermiones se comportan como bosones ideales. Esta situación corresponde a una separación característica entre las partículas que componen el par muy pequeña comparada con las dimensiones del sistema.

Por su parte, para partículas con interacción repulsiva en una trampa armónica se verificó que aún en el límite de interacción muy fuerte los pares de fermiones no alcanzan a tener un comportamiento bosónico.

Abstract

To determine how bosonic is the behavior of pairs formed by distinguishable fermions with contact interaction in a continuous one-dimensional system we proposed two models: free particles and particles in a harmonic trap. For each one of them, we analytically determined the ground state of a single pair solving the independent time Schrödinger equation. From this state, we extracted information about the bosonic behavior of the interacting pair in relation to the interaction strength. We studied the attractive regime for both models and also the repulsive regime for particles in a harmonic trap.

In the attractive regime, we verified for both models that in the strong interaction limit the pairs behave as ideal bosons. This situation corresponds to a characteristic separation between the particles of the pair very short compared with the dimensions of the system.

For particles with repulsive interaction in a harmonic trap, we verify that even in the strong interaction regime the fermion pairs do not behave as bosons.

Agradecimientos

- Agradecemos a la Dra. Eloisa Cuestas por su colaboración activa en cada etapa de este trabajo, desde su comienzo hasta su redacción. Destacamos que la mayoría de las herramientas numéricas utilizadas para este trabajo fueron provistas por ella.
- Este trabajo fue realizado en el marco de la beca de la Fundación YPF.

Índice general

Resumen	I
Abstract	I
Agradecimientos	II
1. Introducción y motivaciones	1
2. Preliminares	3
2.1. Segunda cuantización y principio de simetría de unitariedad	3
2.2. Descomposición de Schmidt y entrelazamiento	7
2.3. Formalismo de bosones compuestos	9
3. Modelos trabajados	12
4. Cálculo del estado fundamental de un par	14
4.1. Partículas libres restringidas a una caja	14
4.2. Partículas en una trampa armónica	15
4.3. Aproximaciones asintóticas de las funciones de onda y sus energías para casos límites de la energía de interacción	19
4.3.1. Interacción nula	19
4.3.2. Interacción repulsiva muy fuerte	20
4.3.3. Interacción atractiva muy fuerte	20
5. Métodos	23
5.1. Ansatz de cobosones para dos pares	23
5.2. Obtención de χ_2 a partir de la pureza	34
5.3. Implementación de la descomposición de Schmidt	36
6. Resultados	38
6.1. Partículas restringidas a una caja	38
6.1.1. Cálculo vía el ansatz de cobosones para dos pares	38
6.1.2. Cálculo de χ_2 a partir de la pureza	40
6.1.3. Cálculo de los cocientes $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$	41
6.2. Fermiones interactuantes en una trampa armónica	46
6.2.1. $\Omega = 0$	46

6.2.2.	$\Omega \rightarrow -\infty$	47
6.2.3.	$\Omega \rightarrow \infty$	48
6.2.4.	Cálculo numérico del factor χ_2 para valores arbitrarios de Ω .	49
6.2.5.	Cálculo del cociente $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ entre las constantes de normalización para la trampa en régimen atractivo	52
7.	Conclusiones y trabajo a futuro	54
7.1.	Conclusiones	54
7.2.	Proyecciones a futuro	55
	Bibliografía	57
A.	Funciones base BSplines	59
A.1.	Splines lineales	59
A.2.	Splines de grados más altos	59
A.3.	Representación de Splines en términos de las funciones base BSplines	60

Índice de figuras

3.1. Partículas libres interactuantes.	13
3.2. Partículas en un potencial armónico.	13
4.1. Espectro del oscilador armónico + potencial Delta.	17
4.2. Parabólicas cilíndricas.	18
4.3. Aproximación de λ por una parábola para interacción atractiva muy fuerte.	21
5.1. Regiones $x_2 < x_1$ y $x_2 > x_1$	24
5.2. Posibles formas de ordenar 2 pares de fermiones.	27
5.3. Creación de un par de fermiones en (x_1, x_2) y otro en (x_3, x_4) , y aniquilación en (x'_1, x'_2) y en (x'_3, x'_4)	31
5.4. Creación de un par de fermiones en (x_1, x_2) y otro en (x_3, x_4) , y aniquilación en (x'_1, x'_3) y en (x'_2, x'_4)	31
5.5. Contribuciones no nulas en $\langle 0 \hat{S}(x'_1, x'_2) \hat{S}(x'_3, x'_4) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4) 0 \rangle$	32
5.7. Contribuciones no nulas en $\hat{S}(x'_\gamma, x'_\delta) \hat{S}(x'_\alpha, x'_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta)$	32
5.6. Contribuciones no nulas en $\langle 0 \hat{S}(x'_2, x'_4) \hat{S}(x'_1, x'_3) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4) 0 \rangle$	33
5.8. Contribuciones no nulas en $\hat{S}(x'_\beta, x'_\delta) \hat{S}(x'_\alpha, x'_\gamma) \hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta)$	33
6.1. χ_2 para pares restringidos a una caja.	39
6.2. χ_2 cerca del límite de interacción nula.	39
6.3. χ_2 en el límite de interacción muy fuerte.	40
6.4. Coeficientes de Schmidt para partículas libres interactuantes.	43
6.5. Modos de Schmidt para partículas libres interactuantes.	44
6.6. Desarrollo en modos de Schmidt.	44
6.7. Desarrollo en modos de Schmidt dentro de la caja.	45
6.8. $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ para diferentes energías de interacción.	45
6.9. Error numérico en la normalización y en el valor de χ_2 al hacer la descomposición de Schmidt.	51
6.10. χ_2 para partículas en una trampa armónica.	52
6.11. Coeficientes de Schmidt para partículas en la trampa armónica.	53
6.12. $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ para fermiones interactuantes en una trampa armónica.	53
A.1. Funciones base BSplines.	61

Capítulo 1

Introducción y motivaciones

Los sistemas de muchas partículas (*many body*) son de amplio interés en varios campos de la física. La descripción de muchos de estos sistemas resulta muy compleja, sobre todo cuando se consideran interacciones entre las partículas que componen al sistema. Una situación usual en muchos problemas es aquella en que las partículas se encuentran agrupadas formando partículas compuestas (átomos, moléculas, pares de Cooper, etc). Supongamos que tenemos una partícula (o cuasi-partícula) compuesta por un número par de fermiones. Si consideramos a la función de onda del sistema conjunto, sabemos que al intercambiar dos fermiones la función de onda cambia de signo. Entonces, al intercambiar dos de estas partículas compuestas estaríamos haciendo un número par de intercambios entre fermiones, por lo que la función de onda resulta simétrica ante el intercambio de dichas partículas compuestas. Esto, sumado a que una partícula formada por un número par de fermiones tiene espín entero, da la impresión de que estas partículas compuestas podrían pensarse como bosones. Se sabe que si las partículas componentes están altamente entrelazadas esta partícula compuesta efectivamente se comporta como un bosón [1, 2]. Se habla entonces de estas partículas compuestas como bosones compuestos o cobosones (abreviatura en inglés de *composite bosons*). Puesto que el grado de entrelazamiento es el que determina cuán bosónico es el comportamiento de una partícula compuesta, el hecho de que las partículas constituyentes estén fuertemente ligadas es una condición suficiente pero no necesaria para tratar a una partícula compuesta como un bosón perfecto. El entrelazamiento entre partículas puede presentarse de muchas otras formas no limitadas a la posición o el momento. Esta idea fue aplicada con éxito en varios modelos como superconductividad de Bardeen-Cooper-Schrieffer [3], superfluidez del ^4He [3, 4, 5], gases de Fermi ultrafríos interactuantes [6, 7, 8], y en condensados de Bose-Einstein moleculares [9]. El formalismo de cobosones básicamente consiste en dar una descripción del sistema (incluso en el límite termodinámico) a partir de una descripción microscópica de los bosones compuestos. El tratamiento de sistemas a temperatura no nula con este modelo es una tarea de muy alta complejidad que no contemplaremos en este trabajo. Sólo nos limitaremos a describir el estado fundamental, es decir, el estado del sistema a temperatura cero. Para describir el estado de N pares del sistema, basta hallar el estado fundamental de un sólo par [10].

Un modelo de interés es el de bosones formados por dos fermiones en sistemas

continuos unidimensionales. Experimentalmente, han sido logrados sistemas de átomos fríos confinados a una geometría unidimensional, que pueden modelarse mediante potenciales armónicos elongados [11]. Los modos transversales se pueden llevar a sus oscilaciones de punto cero, dando por resultado un sistema efectivo 1D. En el presente trabajo estudiamos un sistema de fermiones interactuantes con interacción de a pares de corto alcance. Es decir, cada fermión interactúa sólo con otro fermión, no con los demás. La intensidad de esta interacción se puede controlar experimentalmente mediante resonancias Feshbach [12], por lo que nos interesa estudiar las propiedades del sistema en todo el régimen de interacción. No obstante, son las interacciones atractivas las que más interesan, pues se ha logrado describir gases de Fermi fuertemente atractivos mediante super gases de Tonks-Girardeau formados a partir de pares de fermiones fuertemente atractivos [13].

Capítulo 2

Preliminares

En este capítulo introducimos las herramientas que fueron usadas a lo largo de este trabajo, de forma tal que sea lo más auto-contenido posible. Primero, damos una introducción al formalismo de la segunda cuantización para sistemas de partículas idénticas. Luego, describimos la descomposición de Schmidt de un estado puro de un sistema bipartito y cómo extraer de ella información acerca del entrelazamiento de ese estado. Finalmente, mencionamos algunas nociones básicas de la teoría de cobosones a partir de las herramientas introducidas.

2.1. Segunda cuantización y principio de simetría de unitariedad

En esta sección se sigue el Cap. 21 del libro *Quantum Mechanics, 3rd Ed.*, de E. Merzbacher.

Sea \hat{K} un observable cualquiera con autovalores $\{k_i\}_{i \geq 1}$. Denotamos por

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$$

al estado que representa al sistema con n_1 partículas en el autoestado de \hat{K} con autovalor k_1 (supongamos que no hay degeneración), n_2 partículas en el autoestado de \hat{K} con autovalor k_2 , y así sucesivamente. A esta base se la denomina base de Fock. Para abreviar, denotaremos por

$$|0\rangle = |0, 0, 0, \dots\rangle$$

al estado vacío y

$$|k_i\rangle = |n_1 = 0, \dots, n_{i-1} = 0, n_i = 1, n_{i+1} = 0, \dots\rangle$$

al estado con una sola partícula en el autoestado de \hat{K} con autovalor k_i .

Se definen los operadores de creación y aniquilación de partículas \hat{a}_i^\dagger y \hat{a}_i , respectivamente, como aquellos cuya acción sobre los elementos de la base de Fock es crear o destruir una partícula en el i -ésimo autovalor de \hat{K} :

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i, n_{i+1}, \dots\rangle &\propto |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i + 1, n_{i+1}, \dots\rangle, \\ \hat{a}_i |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i, n_{i+1}, \dots\rangle &\propto |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i - 1, n_{i+1}, \dots\rangle.\end{aligned}\quad (2.1)$$

Se define en particular

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger |0\rangle &= |k_i\rangle, \\ \hat{a}_i |k_j\rangle &= \delta_{ij} |0\rangle, \\ \hat{a}_i |0\rangle &= 0.\end{aligned}\quad (2.2)$$

Ahora supongamos que elegimos otro operador para representar a nuestro sistema, llamémosle \hat{L} . En total analogía con lo que hicimos recién,

$$|l_q\rangle = |m_1 = 0, \dots, m_{q-1} = 0, m_q = 1, m_{q+1} = 0, \dots\rangle$$

denota al estado con una partícula en el autoestado de \hat{L} con autovalor l_i . De igual manera, definimos los operadores de creación y aniquilación en esta base de estados de una partícula:

$$\begin{aligned}\hat{b}_q^\dagger |m_1, \dots, m_{q-1}, m_q, m_{q+1}, \dots\rangle &\propto |m_1, \dots, m_{q-1}, m_q + 1, m_{q+1}, \dots\rangle, \\ \hat{b}_q |m_1, \dots, m_{q-1}, m_q, m_{q+1}, \dots\rangle &\propto |m_1, \dots, m_{q-1}, m_q - 1, m_{q+1}, \dots\rangle,\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}\hat{b}_q^\dagger |0\rangle &= |l_q\rangle, \\ \hat{b}_q |l_p\rangle &= \delta_{qp} |0\rangle, \\ \hat{b}_q |0\rangle &= 0.\end{aligned}$$

Veamos que

$$\hat{a}_i^\dagger |0\rangle = |k_i\rangle = \sum_q |l_q\rangle \langle l_q | k_i \rangle = \sum_q \langle l_q | k_i \rangle \hat{b}_q^\dagger |0\rangle.$$

Esta ecuación se satisface si imponemos la condición sobre los operadores

$$\hat{a}_i^\dagger = \sum_q \langle l_q | k_i \rangle \hat{b}_q^\dagger. \quad (2.3)$$

Con esta ecuación, estaríamos vinculando los operadores de creación sobre una base de estados de una partícula respecto a los de la otra base vía una transformación unitaria. La hipótesis que se hace es que la ec. (2.3) se satisface en todo el espacio de Fock, no sólo en el subespacio generado por el estado vacío. Esto nos da una equivalencia entre cualquier conjunto de estados de una partícula que elijamos para representar a nuestro sistema. A esto se lo conoce como principio de simetría de unitariedad. Esto tiene que ver con la noción de que crear una partícula con número cuántico k_i es equivalente a crear una partícula con cualquiera de los números cuánticos l_q , cada

uno contribuyendo en superposición lineal con un factor $\langle l_q | k_i \rangle$.

Ahora consideremos que las partículas que componen nuestro sistema son indistinguibles. Físicamente, crear una partícula en el estado con autovalor k_i y luego otra en el autoestado a autovalor k_j debe ser equivalente a hacerlo en orden inverso, en el sentido de que las probabilidades del sistema no deben alterarse frente al intercambio de partículas. Esto implica que

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger &= \mu \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \\ \implies \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger - \mu \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger &= 0, \end{aligned} \quad (2.4)$$

con μ una constante de módulo 1. A partir de la ec. (2.3), tenemos que

$$0 = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger - \mu \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger = \sum_{q,p} \langle l_q | k_i \rangle \langle l_p | k_j \rangle \left(\hat{b}_q^\dagger \hat{b}_p^\dagger - \mu \hat{b}_p^\dagger \hat{b}_q^\dagger \right). \quad (2.5)$$

La ec. (2.5) sólo se satisface para todo i, j si, para todo p, q , vale la igualdad

$$\hat{b}_q^\dagger \hat{b}_p^\dagger - \mu \hat{b}_p^\dagger \hat{b}_q^\dagger = 0. \quad (2.6)$$

Como (2.6) vale para índices p y q arbitrarios, tenemos que

$$\hat{b}_p^\dagger \hat{b}_q^\dagger - \mu \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_p^\dagger = 0. \quad (2.7)$$

A partir de (2.6) y (2.7) concluimos que $\mu = \pm 1$. Tomando el adjunto en (2.4) e intercambiando los nombres de los índices (son arbitrarios) tenemos también que

$$\hat{a}_i \hat{a}_j - \mu \hat{a}_j \hat{a}_i = 0. \quad (2.8)$$

Si ahora pensamos en la operación de crear una partícula en un estado y aniquilar una partícula en otro estado diferente, el orden en que hagamos estas acciones no puede cambiar las probabilidades del estado resultante. Entonces, para $i \neq j$,

$$0 = \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger - \mu \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i = \sum_{q,p} \langle k_i | l_q \rangle \langle l_p | k_j \rangle \left(\hat{b}_q \hat{b}_p^\dagger - \mu \hat{b}_p^\dagger \hat{b}_q \right), \quad (2.9)$$

con lo cual, para todo $p \neq q$,

$$\hat{b}_q \hat{b}_p^\dagger - \mu \hat{b}_p^\dagger \hat{b}_q = 0,$$

y así vemos que $\mu = \pm 1$. Volviendo a la expresión (2.9), tenemos entonces que, para $i \neq j$,

$$0 = \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger - \mu \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i = \sum_q \langle k_i | l_q \rangle \langle l_q | k_j \rangle \left(\hat{b}_q \hat{b}_q^\dagger - \mu \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q \right),$$

lo cual implica que el operador

$$\hat{A} = \hat{b}_q \hat{b}_q^\dagger - \mu \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q$$

es independiente del subíndice q . Aplicando este operador al estado vacío vemos que \hat{A} es el operador identidad. Con esto, tenemos que

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger - \mu \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \sum_q \langle k_i | l_q \rangle \langle l_q | k_i \rangle = 1. \quad (2.10)$$

En las ecuaciones (2.4), (2.8), (2.9) y (2.10), el caso $\mu = 1$ corresponde a cuando las partículas con las que trabajemos sean bosones, mientras que $\mu = -1$ se aplica cuando las partículas son fermiones. Podemos agrupar estas ecuaciones en las siguientes relaciones de conmutación y anticonmutación

$$\begin{aligned} [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] &= 0 \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] &= \delta_{ij} && \text{Bose-Einstein} \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j] &= 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

y

$$\begin{aligned} \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} &= 0 \\ \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} &= \delta_{ij} && \text{Fermi-Dirac,} \\ \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} &= 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

donde $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ denota la suma simétrica.

Hasta aquí hemos considerado la descripción del sistema en términos de los números de ocupación de los autoestados de un observable \hat{K} con espectro discreto. Ahora supongamos que elegimos un operador de espectro continuo, en particular, el operador posición \hat{X} . De acuerdo a la regla de transformación (2.3), el operador que crea una partícula en el i -ésimo autovalor de \hat{K} se escribe como

$$\hat{a}_i^\dagger = \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \Phi_i(x), \quad (2.13)$$

donde $\Phi_i(x)$ es la función de onda del estado $|k_i\rangle$ y $\hat{\Psi}^\dagger(x)$ denota al operador que crea una partícula en la posición x . Haciendo la analogía con las ec. (2.11) y (2.12), para los operadores de creación y aniquilación de partículas en la representación coordenadas tenemos

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}^\dagger(x), \hat{\Psi}^\dagger(x')] &= 0 \\ [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(x')] &= \delta(x - x') && \text{Bose-Einstein} \\ [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x')] &= 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

y

$$\begin{aligned}
\{\hat{\Psi}^\dagger(x), \hat{\Psi}^\dagger(x')\} &= 0 \\
\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(x')\} &= \delta(x - x') && \text{Fermi-Dirac.} \\
\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x')\} &= 0
\end{aligned} \tag{2.15}$$

2.2. Descomposición de Schmidt y entrelazamiento

Supongamos que tenemos un sistema de dos partículas en una dimensión descrito por el espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Dadas 2 bases ortonormales $\{f_n\}$ y $\{g_m\}$ de \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 , respectivamente, podemos representar cualquier función de onda de \mathcal{H} como

$$\Phi(x_1, x_2) = \sum_{n,m} C_{n,m} f_n(x_1) g_m(x_2).$$

Según Ref. [14, 15], existen bases ortonormales $\{\phi_n\}$ de \mathcal{H}_1 y $\{\zeta_n\}$ de \mathcal{H}_2 tales que la función de onda del sistema bipartito se puede escribir como

$$\Phi(x_1, x_2) = \sum_n \sqrt{\lambda_n} \phi_n(x_1) \zeta_n(x_2), \tag{2.16}$$

con

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_m^*(x) \phi_n(x) = \delta_{nm} \quad \text{y} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta_m^*(x) \zeta_n(x) = \delta_{nm}.$$

A la descomposición (2.16) se la denomina descomposición de Schmidt, a las constantes no negativas $\sqrt{\lambda_n}$ coeficientes de Schmidt y a las funciones ϕ_n y ζ_n modos de Schmidt. Si pedimos la normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 |\Phi(x_1, x_2)|^2 = 1,$$

tenemos la condición para los coeficientes de Schmidt

$$\sum_n \lambda_n = 1.$$

Ahora recordemos que la matriz densidad del sistema bipartito en el estado puro descrito por la función de onda Φ está dada en la representación coordenadas por

$$\rho(x'_1, x'_2; x_1, x_2) = \Phi(x_1, x_2) \Phi^*(x'_1, x'_2).$$

Con la ec. (2.16), si tomamos las trazas parciales tenemos que

$$\begin{aligned} \rho_1(x_1, x'_1) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \Phi(x_1, x_2) \Phi^*(x'_1, x_2) = \sum_n \lambda_n \phi_n(x_1) \phi_n^*(x'_1) \\ \implies \int_{-\infty}^{\infty} dx'_1 \rho_1(x_1, x'_1) \phi_m(x'_1) &= \lambda_m \phi_m(x_1) \end{aligned} \quad (2.17)$$

y, análogamente,

$$\begin{aligned} \rho_2(x_2, x'_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \Phi(x_1, x_2) \Phi^*(x_1, x'_2) = \sum_n \lambda_n \zeta_n(x_2) \zeta_n^*(x'_2) \\ \implies \int_{-\infty}^{\infty} dx'_2 \rho_2(x_2, x'_2) \zeta_m(x'_2) &= \lambda_m \zeta_m(x_2). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Con las ec. (2.17) y (2.18) vemos que los modos de Schmidt son los autovectores de las matrices densidad reducidas y los coeficientes λ_n sus autovalores, siendo iguales para ambas matrices densidad. Interpretamos entonces a los modos de Schmidt como los orbitales naturales de cada partícula y a los coeficientes λ_n como sus ocupaciones [16, 17].

Hablemos ahora de entrelazamiento. Como sabemos, no toda función de onda de un sistema bipartito se puede escribir como producto de funciones de onda individuales de cada parte:

$$\Phi(x_1, x_2) = f(x_1)g(x_2). \quad (2.19)$$

Cuando la función de onda puede escribirse de la forma (2.19) decimos que se trata de un estado separable, y cuando no se puede decimos que es entrelazado. Viendo la ec. (2.16), podemos notar que la distribución de los coeficientes λ_n nos da información de cuán entrelazado es el estado. Una cantidad que cuantifica el entrelazamiento de un estado es la entropía lineal, definida como

$$S_L = 1 - \mathcal{P}, \quad (2.20)$$

donde

$$\mathcal{P} = Tr(\hat{\rho}_1^2) = Tr(\hat{\rho}_2^2) = \sum_n \lambda_n^2$$

denota la pureza de las matrices densidad reducidas [18, 19, 20]. Para sistemas continuos estas matrices son de dimensión infinita. Así que supongamos que tienen dimensión finita R_S . Se puede probar que la entropía lineal es mínima cuando uno de los coeficientes de Schmidt vale 1 y el resto 0, en cuyo caso el estado es separable y $S_L = 0$, y máxima cuando la distribución de las ocupaciones λ_n es uniforme, es decir, $\lambda_n = \frac{1}{R_S} \quad \forall n$, donde nos queda

$$S_L = 1 - \sum_{n=1}^{R_S} \left(\frac{1}{R_S} \right)^2 = 1 - \frac{1}{R_S}.$$

Tomando ahora el límite para $R_S \rightarrow \infty$ vemos que la entropía lineal de un estado máximamente entrelazado en un sistema continuo vale 1.

Supongamos ahora que la función de onda tiene simetría ante intercambio de sus partículas, es decir, $\Phi(x_1, x_2) = \Phi(x_2, x_1)$. Entonces, los modos de Schmidt deben ser los mismos para ambas partes del sistema, con lo que la descomposición (2.16) nos queda

$$\Phi(x_1, x_2) = \sum_n \sqrt{\lambda_n} \phi_n(x_1) \phi_n(x_2). \quad (2.21)$$

Esto simplifica la tarea de hallar la descomposición de Schmidt, ya que en vez de tener que hallar los modos de Schmidt para ambas partes del sistema sólo habrá que hacerlo para una de ellas. Explicaremos adelante (Cap. 5) una manera de explotar esta simetría para hallar los coeficientes y los modos de Schmidt.

2.3. Formalismo de bosones compuestos

Consideremos un sistema formado por pares de fermiones interactuantes de distintas especies, llamémosles a y b . Estos pares serán entonces nuestros cobosones. A partir del Hamiltoniano de dos partículas, el estado fundamental, descrito por la función de onda Φ_0 , define al operador creación

$$\hat{c}^\dagger = \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) \Phi_0(x_1, x_2),$$

con $\hat{\Psi}_a^\dagger(x)$ el operador que crea una partícula tipo a en la posición x y $\hat{\Psi}_b^\dagger(x)$ el que crea una partícula tipo b en la posición x . Este sería el operador que aplicado al estado vacío crea un par en el estado descrito por Φ_0 . Si Φ_0 tiene la descomposición de Schmidt

$$\Phi_0(x_1, x_2) = \sum_n \sqrt{\lambda_n} \phi_n(x_1) \zeta_n(x_2),$$

podemos escribir al operador que crea un par en dicho estado como

$$\hat{c}^\dagger = \sum_n \sqrt{\lambda_n} \hat{a}_n^\dagger \hat{b}_n^\dagger, \quad (2.22)$$

donde

$$\hat{a}_n^\dagger = \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{\Psi}_a^\dagger(x) \phi_n(x)$$

y

$$\hat{b}_n^\dagger = \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{\Psi}_b^\dagger(x) \zeta_n(x)$$

denotan los operadores que crean una partícula tipo a y b , respectivamente, en el n -ésimo modo de Schmidt de Φ_0 . Tener en cuenta que estos son operadores fermiónicos, por lo que satisfacen las relaciones de anticonmutación (2.12). Según Ref. [1], puede verse a partir de éstas que

$$[\hat{c}, \hat{c}^\dagger] = 1 - \Delta, \quad (2.23)$$

con

$$\Delta = \sum_n \lambda_n \left(\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n \right).$$

Para N pares podemos proponer el ansatz para el estado fundamental

$$|N\rangle = \frac{(\hat{c}^\dagger)^N}{\sqrt{\chi_N N!}} |0\rangle, \quad (2.24)$$

denominado ansatz de cobosones. El factor χ_N lo añadimos para tener normalizado el estado $|N\rangle$. Para estudiar el carácter bosónico del operador \hat{c}^\dagger , debemos recordar las relaciones de conmutación de los operadores bosónicos y su acción sobre los estados en el espacio de Fock. A partir de las relaciones de conmutación (2.11) se puede ver que, si \hat{c} fuera completamente bosónico, su acción sobre el estado de N cobosones sería

$$\hat{c}_{bos} |N\rangle = \sqrt{N} |N-1\rangle. \quad (2.25)$$

Dado que este operador no es totalmente bosónico, podemos escribir

$$\hat{c} |N\rangle = \alpha_N \sqrt{N} |N-1\rangle + |\epsilon_N\rangle, \quad (2.26)$$

con $\langle N-1 | \epsilon_N \rangle = 0$. Viendo que

$$\hat{c}^\dagger |N-1\rangle = \frac{(\hat{c}^\dagger)^N}{\sqrt{\chi_{N-1} (N-1)!}} |0\rangle = \sqrt{N} \sqrt{\frac{\chi_N}{\chi_{N-1}}} |N\rangle,$$

llegamos a que

$$\alpha_N = \sqrt{\frac{\chi_N}{\chi_{N-1}}} \quad (2.27)$$

y

$$\langle \epsilon_N | \epsilon_N \rangle = (N-1) \sqrt{\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}} + (1-N) \sqrt{\frac{\chi_N}{\chi_{N-1}}}. \quad (2.28)$$

Entonces, vemos que el operador de creación de un cobosón tiene un carácter totalmente bosónico cuando el cociente $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ tiende a 1.

Veremos ahora cómo está relacionado este factor de normalización χ_N con el entrelazamiento entre las partículas que conforman el par. A partir de la expresión del operador de creación de un cobosón en la base de Schmidt de la ec. (2.22), se puede ver que

$$\chi_N = \frac{1}{N!} \langle 0 | (\hat{c})^N (\hat{c}^\dagger)^N | 0 \rangle = N! \sum_{p_N > p_{N-1} > \dots > p_1} \lambda_{p_1} \lambda_{p_2} \dots \lambda_{p_N}. \quad (2.29)$$

En particular, para 2 cobosones, tenemos que

$$\chi_2 = \frac{1}{2} \langle 0 | (\hat{c})^2 (\hat{c}^\dagger)^2 | 0 \rangle = 2 \sum_{p_2 > p_1} \lambda_{p_1} \lambda_{p_2} = 1 - \sum_n \lambda_n^2. \quad (2.30)$$

Vemos así que el factor χ_2 coincide con la entropía lineal, de acuerdo a la ec. (2.20). Según Ref. [21], a partir de la ec. (2.29) se puede calcular el factor χ_N mediante la relación de recurrencia

$$\chi_N = \sum_{m=1}^N \frac{(-1)^{m+1} (N-1)! M(m) \chi_{N-m}}{(N-m)!}, \quad (2.31)$$

con

$$M(m) = \sum_i (\lambda_i)^m.$$

Particularmente, podemos notar que $M(1) = 1$ y $M(2)$ es la pureza. Dado que

$$\chi_N = \frac{1}{N!} \langle 0 | (\hat{c})^N (\hat{c}^\dagger)^N | 0 \rangle,$$

tenemos que $\chi_0 = \langle 0 | 0 \rangle = 1$ y $\chi_1 = \langle 0 | \hat{c} \hat{c}^\dagger | 0 \rangle = 1$ (para que el estado de un solo par esté normalizado). En la ec. (2.31), usando que $0 \leq M(m) \leq M(2)$ para $m \geq 2$, y habiendo visto que la pureza tiende a cero cuando el grado de entrelazamiento entre las partículas que conforman el cobosón es muy alto, vemos que $M(m) \rightarrow 0$ para $m \geq 2$, con lo cual $\chi_N \rightarrow 1 \forall N$, cuando los fermiones están máximamente entrelazados.

Además de la entropía lineal, otra cantidad que cuantifica el entrelazamiento de un estado puro es la entropía de Renyi, definida como

$$H_\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \log \left(\sum_i (\lambda_i)^\alpha \right), \quad (2.32)$$

con $\alpha \geq 0$ y en el límite $\alpha \rightarrow 1$ coincide con la entropía de Shannon [22]. A la expresión (2.32) se la llama entropía de Renyi de orden α . Identificamos a los factores $M(m)$ en la ec. (2.31) como

$$M(m) = e^{(1-m)H_m}.$$

Cuando el entrelazamiento es máximo, la entropía de Renyi H_α tiende a ∞ para cualquier orden α , en cuyo caso vemos que los factores $M(m)$, $m \geq 2$, convergen a cero. De este modo, vemos que el factor χ_N queda expresado en términos de las entropías de Renyi de órdenes 2 hasta N y de los factores de normalización para menos de N pares. Con esto vinculamos el carácter bosónico del par de fermiones con su grado de entrelazamiento.

Capítulo 3

Modelos trabajados

En este trabajo consideramos dos modelos continuos unidimensionales de pares de fermiones distinguibles interactuantes, uno tipo a y otro tipo b , ambos de igual masa. La interacción que consideramos es tipo Delta de Dirac

$$V_{ab} = \Omega \delta(x_a - x_b), \quad (3.1)$$

con x_a y x_b las posiciones de las partículas a y b , respectivamente. Esto físicamente estaría modelando interacciones de corto alcance. Estos pares interactuantes los estudiaremos en dos situaciones:

- Partículas libres con interacción atractiva (fig. (3.1)): en primera instancia, suponemos $\Omega < 0$ en la ec. (3.1) y calculamos la función de onda del estado fundamental y su autoenergía para el caso en que las partículas no sientan ningún potencial más que el de interacción entre ellas. Como nos interesa una función de onda que pueda ser normalizada, pedimos que las partículas no puedan estar fuera de una región del espacio de ancho $2L$. No es una caja de potencial en el sentido que acostumbramos. Primero calculamos la función de onda definida en todo el espacio libre y a esa misma la restringimos al intervalo elegido y la normalizamos allí adentro. Esta función no satisface continuidad en los límites de dicha región, por lo que allí no tendría sentido físico.
- Partículas en un potencial armónico (fig. (3.2)): Un modelo más realista que el anterior (pero más difícil de tratar) es el de considerar a las partículas en una trampa armónica. En este caso estudiamos tanto el régimen atractivo como el repulsivo.

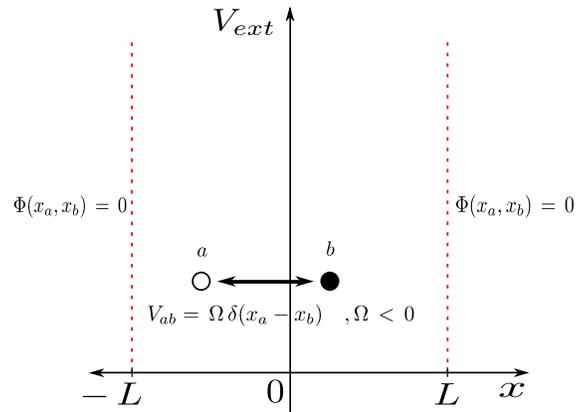


Figura 3.1: Partículas libres con interacción atractiva tipo Delta de Dirac restringidas a una región del espacio de ancho $2L$. No confundir con la caja de potencial usual, aquí no pedimos continuidad a la función de onda Φ en los bordes $x = \pm L$ de dicha región.

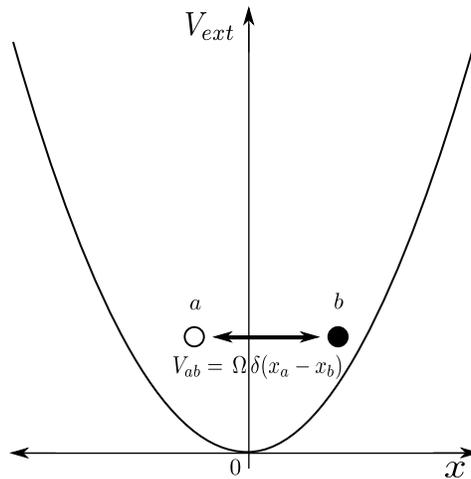


Figura 3.2: Partículas en una trampa armónica con interacción tipo Delta de Dirac. Para este modelo consideramos tanto el régimen atractivo como el repulsivo.

Lo que hay que hacer en cada caso es primero hallar el estado fundamental y su energía para un sistema formado por un sólo par de fermiones interactuantes. A partir de éste, se construye el operador de creación de un par como vimos en el Cap. (2), Sec. (2.3). Estudiando las propiedades de este operador vimos que se puede analizar el comportamiento bosónico de los pares de fermiones, incluso a medida que aumentamos el número de partículas en el sistema.

Capítulo 4

Cálculo del estado fundamental de un par

En este capítulo calculamos la función de onda del estado fundamental y su energía asociada para un sistema formado por dos partículas distinguibles con un potencial de interacción $\Omega \delta(x_1 - x_2)$ para los dos modelos utilizados en este trabajo: partículas libres restringidas a una caja y partículas en una trampa armónica. Luego, estudiamos el comportamiento de la función de onda y su energía a distintos valores del parámetro de interacción Ω .

4.1. Partículas libres restringidas a una caja

Recordemos que no estamos trabajando con una caja de potencial en el sentido habitual de que exigimos a la función de onda que se anule en los bordes. Estamos pensando en partículas libres, y a la función de onda que obtengamos la restringimos al intervalo $[-L, L]$ y la normalizamos allí dentro. Esto, recordemos, se hace para poder obtener una función de onda normalizable. Tenemos entonces el Hamiltoniano para las dos partículas

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \Omega \delta(x_1 - x_2). \quad (4.1)$$

Tomando coordenadas centro de masa y relativa, $R = \frac{x_1 + x_2}{2}$ y $r = x_2 - x_1$, podemos reescribirlo como

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \Omega \delta(r), \quad (4.2)$$

donde $M = 2m$ es la masa total y $\mu = \frac{m}{2}$ la masa reducida. Vemos que el término de la energía del centro de masa corresponde a una partícula libre. Dado que buscamos el estado fundamental, consideramos al centro de masa con energía cinética cero, es decir, $\Phi^{(\text{CM})}(R) = \text{cte}$. Entonces, nos queda la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Phi''(r) + \Omega\delta(r)\Phi(r) = E\Phi(r). \quad (4.3)$$

Las soluciones de esta ecuación son exponenciales. Aquí sólo analizaremos el régimen atractivo $\Omega < 0$. Buscando estados ligados la única solución posible tiene la forma

$$\Phi(r) \propto e^{-\frac{c}{2}|r|},$$

con c una constante positiva. Pidiendo ahora la condición de salto de la derivada

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}(\Phi'(0^+) - \Phi'(0^-)) = \frac{\hbar^2}{\mu}\Phi'(0^+) = \Omega\Phi(0),$$

nos queda $c = -\frac{2\Omega\mu}{\hbar^2} = -\frac{\Omega m}{\hbar^2}$ y entonces

$$\Phi_0(x_1, x_2) \propto e^{\frac{\Omega m}{2\hbar^2}|x_1 - x_2|}. \quad (4.4)$$

Exigiendo la normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \Phi_0(x_1, x_2)^2 = 1,$$

al restringir la función de onda a $(x_1, x_2) \in [-L, L] \times [-L, L]$ nos quedaría

$$\int_{-L}^L dx_2 \int_{-L}^L dx_1 \Phi_0(x_1, x_2)^2 = 1,$$

con lo cual la función de onda de un par nos queda

$$\Phi_0(x_1, x_2) = \frac{c e^{-\frac{c}{2}|x_1 - x_2|}}{\sqrt{2(2cL + e^{-2cL} - 1)}}, \quad (4.5)$$

y su energía

$$E_0 = -\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{m\Omega}{2\hbar^2} \right)^2 = -\frac{m\Omega^2}{4\hbar^2}. \quad (4.6)$$

4.2. Partículas en una trampa armónica

Ahora consideremos dos partículas en un potencial armónico. Tenemos el Hamiltoniano del sistema

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{m\omega^2}{2} x_1^2 + \frac{m\omega^2}{2} x_2^2 + \Omega\delta(x_1 - x_2). \quad (4.7)$$

Al igual que para el problema anterior, se puede desacoplar el sistema en coordenadas centro de masa y relativa

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{M\omega^2}{2} R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\mu\omega^2}{2} r^2 + \Omega \delta(r), \quad (4.8)$$

con $M = 2m$, $\mu = \frac{m}{2}$, $R = \frac{x_1+x_2}{2}$ y $r = x_2 - x_1$. Al Hamiltoniano del centro de masa lo identificamos como el de un oscilador armónico simple. Se sabe que sus autofunciones y autoenergías están dadas por

$$\Phi_n^{(\text{CM})}(R) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar 2^{2n} (n!)^2} \right)^{1/4} e^{-\frac{M\omega R^2}{2\hbar}} H_n \left(\left(\frac{M\omega}{\hbar} \right)^{1/2} R \right), \quad (4.9)$$

$$E_n^{(\text{CM})} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (4.10)$$

con $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, y H_n los polinomios de Hermite [23]. Para la parte de la coordenada relativa usamos de guía Ref. [24]. Llamemos ϵ a los autovalores del Hamiltoniano relativo. Tomando las variables adimensionales

$$\begin{aligned} z &= \left(\frac{2\mu\omega}{\hbar} \right)^{1/2} r, \\ \lambda &= \frac{\epsilon}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}, \\ \gamma &= \frac{\Omega}{\hbar\omega} \left(\frac{2\mu\omega}{\hbar} \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

la ecuación de autovalores para el Hamiltoniano relativo nos queda

$$\Phi_{rel}''(z) + \left[\lambda + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4} - \gamma \delta(z) \right] \Phi_{rel}(z) = 0. \quad (4.12)$$

Según Ref. [25], la ecuación diferencial

$$f''(z) + \left[\lambda + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4} \right] f(z) = 0$$

tiene como soluciones linealmente independientes (lo son si λ no es entero) a $D_\lambda(z)$ y $D_\lambda(-z)$, siendo D_λ una función especial conocida como parabólica cilíndrica. La ec.(4.12) tiene entonces la solución general

$$\Phi_{rel}(z) = \begin{cases} A D_\lambda(z) + B D_\lambda(-z), & z \leq 0 \\ C D_\lambda(z) + E D_\lambda(-z), & z \geq 0. \end{cases} \quad (4.13)$$

con A, B, C y E constantes. Las parabólicas cilíndricas divergen para $z \rightarrow -\infty$, por lo que para tener estados ligados debemos tomar $B = C = 0$. Notar además que la

ec. (4.12) es invariante ante la inversión del eje z , por lo que sus soluciones serán funciones pares e impares. De modo que $A = \pm E$. Para $A = -E$, la condición de continuidad en $z = 0$ exige que $D_\lambda(0) = 0$. Esto sólo es posible si $\lambda = 2n + 1$, $n \in \mathbb{N}$. Vale la pena mencionar la propiedad

$$D_N(z) \propto e^{-z^2/4} H_N(z), \quad N \in \mathbb{N}, \quad (4.14)$$

donde H_N denota a los polinomios de Hermite. Esto nos dice que las soluciones impares y sus autoenergías coinciden con las del oscilador armónico simple. Ahora, para $A = E$ tenemos las soluciones

$$\Phi_{rel}(z) = A D_\lambda(|z|).$$

Veamos ahora los posibles valores de λ en este caso. A partir de la ec. (4.12) y de la paridad de la solución se tiene la condición

$$2D'_\lambda(0^+) = \gamma D_\lambda(0).$$

Proveyendo los valores en el origen

$$D_\lambda(0) = \frac{\sqrt{\pi} 2^{\lambda/2}}{\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}\right)} \quad \text{y} \quad D'_\lambda(0) = -\frac{\sqrt{\pi} 2^{\frac{\lambda+1}{2}}}{\Gamma\left(-\frac{\lambda}{2}\right)},$$

nos queda la ecuación

$$\gamma = -2\sqrt{2} \frac{\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\lambda}{2}\right)}. \quad (4.15)$$

No se puede despejar λ en forma exacta de esta expresión, pero podemos ver gráficamente los valores que tomaría (ver fig. (4.1)).

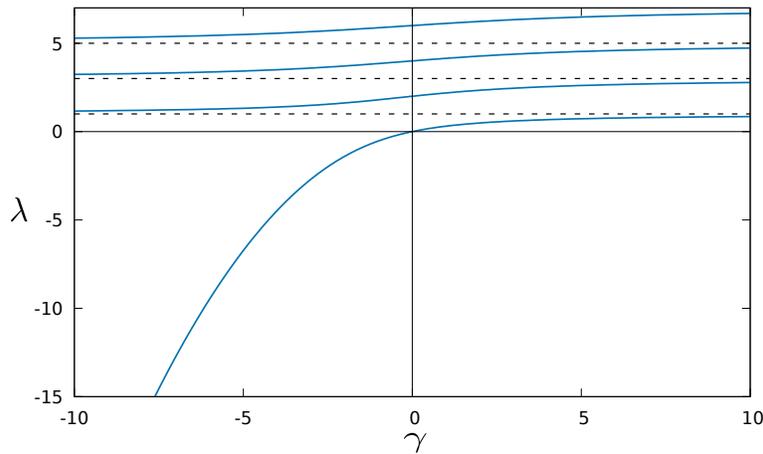


Figura 4.1: Valores permitidos de energía del Hamiltoniano relativo en función de la energía de interacción de las partículas del par: $\lambda = \frac{\epsilon}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$ y $\gamma = \frac{\Omega}{\hbar\omega} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$ (ver ec. (4.7)).

Notar que para el límite de interacción repulsiva muy fuerte, es decir $\gamma \rightarrow \infty$, los niveles de energía para el Hamiltoniano relativo son $\epsilon = \hbar\omega (n + \frac{1}{2})$, con n impar, y éstos poseen una doble degeneración, siendo una de sus autofunciones impar (las soluciones impares del oscilador armónico simple) y la otra par (las mismas funciones, pero evaluadas en $|z|$) [24]. Dado que estamos interesados en el estado fundamental, nos quedaremos con la curva correspondiente a $\lambda < 1$. Para tener una idea de cómo se ve la función de onda de la coordenada relativa, en la fig. (4.2) se muestran los gráficos de algunas de estas funciones a distintos valores de λ . Éstas vienen dadas por

$$\Phi_{rel}(z) = \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\psi\left(\frac{1-\lambda}{2}\right) - \psi\left(-\frac{\lambda}{2}\right)}{\Gamma(-\lambda)} \right)^{-1/2} D_\lambda(|z|),$$

con ψ la derivada logarítmica de la función Gamma y donde pedimos la normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \Phi_{rel}(z)^2 = 1.$$

Recordemos que la energía asociada a la parte relativa de la función de onda del estado fundamental es creciente con λ , que a su vez es creciente con γ (ec. (4.11) y (4.15)).

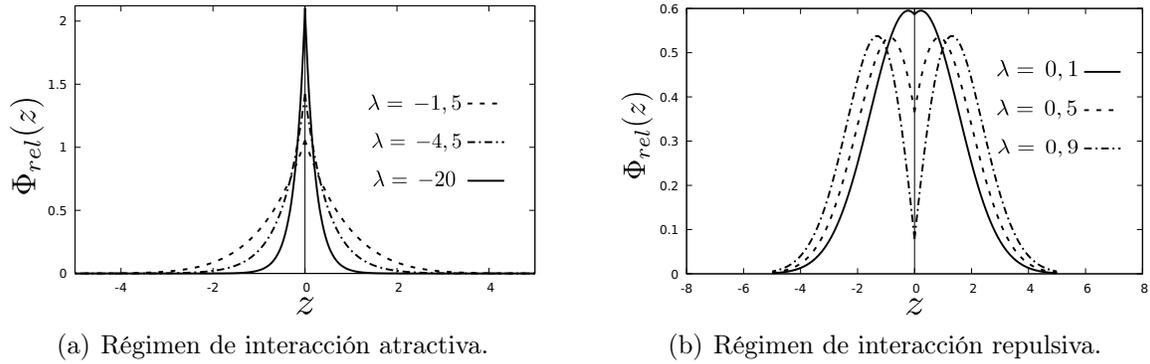


Figura 4.2: Gráfico de la función de onda de la coordenada relativa del estado fundamental $\Phi_{rel}(z)$, con $z = \left(\frac{2\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2} (x_2 - x_1)$, para distintos valores de $\lambda = \frac{\epsilon}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$, ϵ su energía asociada.

Podemos notar que, en el régimen atractivo, a medida que se intensifica la interacción entre las partículas menor es su separación característica (que podríamos pensarla como el ancho de la función Φ_{rel}), lo cual tiene sentido. Por su parte, en el régimen repulsivo, vemos que cuanto más se repelen las partículas más chico es $\Phi_{rel}(0)$, lo que nos dice que es menor la densidad de probabilidad de encontrarlas en la misma posición. También notamos que a mayor repulsión mayor es la separación media entre los fermiones del par (puede verse fácil notando que los máximos de Φ_{rel} se encuentran más alejados del origen a medida que aumenta la energía de interacción), la cual nunca llega a ser infinita pues la presencia de la trampa armónica lo impide.

Ahora, la función de onda del estado fundamental del sistema sería el producto de las funciones de las coordenadas centro de masa y relativa correspondientes a sus mínimas energías, y la energía del sistema la suma de las energías individuales. Nos queda

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega (\lambda + 1). \quad (4.16)$$

y

$$\begin{aligned} \Phi_0(x_1, x_2) &= \Phi_0^{(\text{CM})} \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right) \Phi_{rel}(x_2 - x_1) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} \sqrt{\frac{2}{\pi} \frac{\Gamma(-\lambda)}{\psi\left(\frac{1-\lambda}{2}\right) - \psi\left(-\frac{\lambda}{2}\right)}} e^{-\frac{m\omega}{4\hbar}(x_1+x_2)^2} D_\lambda \left(\left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} |x_1 - x_2| \right). \end{aligned} \quad (4.17)$$

4.3. Aproximaciones asintóticas de las funciones de onda y sus energías para casos límites de la energía de interacción

Hay 3 casos límites de particular interés:

- Interacción nula: $\Omega = 0$
- Interacción repulsiva muy fuerte: $\Omega \rightarrow \infty$
- Interacción atractiva muy fuerte: $\Omega \rightarrow -\infty$

4.3.1. Interacción nula

Para $\Omega = 0$, al no haber interacción entre las partículas, deberíamos tener un estado separable. Veamos que, en este límite

$$\Phi_{caja}(x_1, x_2) \propto \lim_{c \rightarrow 0} e^{-\frac{c}{2}|x_1 - x_2|} = cte.$$

Para que quede normalizada hay que tomar

$$\Phi_{caja}(x_1, x_2) = \frac{1}{2L}.$$

Respecto a la función de onda de la trampa armónica, viendo la fig. (4.1) notamos que la interacción nula corresponde a $\lambda = 0$. Teniendo la propiedad de la ec. (4.14), nos queda

$$\Phi_{trampa}(x_1, x_2) \propto e^{-\frac{m\omega}{4\hbar}(x_1+x_2)^2} e^{-\frac{m\omega}{4\hbar}(x_1-x_2)^2} = e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)}.$$

Normalizándola nos queda

$$\Phi_{\text{trampa}}(x_1, x_2) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)}.$$

Efectivamente, nos quedan estados separables. Respecto a las energías, simplemente resultan 0 para la caja y $\hbar\omega$ para la trampa.

4.3.2. Interacción repulsiva muy fuerte

En este trabajo no estudiamos el régimen repulsivo para partículas libres restringidas a una caja. Para la trampa armónica sin embargo, a pesar de tener repulsión entre las partículas, seguimos teniendo estados ligados debido a la presencia del potencial cuadrático. Viendo la fig. (4.1) tenemos que este caso corresponde a $\lambda = 1$, y con la propiedad de la ec. (4.14) nos queda

$$\Phi_{\text{trampa}}(x_1, x_2) \propto e^{-\frac{m\omega}{4\hbar}(x_1+x_2)^2} e^{-\frac{m\omega}{4\hbar}(x_1-x_2)^2} |x_1 - x_2|.$$

Una vez normalizada queda

$$\Phi_{\text{trampa}}(x_1, x_2) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)} |x_1 - x_2|.$$

4.3.3. Interacción atractiva muy fuerte

Ahora analizamos el caso $\Omega \rightarrow -\infty$. Aunque para dar un sentido de cuán grande es este valor hay que compararlo con alguna cantidad que tenga las mismas unidades. Para el caso de la caja podemos considerar el parámetro $cL = -\frac{m\Omega L}{\hbar^2}$, y para la trampa armónica usamos el anteriormente definido $\gamma = \frac{\Omega}{\hbar\omega} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$. Es decir, además de que la interacción es muy fuerte, estamos pensando que la caja es cada vez más ancha y la trampa cada vez más débil (ω chico). Veamos que, para cL grande,

$$\Phi_{\text{caja}}(x_1, x_2) \xrightarrow{cL \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{c}{4L}} e^{-\frac{c}{2}|x_1-x_2|} = \frac{1}{\sqrt{2L}} \left(-\frac{m\Omega}{2\hbar^2}\right)^{1/2} e^{\frac{m\Omega}{2\hbar^2}|x_1-x_2|}. \quad (4.18)$$

La energía, por su parte, vemos que decae cuadráticamente con Ω (ver ec.(4.6))

$$E_{\text{caja}} = -\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{m\Omega}{2\hbar^2}\right)^2 = -\frac{m\Omega^2}{4\hbar^2}.$$

Para la trampa armónica, viendo nuevamente la fig. (4.1) nos damos cuenta que también la energía tiende a $-\infty$. Pero tratemos de ver con qué comportamiento. Para ello, nos será útil la aproximación asintótica (Ref. [25]):

$$\Gamma(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \sqrt{2\pi} e^{-x} x^{x-\frac{1}{2}}.$$

Con esto, la ec. (4.15) nos queda

$$\gamma \approx -2\sqrt{-\lambda} \implies \lambda \approx -\frac{\gamma^2}{4}. \quad (4.19)$$

En la fig. (4.3) se muestra cómo esta aproximación resulta buena a medida que $\gamma \ll -1$.

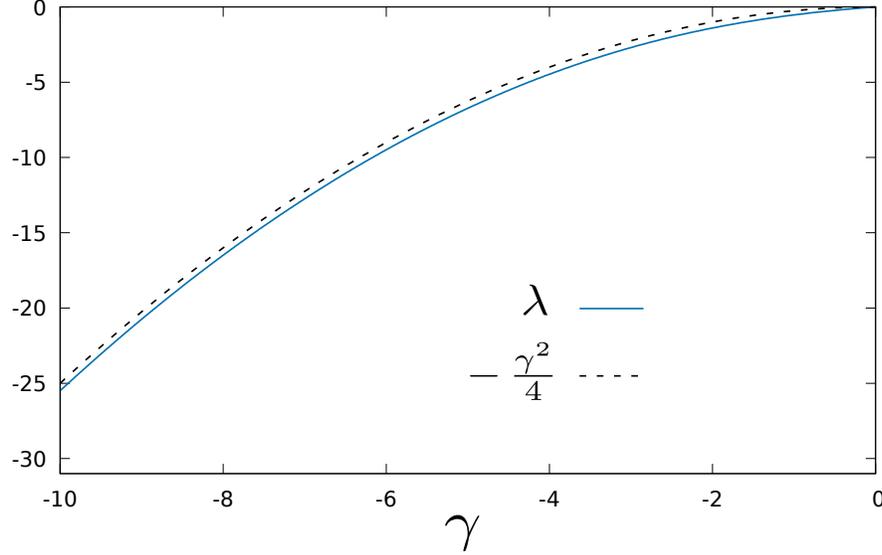


Figura 4.3: Aproximación de λ por una parábola para interacción atractiva muy fuerte.

Recordando que $E_0 = \hbar\omega(\lambda + 1)$, lo de arriba nos lleva a que

$$E_{\text{trampa}} \approx -\frac{m\Omega^2}{4\hbar^2} + \hbar\omega \approx -\frac{m\Omega^2}{4\hbar^2}.$$

En cuanto a la función de onda de un par en la trampa armónica, podemos usar el límite asintótico

$$D_\lambda(|z|) \xrightarrow{\lambda \rightarrow -\infty} \frac{e^{-\lambda/2}}{\sqrt{2}} (-\lambda)^{\lambda/2} e^{-\sqrt{\lambda}|z|},$$

lo que nos deja

$$\Phi_{\text{trampa}}(x_1, x_2) \propto e^{-\frac{m\omega}{4\hbar}(x_1+x_2)^2} e^{-\sqrt{-\lambda}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}|x_1-x_2|}.$$

Adecuadamente normalizada queda

$$\Phi_{\text{trampa}}(x_1, x_2) \xrightarrow{\gamma \rightarrow -\infty} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \left(-\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{4\hbar}(x_1+x_2)^2} e^{-\sqrt{-\lambda}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}|x_1-x_2|}.$$

Usando la ec. (4.19) y denotando $b = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$ a la amplitud característica del oscilador armónico, la función de onda nos queda

$$\Phi_{\text{trampa}}(x_1, x_2) \xrightarrow{\gamma \rightarrow -\infty} \left(\frac{1}{\pi b^2} \right)^{1/4} e^{-\left(\frac{x_1+x_2}{2b}\right)^2} \left(-\frac{m\Omega}{2\hbar^2} \right)^{1/2} e^{\frac{m\Omega}{2\hbar^2}|x_1-x_2|}. \quad (4.20)$$

Comparando las expresiones de las ec. (4.18) y (4.20), vemos que la parte de la función de onda correspondiente a la coordenada relativa es la misma para ambos modelos en este límite. En cuanto a la parte del centro de masa, tenemos

$$\Phi_{\text{caja}}^{(\text{CM})} \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \quad \text{y} \quad \Phi_{\text{trampa}}^{(\text{CM})} \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right) = \left(\frac{1}{\pi b^2} \right)^{1/4} e^{-\left(\frac{x_1+x_2}{2b}\right)^2}.$$

Notar que para ω pequeño, la amplitud $b = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$ del oscilador se hace grande y su energía $E^{(\text{CM})} = \frac{\hbar\omega}{2}$ pequeña. Esto nos dice que la posición del centro de masa tiene una dispersión muy grande comparada con la separación característica entre las partículas del par, y una energía muy pequeña comparada con la de interacción entre los fermiones constituyentes.

Capítulo 5

Métodos

En este capítulo ilustramos diferentes métodos que usamos para calcular el factor de normalización χ_2 para el ansatz del estado fundamental del sistema formado por dos pares de fermiones interactuantes a partir de la función de onda que describe un par individual. Uno de ellos, como vimos, es la descomposición de Schmidt (Cap. 2, Sec. 2.3), que además nos permite calcular los cocientes $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ que interesan para el estudio del comportamiento bosónico de los pares interactuantes cuando se incrementa el número de partículas del sistema.

5.1. Ansatz de cobosones para dos pares

De acuerdo a la expresión (2.30) vista en la introducción, dada la función de onda $\Phi_0(x_1, x_2)$ de 2 fermiones distinguibles, uno de tipo a y otro de tipo b , se puede evaluar el factor χ_2 a partir de:

$$\chi_2 = \frac{1}{2} \langle 0 | \hat{c}^2 (\hat{c}^\dagger)^2 | 0 \rangle, \quad (5.1)$$

donde el operador de creación de un par, \hat{c}^\dagger , viene dado por

$$\hat{c}^\dagger = \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) \Phi_0(x_1, x_2),$$

donde $\hat{\Psi}_a^\dagger(x)$ y $\hat{\Psi}_b^\dagger(x)$ son los operadores que crean en la posición x una partícula tipo a y b , respectivamente. En el Cap. 4 vimos que, para los modelos que trabajamos, la función de onda tiene una dependencia de la forma

$$\Phi_0(x_1, x_2) = \Phi^{(\text{CM})} \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right) \phi(|x_1 - x_2|).$$

Para no lidiar con el valor absoluto $|x_1 - x_2|$, resulta conveniente establecer una relación de orden entre las partículas que componen el par. Es importante notar que, si dividimos la región de integración en $x_2 > x_1$ y $x_2 < x_1$ (ver fig. (5.1)) podemos escribir

$$\begin{aligned}
\hat{c}^\dagger &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) \Phi_0(x_1, x_2) \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{x_1} dx_2 \hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) \Phi_0(x_1, x_2) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \{ \hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) + \hat{\Psi}_a^\dagger(x_2) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_1) \} \Phi_0(x_1, x_2),
\end{aligned} \tag{5.2}$$

donde intercambiamos los nombres de las variables de integración en la integral sobre la región $x_2 < x_1$ y usamos que $\Phi_0(x_1, x_2) = \Phi_0(x_2, x_1)$.

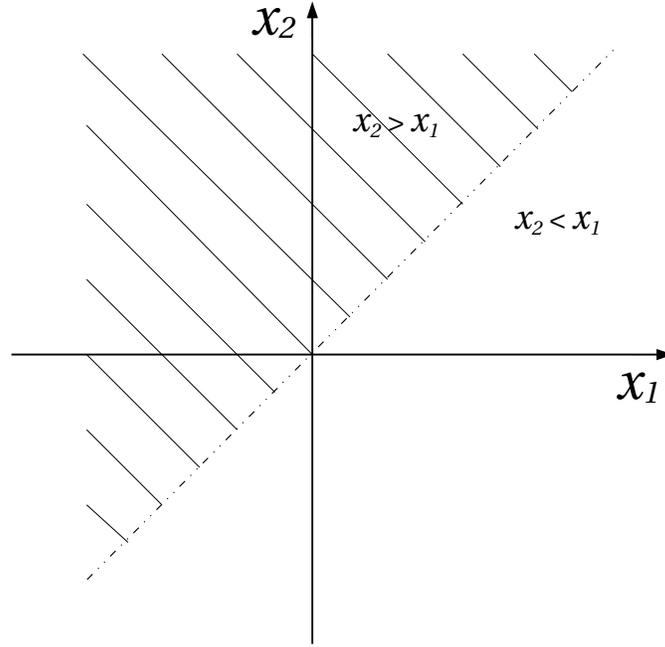


Figura 5.1: Regiones $x_2 < x_1$ y $x_2 > x_1$.

Podemos reescribir la expresión para el operador de creación de un par como

$$\hat{c}^\dagger = \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \frac{\hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) + \hat{\Psi}_a^\dagger(x_2) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_1)}{\sqrt{2}} \sqrt{2} \Phi_0(x_1, x_2),$$

Si hacemos el cambio para la función de onda

$$\Phi_0 \longrightarrow \sqrt{2} \Phi_0,$$

nos queda

$$\hat{c}^\dagger = \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \frac{\hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) + \hat{\Psi}_a^\dagger(x_2) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_1)}{\sqrt{2}} \Phi_0(x_1, x_2). \quad (5.3)$$

Notar que al hacer este cambio para la función de onda su condición de normalización queda

$$1 = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \Phi_0(x_1, x_2)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \Phi_0(x_1, x_2)^2.$$

Ahora definamos el operador

$$\hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \equiv \frac{\hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) + \hat{\Psi}_a^\dagger(x_2) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_1)}{\sqrt{2}}. \quad (5.4)$$

Analicemos la expresión

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{S}(x'_1, x'_2) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) | 0 \rangle &= \frac{1}{2} \langle 0 | \left(\hat{\Psi}_a(x'_1) \hat{\Psi}_b(x'_2) + \hat{\Psi}_a(x'_2) \hat{\Psi}_b(x'_1) \right) \\ &\quad \cdot \left(\hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) + \hat{\Psi}_a^\dagger(x_2) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_1) \right) | 0 \rangle. \end{aligned}$$

Para entender cómo se trabajan este tipo de operaciones veamos uno de estos términos. Veamos

$$\langle 0 | \hat{\Psi}_a(x'_1) \hat{\Psi}_b(x'_2) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) | 0 \rangle.$$

A partir de las relaciones de anti-conmutación

$$\begin{aligned} \{ \hat{\Psi}_a(x'), \hat{\Psi}_a^\dagger(x) \} &= \delta(x' - x), \\ \{ \hat{\Psi}_b(x'), \hat{\Psi}_b^\dagger(x) \} &= \delta(x' - x), \end{aligned}$$

más que operadores que actúan sobre distintas especies de partículas conmutan y que $\langle 0 | \hat{\Psi}^\dagger = 0$ y $\hat{\Psi} | 0 \rangle = 0$, tenemos que:

$$\begin{aligned} &\langle 0 | \hat{\Psi}_a(x'_1) \hat{\Psi}_b(x'_2) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \hat{\Psi}_a(x'_1) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_b(x'_2) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \left(\delta(x'_1 - x_1) - \hat{\Psi}_a^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_a(x'_1) \right) \left(\delta(x'_2 - x_2) - \hat{\Psi}_b^\dagger(x_2) \hat{\Psi}_b(x'_2) \right) | 0 \rangle \\ &= \delta(x'_1 - x_1) \delta(x'_2 - x_2). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Haciendo un cálculo análogo para los demás términos nos queda

$$\langle 0 | \hat{S}(x'_1, x'_2) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) | 0 \rangle = \delta(x'_1 - x_1) \delta(x'_2 - x_2) + \delta(x'_1 - x_2) \delta(x'_2 - x_1). \quad (5.6)$$

Vemos entonces que

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{c} \hat{c}^\dagger | 0 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx'_2 \int_{-\infty}^{x'_2} dx'_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \langle 0 | \hat{S}(x'_1, x'_2) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) | 0 \rangle \Phi_0(x'_1, x'_2) \Phi_0(x_1, x_2) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \Phi_0(x_1, x_2)^2 = 1. \end{aligned}$$

Notar que, al hacer la integración $\int_{-\infty}^{\infty} dx'_2 \int_{-\infty}^{x'_2} dx'_1$, el término $\delta(x'_2 - x_1) \delta(x'_1 - x_2)$ no contribuye:

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} dx'_2 \int_{-\infty}^{x'_2} dx'_1 \delta(x'_2 - x_1) \delta(x'_1 - x_2) \Phi_0(x'_1, x'_2) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx'_2 \delta(x'_2 - x_1) \Theta(x'_2 - x_2) \Phi_0(x_2, x'_2) = 0, \end{aligned}$$

pues $x_1 < x_2$. Vemos entonces que la definición del operador creación mediante la ec. (5.3) sigue siendo consistente con la condición de normalización para el estado de un par $\langle 0 | \hat{c} \hat{c}^\dagger | 0 \rangle = 1$.

Ahora escribamos los operadores de creación y aniquilación de pares. Nos interesa establecer una relación de orden en las coordenadas de las partículas del sistema, similar a como hicimos en (5.3). Esto debido a que al haber definido un orden en las posiciones de las partículas para cada par debemos ser consistentes y tomar en cuenta el orden ahora para las posiciones de las 4 partículas. En la fig. (5.2) se muestran las maneras en que podemos ordenar las 4 partículas de nuestro sistema, si en primera instancia sólo nos fijamos a qué par pertenece cada partícula, y no de qué especie es. Tomando en cuenta estos 6 posibles órdenes en las posiciones de las partículas de cada par, podemos escribir

$$\begin{aligned} (\hat{c}^\dagger)^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_4 \int_{-\infty}^{x_4} dx_3 \int_{-\infty}^{x_3} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \{ \hat{S}^\dagger(x_3, x_4) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \Phi_0(x_1, x_2) \Phi_0(x_3, x_4) \\ &\quad + \hat{S}^\dagger(x_2, x_4) \hat{S}^\dagger(x_1, x_3) \Phi_0(x_1, x_3) \Phi_0(x_2, x_4) \\ &\quad + \hat{S}^\dagger(x_2, x_3) \hat{S}^\dagger(x_1, x_4) \Phi_0(x_1, x_4) \Phi_0(x_2, x_3) \\ &\quad + \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4) \Phi_0(x_1, x_2) \Phi_0(x_3, x_4) \\ &\quad + \hat{S}^\dagger(x_1, x_3) \hat{S}^\dagger(x_2, x_4) \Phi_0(x_1, x_3) \Phi_0(x_2, x_4) \\ &\quad + \hat{S}^\dagger(x_1, x_4) \hat{S}^\dagger(x_2, x_3) \Phi_0(x_1, x_4) \Phi_0(x_2, x_3) \}. \end{aligned} \tag{5.7}$$

Para no marearnos con notación, interpretemos estos términos. Por ejemplo, $\hat{S}^\dagger(x_3, x_4) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2)$ me crea primero un par en (x_1, x_2) y luego otro en (x_3, x_4) , $\hat{S}^\dagger(x_2, x_4) \hat{S}^\dagger(x_1, x_3)$ me crea el primero en (x_1, x_3) y el segundo en (x_2, x_4) , y así de forma análoga para los demás términos. A modo de guía, el lector puede revisar la ec. (5.7) acompañándose de la tabla de la fig. (5.2), observando que en la expresión para $(\hat{c}^\dagger)^2$ contemplamos las

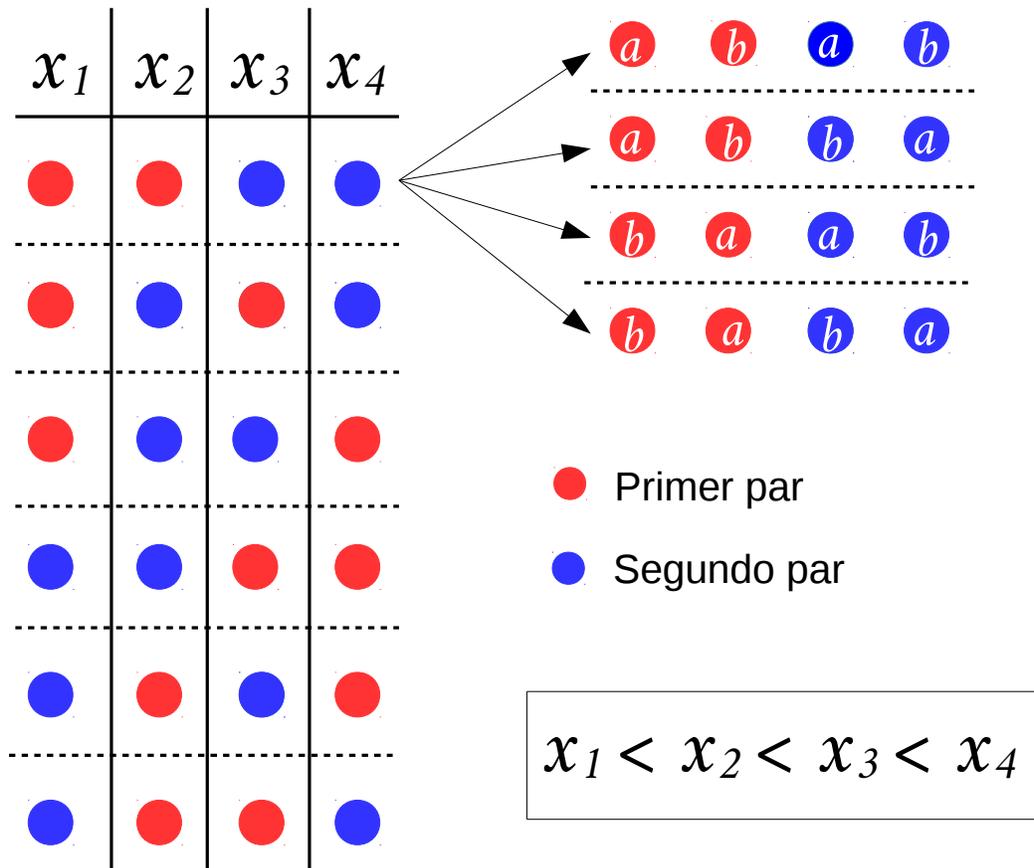


Figura 5.2: Todas las posibles formas de ordenar 4 partículas, 2 tipo a y 2 tipo b , en una dimensión. Vemos que hay 6 formas de disponer las 4 partículas, si sólo nos fijamos a qué par pertenece cada una, ignorando de qué especie son. Para cada una de estas maneras, hay 4 formas de decidir de qué tipo es cada partícula, dado que cada par cuenta con una partícula de cada especie. En la figura se muestra un ejemplo de esto para uno de los 6 casos posibles.

posibles maneras de crear los 2 pares ordenando los casos de la misma forma en que lo hicimos en la tabla. Ejemplo: en la 1^{ra} fila de la tabla tenemos las partículas creadas por el operador $\hat{S}^\dagger(x_3, x_4)\hat{S}^\dagger(x_1, x_2)$, en la 2^{da} las creadas por $\hat{S}^\dagger(x_2, x_4)\hat{S}^\dagger(x_1, x_3)$, y así sucesivamente. Ahora nos podemos preguntar: ¿dará lo mismo en qué orden decida crear los pares en las distintas posiciones? ¿Da igual crear primero un par en (x_1, x_2) y luego otro en (x_3, x_4) que hacerlo al revés? Para responder esta pregunta, básicamente hay que analizar si los operadores $\hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta)$ y $\hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta)$ conmutan. Aquí, llamaremos α, β, γ y δ a 4 índices distintos arbitrarios entre 1, 2, 3 y 4. Veamos el producto

$$\begin{aligned} & \hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta)\hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta) \\ &= \frac{1}{2} \left(\hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\beta) + \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\beta) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\alpha) \right) \left(\hat{\Psi}_a^\dagger(x_\gamma) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\delta) + \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\delta) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\gamma) \right). \end{aligned} \quad (5.8)$$

Recordemos que los operadores de creación fermiónicos anti-conmutan:

$$\begin{aligned} \{ \hat{\Psi}_a^\dagger(x), \hat{\Psi}_a^\dagger(x') \} &= 0 \\ \{ \hat{\Psi}_b^\dagger(x), \hat{\Psi}_b^\dagger(x') \} &= 0. \end{aligned}$$

Con esto, en la expresión (5.8) tenemos por ejemplo el término

$$\begin{aligned} & \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\beta) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\gamma) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\delta) \\ &= \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\gamma) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\beta) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\delta) \\ &= -\hat{\Psi}_a^\dagger(x_\gamma) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\beta) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\delta) \\ &= \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\gamma) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\delta) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\beta) \\ &= \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\gamma) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\delta) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\beta). \end{aligned}$$

Así, vemos que $\left[\hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\beta), \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\gamma) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\delta) \right] = 0$. Como $\left[\hat{\Psi}_a^\dagger, \hat{\Psi}_b^\dagger \right] = 0$, también tenemos que

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\beta), \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\delta) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\gamma) \right] &= 0 \\ \left[\hat{\Psi}_a^\dagger(x_\beta) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\alpha), \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\gamma) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\delta) \right] &= 0 \\ \left[\hat{\Psi}_a^\dagger(x_\beta) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\alpha), \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\delta) \hat{\Psi}_b^\dagger(x_\gamma) \right] &= 0. \end{aligned}$$

Así, llegamos a que

$$\left[\hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta), \hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta) \right] = 0. \quad (5.9)$$

Esta relación de conmutación refleja la simetría de intercambio ante dos pares de la función de onda del sistema, ingrediente que, como mencionamos, es clave para

estudiar si se pueden modelar como bosones compuestos. Con esto, podemos reescribir el operador de creación de 2 pares de la ec. (5.7) como

$$\begin{aligned}
(\hat{c}^\dagger)^2 = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_4 \int_{-\infty}^{x_4} dx_3 \int_{-\infty}^{x_3} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \{ & \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4) \Phi_0(x_1, x_2) \Phi_0(x_3, x_4) \\
& + \hat{S}^\dagger(x_1, x_3) \hat{S}^\dagger(x_2, x_4) \Phi_0(x_1, x_3) \Phi_0(x_2, x_4) \\
& + \hat{S}^\dagger(x_1, x_4) \hat{S}^\dagger(x_2, x_3) \Phi_0(x_1, x_4) \Phi_0(x_2, x_3) \}.
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Similarmente, tenemos el operador de aniquilación de 2 pares:

$$\begin{aligned}
\hat{c}^2 = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dx'_4 \int_{-\infty}^{x'_4} dx'_3 \int_{-\infty}^{x'_3} dx'_2 \int_{-\infty}^{x'_2} dx'_1 \{ & \hat{S}(x'_1, x'_2) \hat{S}(x'_3, x'_4) \Phi_0(x'_1, x'_2) \Phi_0(x'_3, x'_4) \\
& + \hat{S}(x'_2, x'_4) \hat{S}(x'_1, x'_3) \Phi_0(x'_1, x'_3) \Phi_0(x'_2, x'_4) \\
& + \hat{S}(x'_2, x'_3) \hat{S}(x'_1, x'_4) \Phi_0(x'_1, x'_4) \Phi_0(x'_2, x'_3) \}.
\end{aligned} \tag{5.11}$$

Vemos que, para obtener $\langle 0 | \hat{c}^2 (\hat{c}^\dagger)^2 | 0 \rangle$, hay que estudiar términos de la forma

$$\langle 0 | \hat{S}(x'_{\gamma'}, x'_{\delta'}) \hat{S}(x'_{\alpha'}, x'_{\beta'}) \hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta) | 0 \rangle, \tag{5.12}$$

con α', β', γ' y δ' otros 4 índices distintos entre 1, 2, 3 y 4, donde a su vez cada operador \hat{S} y \hat{S}^\dagger tiene 2 términos $\hat{\Psi}_a \hat{\Psi}_b$ o $\hat{\Psi}_a^\dagger \hat{\Psi}_b^\dagger$, según corresponda, como se indica en la ec. (5.4). Al hacer esto, aparecerán productos de la forma

$$\hat{\Psi}_a \hat{\Psi}_a \hat{\Psi}_a^\dagger \hat{\Psi}_a^\dagger \hat{\Psi}_b \hat{\Psi}_b \hat{\Psi}_b^\dagger \hat{\Psi}_b^\dagger$$

(omitimos las posiciones en que van evaluados los operadores para que la notación no sea engorrosa, es sólo para mostrar qué operadores aparecen). Para simplificar un poco la tarea, podemos usar que

$$\langle 0 | \hat{\Psi}_a \hat{\Psi}_a \hat{\Psi}_a^\dagger \hat{\Psi}_a^\dagger \hat{\Psi}_b \hat{\Psi}_b \hat{\Psi}_b^\dagger \hat{\Psi}_b^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{\Psi}_a \hat{\Psi}_a \hat{\Psi}_a^\dagger \hat{\Psi}_a^\dagger | 0 \rangle \langle 0 | \hat{\Psi}_b \hat{\Psi}_b \hat{\Psi}_b^\dagger \hat{\Psi}_b^\dagger | 0 \rangle. \tag{5.13}$$

Luego, mediante las relaciones de anti-conmutación que vimos para operadores fermiónicos, tenemos que

$$\begin{aligned}
& \langle 0 | \hat{\Psi}_a(x'_{\beta'}) \hat{\Psi}_a(x'_{\alpha'}) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\beta) | 0 \rangle \\
& = \langle 0 | \hat{\Psi}_a(x'_{\beta'}) \left[\delta(x'_{\alpha'} - x_\alpha) - \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_a(x'_{\alpha'}) \right] \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\beta) | 0 \rangle \\
& = \delta(x'_{\beta'} - x_\beta) \delta(x'_{\alpha'} - x_\alpha) - \langle 0 | \hat{\Psi}_a(x'_{\beta'}) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_a(x'_{\alpha'}) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\beta) | 0 \rangle \\
& = \delta(x'_{\alpha'} - x_\alpha) \delta(x'_{\beta'} - x_\beta) - \delta(x'_{\alpha'} - x_\beta) \delta(x'_{\beta'} - x_\alpha).
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Como regla nemotécnica, podemos pensar a esto como un determinante

$$\langle 0 | \hat{\Psi}_a(x'_{\beta'}) \hat{\Psi}_a(x'_{\alpha'}) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\alpha) \hat{\Psi}_a^\dagger(x_\beta) | 0 \rangle = \det \begin{vmatrix} \delta(x'_{\alpha'} - x_\alpha) & \delta(x'_{\alpha'} - x_\beta) \\ \delta(x'_{\beta'} - x_\alpha) & \delta(x'_{\beta'} - x_\beta) \end{vmatrix}. \quad (5.15)$$

El cálculo para partículas tipo b es idéntico. En resumen, cuando hagamos (5.12) tendremos muchos términos de la forma

$$\delta(x'_{\alpha'} - x_\alpha) \delta(x'_{\beta'} - x_\beta) \delta(x'_{\gamma'} - x_\gamma) \delta(x'_{\delta'} - x_\delta). \quad (5.16)$$

Pero tenemos una relación de orden en las coordenadas:

$$x_1 < x_2 < x_3 < x_4 \quad \text{y} \quad x'_1 < x'_2 < x'_3 < x'_4.$$

Entonces, cuando hagamos la integración

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx'_4 \int_{-\infty}^{x'_4} dx'_3 \int_{-\infty}^{x'_3} dx'_2 \int_{-\infty}^{x'_2} dx'_1, \quad (5.17)$$

sólo sobrevivirán los términos que contengan

$$\delta(\vec{x}' - \vec{x}) = \delta(x'_1 - x_1) \delta(x'_2 - x_2) \delta(x'_3 - x_3) \delta(x'_4 - x_4), \quad (5.18)$$

donde definimos $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ y $\vec{x}' = (x'_1, x'_2, x'_3, x'_4)$. Ahora bien, al hacer $\langle 0 | \hat{c}^2 (\hat{c}^\dagger)^2 | 0 \rangle$ tendremos $3 \times 3 = 9$ términos de la forma (5.12). Lo que sigue es ver para cada uno de ellos cuántas veces aparece el término $\delta(\vec{x}' - \vec{x})$ y con qué signos. Por ver un par de ejemplos, consideremos los casos

$$\langle 0 | \hat{S}(x'_3, x'_4) \hat{S}(x'_1, x'_2) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4) | 0 \rangle$$

y

$$\langle 0 | \hat{S}(x'_2, x'_4) \hat{S}(x'_1, x'_3) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4) | 0 \rangle.$$

Para estudiar cuántas veces aparecerá el término $\delta(\vec{x}' - \vec{x})$ en cada caso, podemos elaborar tablas como se muestra en las fig. (5.3) y (5.4). Allí, en la tabla derecha ponemos las 4 posibles maneras en las que pueden ser creadas las partículas una vez definidas qué posiciones ocupará cada par y, similarmente, en la tabla izquierda, las 4 posibles formas de destruirlas una vez definido en qué posiciones se destruirán los pares. En principio, tendremos que combinar todas las posibles formas de crear las 4 partículas con todas las posibles formas de destruirlas. Sin embargo, razonamos que tendrán contribución no nula sólo aquellas combinaciones para las que se esté destruyendo el mismo tipo de partícula en las posiciones primadas que las que se crean en sus análogas posiciones sin primar, de lo contrario no aparecerá el término $\delta(\vec{x}' - \vec{x})$. Así, por ejemplo, en la fig. (5.3) vemos que son 4 las combinaciones en las que aparecerá $\delta(\vec{x}' - \vec{x})$, mientras que en la fig. (5.4) observamos que sólo hay dos combinaciones que contribuyen de manera no nula.

- Partículas tipo a
- Partículas tipo b

$$\hat{S}(x'_3, x'_4) \hat{S}(x'_1, x'_2) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4)$$

x'_1	x'_2	x'_3	x'_4	↔	x_1	x_2	x_3	x_4
●	○	●	○		●	○	●	○
●	○	○	●		●	○	○	●
○	●	○	●		○	●	○	●
○	●	●	○		○	●	●	○

Figura 5.3: Tabla derecha: estas son las posibles formas en las que se pueden crear 2 pares, cada uno formado por una partícula tipo a y una tipo b , pidiendo que un par ocupe las posiciones (x_1, x_2) y el otro (x_3, x_4) . Tabla izquierda: análogamente, estas son las formas de destruir 2 pares, uno en (x'_1, x'_2) y el otro en (x'_3, x'_4) . Unimos con flechas aquellas combinaciones para las que se estén destruyendo partículas en las posiciones primadas análogas a las posiciones sin primar donde fueron creadas.

- Partículas tipo a
- Partículas tipo b

$$\hat{S}(x'_2, x'_4) \hat{S}(x'_1, x'_3) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4)$$

x'_1	x'_2	x'_3	x'_4	↔	x_1	x_2	x_3	x_4
●	○	○	●		●	○	○	●
○	○	●	●		●	○	●	○
●	●	○	○		○	●	○	●
○	●	●	○		○	●	●	○

Figura 5.4: Tabla derecha: estas son las posibles formas en las que se pueden crear 2 pares, cada uno formado por una partícula tipo a y una tipo b , pidiendo que uno de ellos ocupe las posiciones (x_1, x_2) y el otro (x_3, x_4) . Tabla izquierda: análogamente, estas son las formas de destruir 2 pares, uno en (x'_2, x'_4) y el otro en (x'_1, x'_3) . Unimos con flechas aquellas combinaciones para las que se estén destruyendo partículas en las posiciones primadas análogas a las posiciones sin primar donde fueron creadas.

Pero además de ver cuántas veces aparece una contribución no nula hay que ver con qué signo aparece $\delta(\vec{x}' - \vec{x})$. Para eso, hacemos uso de la regla nemotécnica (5.15) y procedemos para cada combinación que contribuye como se indica en las fig. (5.5) y (5.6). El procedimiento sería el siguiente

1. Dibujamos 4 partículas a seguidas de 4 partículas b .
2. Arriba de estas 4 partículas de cada especie escribimos el operador $\hat{S}\hat{S}\hat{S}^\dagger\hat{S}^\dagger$ que corresponda al caso que estamos analizando.
3. Vemos en la tabla las posiciones de las partículas, y escribimos la operación que crea y destruye estas partículas, ordenando los operadores $\hat{\Psi}$ y $\hat{\Psi}^\dagger$ según aparecen en $\hat{S}\hat{S}\hat{S}^\dagger\hat{S}^\dagger$ (ej: en la fig. (5.5) hay una partícula tipo b en x'_1 , entonces me fijo en qué orden se encuentra x'_1 en la operación $\hat{S}\hat{S}\hat{S}^\dagger\hat{S}^\dagger$ y anoto $\hat{\Psi}_b(x'_1)$ abajo del círculo negro que ocupa esa posición).
4. Hacer uso de la regla nemotécnica (5.15) para ver el signo con que aparece $\delta(\vec{x}' - \vec{x})$.

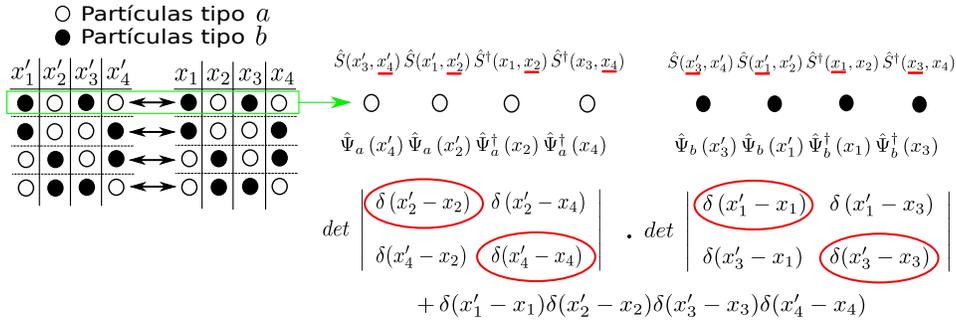


Figura 5.5: Procedimiento para ver con qué signo aparece $\delta(x'_1 - x_1)\delta(x'_2 - x_2)\delta(x'_3 - x_3)\delta(x'_4 - x_4)$ en las contribuciones no nulas para el caso $\langle 0|\hat{S}(x'_1, x'_2)\hat{S}(x'_3, x'_4)\hat{S}^\dagger(x_1, x_2)\hat{S}^\dagger(x_3, x_4)|0\rangle$.

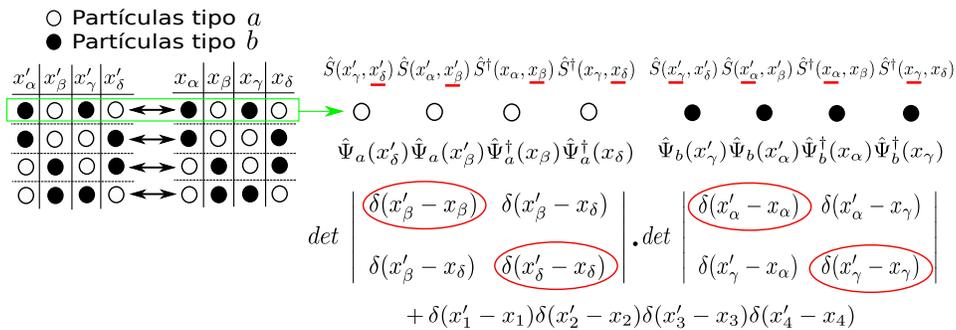


Figura 5.7: Análisis de los casos de la forma $\hat{S}(x'_\gamma, x'_\delta)\hat{S}(x'_\alpha, x'_\beta)\hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta)\hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta)$ para ver cómo aportan sus contribuciones no nulas.

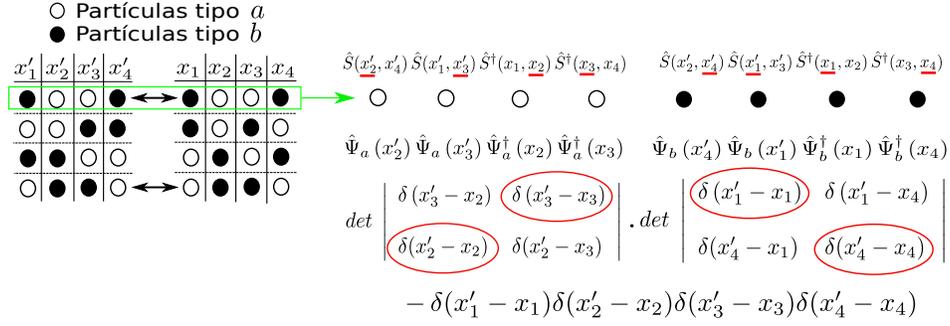


Figura 5.6: Procedimiento para ver con qué signo aparece $\delta(x'_1 - x_1) \delta(x'_2 - x_2) \delta(x'_3 - x_3) \delta(x'_4 - x_4)$ en las contribuciones no nulas para el caso $\langle 0 | \hat{S}(x'_2, x'_4) \hat{S}(x'_1, x'_3) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4) | 0 \rangle$.

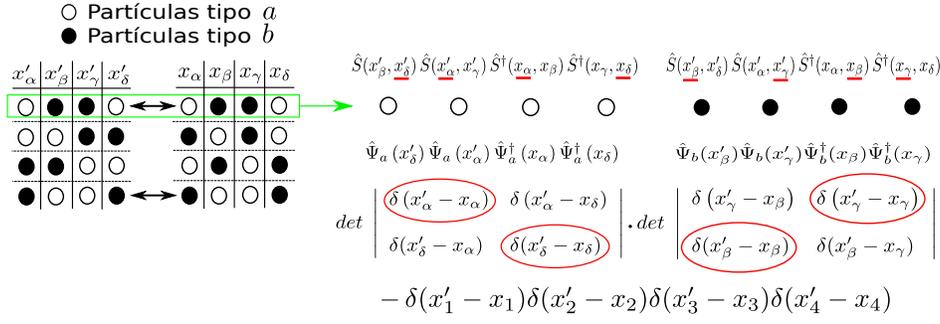


Figura 5.8: Análisis de los casos de la forma $\hat{S}(x'_\beta, x'_\delta) \hat{S}(x'_\alpha, x'_\gamma) \hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta)$ para ver cómo aportan sus contribuciones no nulas.

Una vez entendimos cómo es el procedimiento, en principio habría que hacerlo para los 9 términos (5.12). Pero no será necesario. Ver que podemos agrupar estos 9 términos en 2 tipos de casos:

$$\left. \begin{array}{l} \hat{S}(x'_3, x'_4) \hat{S}(x'_1, x'_2) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4) \\ \hat{S}(x'_1, x'_3) \hat{S}(x'_2, x'_4) \hat{S}^\dagger(x_2, x_4) \hat{S}^\dagger(x_1, x_3) \\ \hat{S}(x'_1, x'_4) \hat{S}(x'_2, x'_3) \hat{S}^\dagger(x_2, x_3) \hat{S}^\dagger(x_1, x_4) \end{array} \right\} \hat{S}(x'_\gamma, x'_\delta) \hat{S}(x'_\alpha, x'_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta)$$

$$\left. \begin{array}{l} \hat{S}(x'_1, x'_2) \hat{S}(x'_3, x'_4) \hat{S}^\dagger(x_1, x_3) \hat{S}^\dagger(x_2, x_4) \\ \hat{S}(x'_1, x'_2) \hat{S}(x'_3, x'_4) \hat{S}^\dagger(x_1, x_4) \hat{S}^\dagger(x_2, x_3) \\ \hat{S}(x'_1, x'_3) \hat{S}(x'_2, x'_4) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4) \\ \hat{S}(x'_1, x'_3) \hat{S}(x'_2, x'_4) \hat{S}^\dagger(x_1, x_4) \hat{S}^\dagger(x_2, x_3) \\ \hat{S}(x'_1, x'_4) \hat{S}(x'_2, x'_3) \hat{S}^\dagger(x_1, x_2) \hat{S}^\dagger(x_3, x_4) \\ \hat{S}(x'_1, x'_4) \hat{S}(x'_2, x'_3) \hat{S}^\dagger(x_1, x_3) \hat{S}^\dagger(x_2, x_4) \end{array} \right\} \hat{S}(x'_\beta, x'_\delta) \hat{S}(x'_\alpha, x'_\gamma) \hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta).$$

(5.19)

En la fig. (5.7) podemos ver que en los términos de la forma

$$\hat{S}(x'_\alpha, x'_\beta) \hat{S}(x'_\gamma, x'_\delta) \hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta)$$

aparecen 4 contribuciones no nulas. Se puede ver que en todas ellas $\delta(\vec{x}' - \vec{x})$ va con un signo +. En la fig. (5.8) identificamos que los términos de la forma

$$\hat{S}(x'_\beta, x'_\delta) \hat{S}(x'_\alpha, x'_\gamma) \hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta)$$

tienen 2 contribuciones no nulas, y se ve que en ambas $\delta(\vec{x}' - \vec{x})$ va con un signo -. Así, nos queda que

$$\langle 0 | \hat{S}(x'_\gamma, x'_\delta) \hat{S}(x'_\alpha, x'_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta) | 0 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^4 4 \delta(\vec{x}' - \vec{x}) = \delta(\vec{x}' - \vec{x})$$

y

$$\langle 0 | \hat{S}(x'_\beta, x'_\delta) \hat{S}(x'_\alpha, x'_\gamma) \hat{S}^\dagger(x_\alpha, x_\beta) \hat{S}^\dagger(x_\gamma, x_\delta) | 0 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^4 (-2) \delta(\vec{x}' - \vec{x}) = -\frac{1}{2} \delta(\vec{x}' - \vec{x}).$$

Luego, volviendo a la ec. (5.1), y viendo las expresiones (5.10) y (5.11) para los operadores $(\hat{c}^\dagger)^2$ y \hat{c}^2 , nos queda la expresión para χ_2

$$\begin{aligned} \chi_2 = & 2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_4 \int_{-\infty}^{x_4} dx_3 \int_{-\infty}^{x_3} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \{ \Phi_0(x_1, x_2)^2 \Phi_0(x_3, x_4)^2 + \Phi_0(x_1, x_3)^2 \Phi_0(x_2, x_4)^2 \\ & + \Phi_0(x_1, x_4)^2 \Phi_0(x_2, x_3)^2 - \Phi_0(x_1, x_2) \Phi_0(x_3, x_4) \Phi_0(x_1, x_3) \Phi_0(x_2, x_4) \\ & - \Phi_0(x_1, x_2) \Phi_0(x_3, x_4) \Phi_0(x_1, x_4) \Phi_0(x_2, x_3) \\ & - \Phi_0(x_1, x_3) \Phi_0(x_2, x_4) \Phi_0(x_1, x_4) \Phi_0(x_2, x_3) \}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

5.2. Obtención de χ_2 a partir de la pureza

Otra forma de calcular el factor χ_2 es a partir del cálculo de la entropía lineal del estado que, recordemos está definida como

$$\chi_2 = 1 - \mathcal{P} = 1,$$

con $\mathcal{P} = \text{Tr}(\rho_a^2)$ la pureza. Veamos entonces cómo calcular la pureza a partir de la función de onda que describe al par en el estado fundamental. Consideremos el sistema formado por un par de fermiones en el estado descrito por la función de onda real $\Phi_0(x_a, x_b)$, normalizada según

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_a \int_{-\infty}^{\infty} dx_b \Phi_0(x_a, x_b)^2 = 1.$$

En la base coordenada, la matriz densidad de este sistema sería

$$\langle x'_a | \otimes \langle x'_b | \hat{\rho} | x_a \rangle \otimes | x_b \rangle = \Phi_0(x'_a, x'_b) \Phi_0(x_a, x_b). \quad (5.21)$$

Si tomamos la traza parcial sobre el espacio de Hilbert de la partícula tipo b , nos queda la matriz densidad reducida para la partícula tipo a

$$\hat{\rho}_a = \int_{-\infty}^{\infty} dx_b \langle x_b | \hat{\rho} | x_b \rangle, \quad (5.22)$$

con lo cual

$$\langle x'_a | \hat{\rho}_a | x_a \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx_b \Phi_0(x'_a, x_b) \Phi_0(x_a, x_b). \quad (5.23)$$

Tomando ahora la traza de la matriz densidad reducida al cuadrado, nos queda la pureza como

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_a \langle x_a | \hat{\rho}_a^2 | x_a \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_a \int_{-\infty}^{\infty} dx'_a \langle x_a | \hat{\rho}_a | x'_a \rangle \langle x'_a | \hat{\rho}_a | x_a \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_a \int_{-\infty}^{\infty} dx'_a \int_{-\infty}^{\infty} dx_b \int_{-\infty}^{\infty} dx'_b \Phi_0(x_a, x_b) \Phi_0(x'_a, x_b) \Phi_0(x_a, x'_b) \Phi_0(x'_a, x'_b). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Cambiando los nombres a las variables de integración por $x_1 = x_a$, $x_2 = x_b$, $x_3 = x'_a$ y $x_4 = x'_b$, nos queda la expresión para la pureza

$$\mathcal{P} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \int_{-\infty}^{\infty} dx_4 \Phi_0(x_1, x_2) \Phi_0(x_3, x_2) \Phi_0(x_3, x_4) \Phi_0(x_1, x_4). \quad (5.25)$$

Con esto nos queda

$$\begin{aligned} \chi_2 &= 1 - \mathcal{P} = 1 \\ &\quad - \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \int_{-\infty}^{\infty} dx_4 \Phi_0(x_1, x_2) \Phi_0(x_3, x_4) \Phi_0(x_1, x_4) \Phi_0(x_3, x_2). \end{aligned} \quad (5.26)$$

Notar que aquí no usamos la simetría de intercambio ante las partículas del par interactuante de la función de onda. Por lo que si cambiáramos el 1 en esta expresión por la integral de la normalización

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \int_{-\infty}^{\infty} dx_4 \Phi_0(x_1, x_2)^2 \Phi_0(x_3, x_4)^2,$$

y estableciéramos un orden en las variables de integración, deberíamos llegar a la expresión (5.20).

5.3. Implementación de la descomposición de Schmidt

Los métodos anteriormente descriptos permiten obtener el factor de normalización χ_2 a partir del cálculo de una integral, lo cual los hace prácticos para ese objetivo. Pero, además, estamos interesados en calcular los cocientes $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$, para lo cual es necesario conocer los coeficientes de Schmidt del estado fundamental (ver Cap. (2), Sec. (2.3)). En esta sección mostramos una manera de implementar numéricamente la descomposición de Schmidt para las funciones de onda que nos interesan en este trabajo, estas son, funciones reales y simétricas ante intercambio de sus partículas.

Si la función de onda de dos partículas, Φ_0 , es real y además simétrica ante intercambio de las partículas, tiene su descomposición de Schmidt de la forma

$$\Phi_0(x_1, x_2) = \sum_n \nu_n \phi_n(x_1) \phi_n(x_2), \quad (5.27)$$

con

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \Phi_0(x_1, x_2)^2 = 1,$$

y donde las funciones reales ϕ_n forman una base ortonormal [14]. Aquí, $|\nu_n| = \sqrt{\lambda_n}$ serían los coeficientes de Schmidt. Esto impone la condición sobre los coeficientes ν_n

$$\sum_n \nu_n^2 = 1.$$

Sea $\{U_j\}$ una base de funciones reales de una variable. Podemos escribir

$$\phi_n(x) = \sum_j c_{jn} U_j(x),$$

con lo cual

$$\Phi_0(x_1, x_2) = \sum_{n,i,j} \nu_n c_{in} c_{jn} U_i(x_1) U_j(x_2),$$

y hay que exigir

$$\delta_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n(x) \phi_m(x) dx = \sum_{i,j} c_{in} \int_{-\infty}^{\infty} U_i(x) U_j(x) dx c_{jm}. \quad (5.28)$$

Ahora,

$$\begin{aligned} \nu_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n(x_1) \Phi_0(x_1, x_2) \phi_n(x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \sum_{i,j} c_{in} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} U_i(x_1) \Phi_0(x_1, x_2) U_j(x_2) dx_1 dx_2 c_{jn}. \end{aligned}$$

Definiendo la matrices

$$[\mathbb{A}]_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} U_i(x_1) \Phi_0(x_1, x_2) U_j(x_2) dx_1 dx_2 \quad \text{y} \quad [\mathbb{S}]_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} U_i(x) U_j(x) dx,$$

podemos escribir

$$\nu_n = \sum_{i,j} c_{ni}^T [\mathbb{A}]_{ij} c_{jn} = \vec{c}_n^T \mathbb{A} \vec{c}_n \quad \text{y} \quad \delta_{nm} = \sum_{i,j} c_{ni}^T [\mathbb{S}]_{ij} c_{jm} = \vec{c}_n^T \mathbb{S} \vec{c}_m, \quad (5.29)$$

con \vec{c}_n un vector columna cuyos elementos son $[c_n]_j = c_{jn}$. A la matriz \mathbb{S} se la llama matriz de overlap. En síntesis, nos queda el problema de autovalores generalizado

$$\mathbb{A} \vec{c}_n = \nu_n \mathbb{S} \vec{c}_n. \quad (5.30)$$

En la práctica claro no podemos trabajar una matriz de dimensión infinita, por lo que será necesario truncarla hasta obtener una normalización

$$\sum_n \nu_n^2 \approx 1$$

tan buena como sea posible. De esta forma, podemos calcular el factor χ_2 como

$$\chi_2 = 1 - \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n^2,$$

con $\lambda_n = \nu_n^2$. Luego, a partir de la relación de recurrencia (2.31), podemos obtener los valores de los factores χ_N para $N \geq 2$ pares de fermiones.

Capítulo 6

Resultados

En los capítulos anteriores obtuvimos la función de onda de un par de fermiones en el estado fundamental para cada modelo trabajado y vimos cómo, a partir de ella, calcular χ_2 y cómo implementar la descomposición de Schmidt para calcular los cocientes $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ entre las constantes de normalización. Aquí procedemos a mostrar y comentar los resultados obtenidos.

6.1. Partículas restringidas a una caja

6.1.1. Cálculo vía el ansatz de cobosones para dos pares

Si restringimos la función de onda a la caja $(x_1, x_2) \in [-L, L] \times [-L, L]$, vemos que ésta viene dada por

$$\Phi_0(x_1, x_2) = \frac{c e^{-\frac{c}{2}|x_1-x_2|}}{\sqrt{2cL + e^{-2cL} - 1}},$$

normalizada según

$$\int_{-L}^L dx_2 \int_{-L}^{x_2} dx_1 \Phi_0(x_1, x_2)^2 = 1.$$

Usando la expresión (5.20), el factor χ_2 nos queda

$$\begin{aligned} \chi_2 = & 2 \frac{c^4}{(2cL + e^{-2cL} - 1)^2} \int_{-L}^L dx_4 \int_{-L}^{x_4} dx_3 \int_{-L}^{x_3} dx_2 \int_{-L}^{x_2} dx_1 \\ & \{ e^{c(x_2-x_1)} e^{c(x_4-x_3)} + e^{c(x_3-x_1)} e^{c(x_4-x_2)} + e^{c(x_4-x_1)} e^{c(x_3-x_2)} \\ & - e^{\frac{c}{2}(x_2-x_1)} e^{\frac{c}{2}(x_4-x_3)} e^{\frac{c}{2}(x_3-x_1)} e^{\frac{c}{2}(x_4-x_2)} - e^{\frac{c}{2}(x_2-x_1)} e^{\frac{c}{2}(x_4-x_3)} e^{\frac{c}{2}(x_4-x_1)} e^{\frac{c}{2}(x_3-x_2)} \\ & - e^{\frac{c}{2}(x_3-x_1)} e^{\frac{c}{2}(x_4-x_2)} e^{\frac{c}{2}(x_4-x_1)} e^{\frac{c}{2}(x_3-x_2)} \}. \end{aligned}$$

Esta integral múltiple se puede evaluar de forma analítica, dando por resultado

$$\chi_2 = \frac{e^{4cL}((2cL - 7)4cL + 31) - 16 e^{2cL}(cL(cL + 2) + 4) + 1}{2(e^{2cL}(2cL - 1) + 1)^2}. \quad (6.1)$$

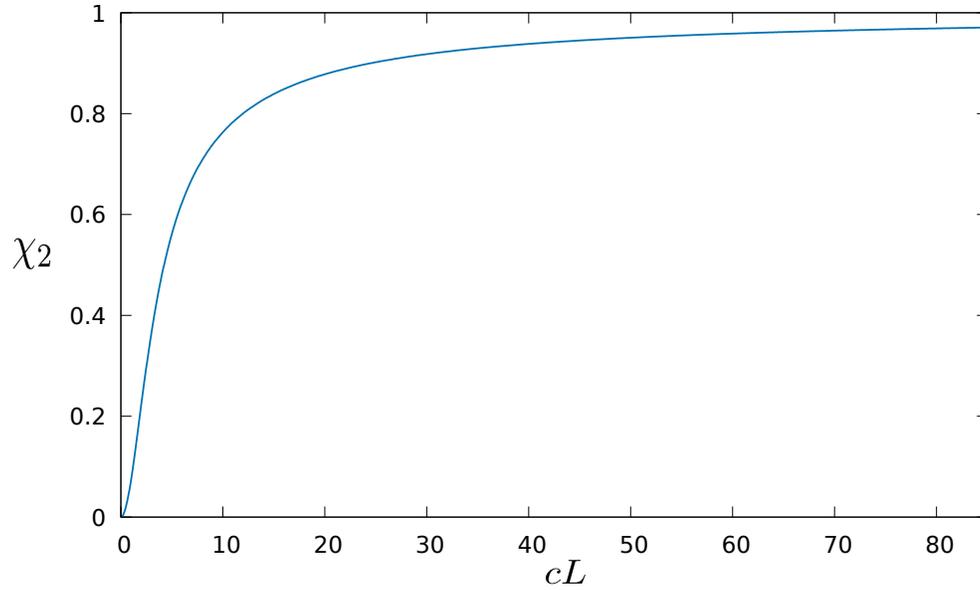


Figura 6.1: factor χ_2 en función de $cL = -\frac{m\Omega L}{\hbar^2}$, con Ω la energía de interacción.

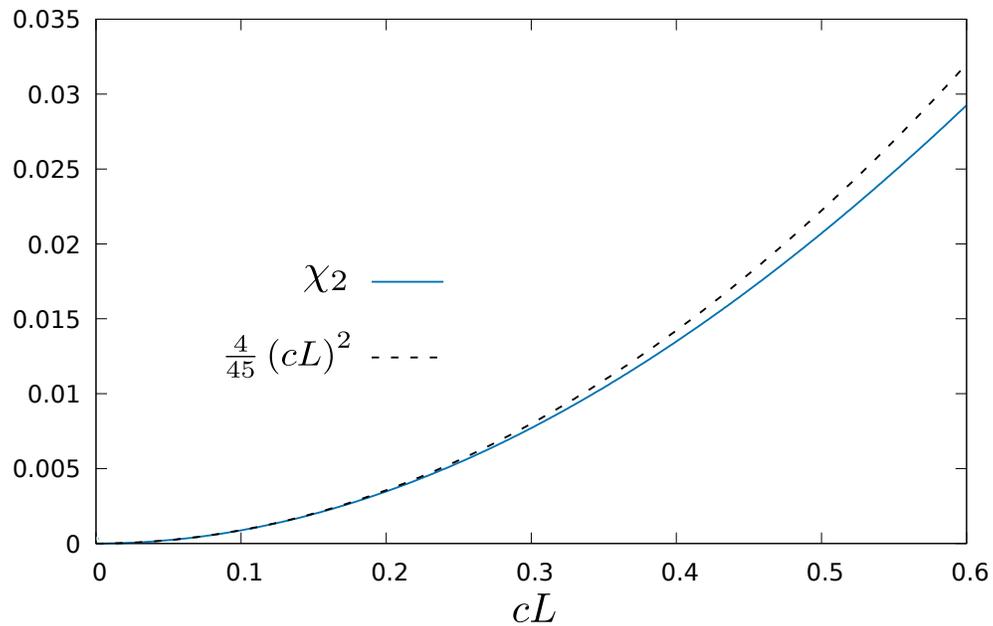


Figura 6.2: Comportamiento asintótico de χ_2 para $cL \ll 1$.

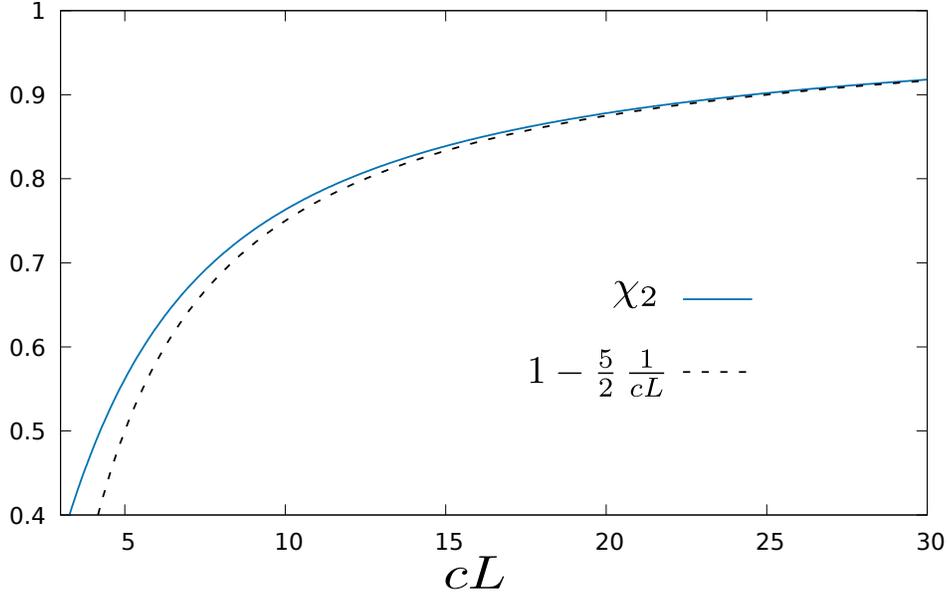


Figura 6.3: Comportamiento asintótico de χ_2 para $cL \gg 1$.

En la fig. (6.1) se muestra un gráfico de χ_2 en función del parámetro cL . Vemos que, a medida que aumenta el ancho de la caja y la energía de interacción entre las partículas del par, éstas se tornan más entrelazadas. Se puede ver que se tienen las aproximaciones asintóticas

$$\chi_2 \approx \frac{4}{45} (cL)^2, \quad \text{para } cL \ll 1,$$

y

$$\chi_2 \approx 1 - \frac{5}{2} \frac{1}{cL}, \quad \text{para } cL \gg 1.$$

En las fig. (6.2) y (6.3) se muestran estas aproximaciones. Recordemos que el parámetro $c = -\frac{m\Omega}{\hbar^2}$ es la inversa del ancho de la función de onda de la coordenada relativa. Esto nos dice que, en el límite de una caja muy grande comparada con la separación característica entre los fermiones, el par como un todo puede modelarse como un bosón. En el otro caso límite, $cL \rightarrow 0$, vemos que $\chi_2 \rightarrow 0$. Esto corresponde al caso de interacción nula entre las partículas, en el cual vimos que el estado del par resulta separable.

6.1.2. Cálculo de χ_2 a partir de la pureza

Vimos que una manera alternativa para calcular χ_2 es calculando primero la pureza \mathcal{P} y, a partir de ella, obtener χ_2 como $1 - \mathcal{P}$. Esto no requiere establecer un orden en las partículas de mi sistema, ya que la pureza es una propiedad intrínseca de la función de onda del par. De todas formas, podemos evitarnos el valor absoluto $|x_2 - x_1|$ escribiendo a la función de onda como

$$\Phi_0(x_1, x_2) = \frac{c e^{-\frac{c}{2}(x_1-x_2)}}{\sqrt{2(2cL + e^{-2cL} - 1)}} \Theta(x_1 - x_2) + \frac{c e^{-\frac{c}{2}(x_2-x_1)}}{\sqrt{2(2cL + e^{-2cL} - 1)}} \Theta(x_2 - x_1), \quad (6.2)$$

la cual normalizamos a

$$\int_{-L}^L dx_2 \int_{-L}^L dx_1 \Phi_0(x_1, x_2)^2 = 1.$$

A partir de la expresión (5.20), la pureza queda

$$\mathcal{P} = \int_{-L}^L dx_1 \int_{-L}^L dx_2 \int_{-L}^L dx_3 \int_{-L}^L dx_4 \Phi_0(x_1, x_2) \Phi_0(x_3, x_4) \Phi_0(x_1, x_4) \Phi_0(x_3, x_2).$$

Esta integral puede resolverse, y nos da

$$\mathcal{P} = \frac{4 e^{2cL} (4 cL^2 + 10 cL + 7) + e^{4cL} (20 cL - 29) + 1}{(e^{2cL} (2 cL - 1) + 1)^2}. \quad (6.3)$$

Se puede verificar que $1 - \mathcal{P}$ coincide con la expresión anterior encontrada para χ_2 en la ec. (6.1).

6.1.3. Cálculo de los cocientes $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$

Recordemos que si se dispone de los coeficientes de Schmidt de un estado puede calcularse el factor de normalización χ_N para N pares a partir de la relación de recurrencia

$$\chi_N = \sum_{m=1}^N \frac{(-1)^{m+1} (N-1)! M(m) \chi_{N-m}}{(N-m)!},$$

con

$$M(m) = \sum_i (\lambda_i)^m.$$

Procedemos a calcular los coeficientes de Schmidt para distintos valores de cL . Para este punto se utilizaron como base de funciones las BSplines. Básicamente, son un conjunto de funciones linealmente independientes que permiten aproximar cualquier función definida en un intervalo finito en términos de polinomios a trozos. Se definen a partir de la cantidad n de funciones linealmente independientes que deseemos, el grado d de los polinomios a trozos aproximantes y un conjunto de $n + d + 1$ valores en el intervalo donde definamos la función a aproximar llamados *knots*. A los coeficientes del desarrollo de la función en términos de funciones base BSplines se los llama puntos de control. En el Apéndice A se muestra una breve idea de qué son las BSplines, cómo se definen y los *knots* que usamos. Adimensionalizamos las posiciones a la longitud L , definiendo las variables $y_1 = \frac{x_1}{L}$ e $y_2 = \frac{x_2}{L}$, con lo cual la función de onda

adimensionalizada queda

$$\Phi_0(y_1, y_2) = \frac{cL e^{-\frac{cL}{2}|y_1-y_2|}}{\sqrt{2(2cL + e^{-2cL} - 1)}}, \quad (y_1, y_2) \in [-1, 1] \times [-1, 1].$$

Si usamos las funciones base BSplines de grado d , los elementos de matriz serían

$$[\mathbb{A}]_{ij} = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 B_{i,d,knots}(y_1) \frac{cL e^{-\frac{cL}{2}|y_1-y_2|}}{\sqrt{2(2cL + e^{-2cL} - 1)}} B_{j,d,knots}(y_2) dy_1 dy_2. \quad (6.4)$$

Estas integrales pueden resolverse analíticamente, aunque claro se vuelven más complicadas a medida que aumentemos el grado de las BSplines que usemos. Es por eso que para esta parte se usaron BSplines de grado cero. Tomando n puntos de control, las funciones base quedan

$$B_{i,0,knots}(y) = \begin{cases} 1, & y \in [-1 + 2\frac{i}{n}, -1 + 2\frac{i+1}{n}) \\ 0, & y \notin [-1 + 2\frac{i}{n}, -1 + 2\frac{i+1}{n}). \end{cases}$$

para $i = 0, \dots, n-1$. Con esto, tenemos los elementos de matriz

$$[\mathbb{A}]_{ij} = \begin{cases} \frac{8}{\sqrt{2(2cL + e^{-2cL} - 1)}} \left(\frac{e^{-\frac{cL}{n}} - 1}{cL} + \frac{1}{n} \right), & i = j \\ \frac{8}{\sqrt{2(2cL + e^{-2cL} - 1)}} \frac{(\cosh(\frac{cL}{n}) - 1) e^{-\frac{cL|i-j|}{n}}}{cL}, & i \neq j. \end{cases}$$

En cuanto a los elementos de matriz de overlap, vemos que son

$$[\mathbb{S}]_{ij} = \int_{-1}^1 B_{i,0,knots}(y) B_{j,0,knots}(y) dy = \delta_{ij} \frac{2}{n}.$$

De esta forma, podemos evaluar analíticamente los elementos de matriz de \mathbb{A} en función de cL y el número de puntos de control. Aquí, se tomaron entre 1000 y 5000 puntos de control para cL hasta 125, pidiendo siempre un error relativo en χ_2 menor o igual que 10^{-6} .

Podemos analizar la distribución de los coeficientes λ_n (que son los coeficientes de Schmidt al cuadrado) para distintos valores de el parámetro cL y de la entropía lineal, para ver de una manera gráfica cuán entrelazadas están las partículas que componen al par interactuante. En la fig. (6.4) podemos ver cómo dicha distribución se va haciendo más uniforme a medida que aumenta el grado de entrelazamiento. También podemos analizar los modos de Schmidt. En la fig. (6.5) se muestran las gráficas de los primeros 4 modos de Schmidt, escritos en la base de BSplines de grado 0, en función del parámetro adimensional $y = \frac{x}{L}$. Podemos ver que estos modos no son simétricos alrededor del origen, a pesar de que el sistema que consideramos sí es simétrico ante la inversión del eje x . Sin embargo, si invertimos la posición de una sola de las partículas del par y no cambiamos la posición de la otra, vemos que el

sistema físicamente es diferente. Esta asimetría se puede apreciar en la forma de las gráficas de los modos. Para visualizar gráficamente la descomposición de Schmidt del estado fundamental, en las fig. (6.6) y (6.7) se muestra la diferencia entre el estado fundamental y su desarrollo en modos de Schmidt. Como podemos ver, cerca de los extremos de la caja la aproximación es menos precisa que en el interior.

En cuanto a los cocientes $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$, en la fig. (6.8) se muestran los valores obtenidos para los distintos valores de cL que tomamos para N desde 1 hasta 5. Vemos como todos estos convergen a 1 para $cL \rightarrow \infty$. También vemos que $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N} < \frac{\chi_N}{\chi_{N-1}}$ [21]. Esto nos dice que a medida que agreguemos partículas a nuestro sistema, los pares de fermiones interactuantes tendrán un comportamiento cada vez menos bosónico.

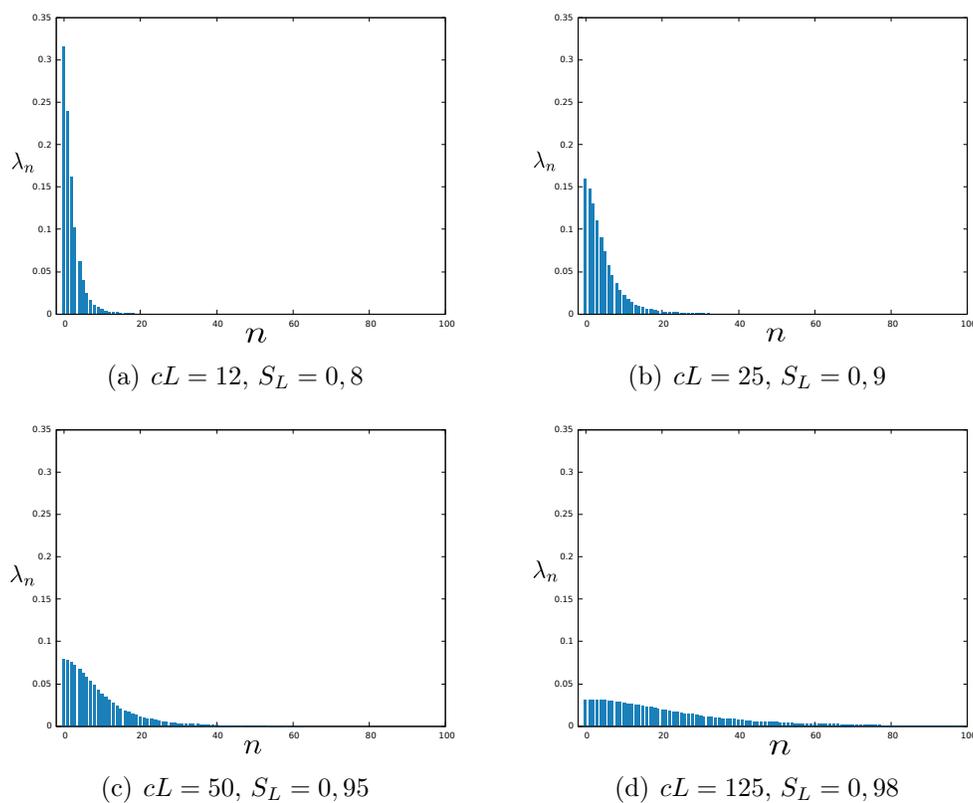


Figura 6.4: Distribución de los números de ocupación λ_n de los orbitales naturales para fermiones interactuantes restringidos a una caja.

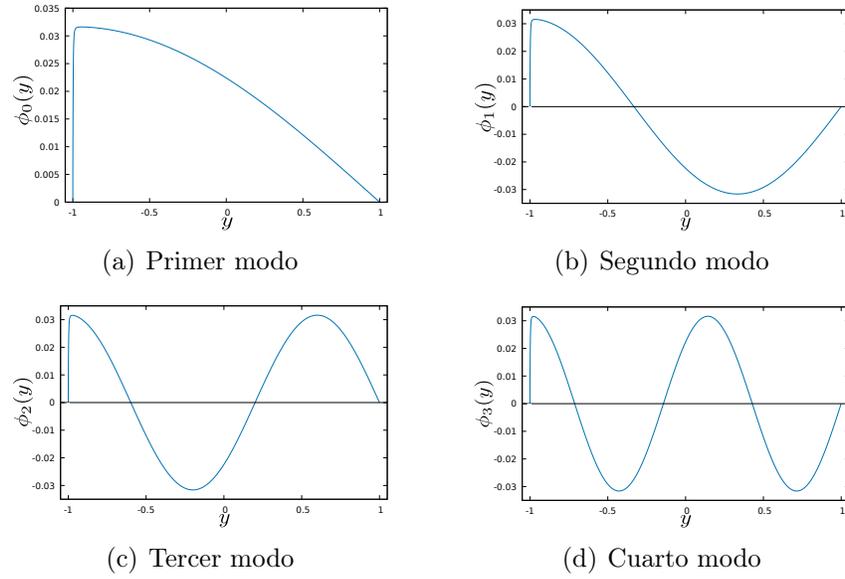


Figura 6.5: Modos de Schmidt para partículas en una caja para $cL=7,5$ y $n = 2000$ puntos de control.

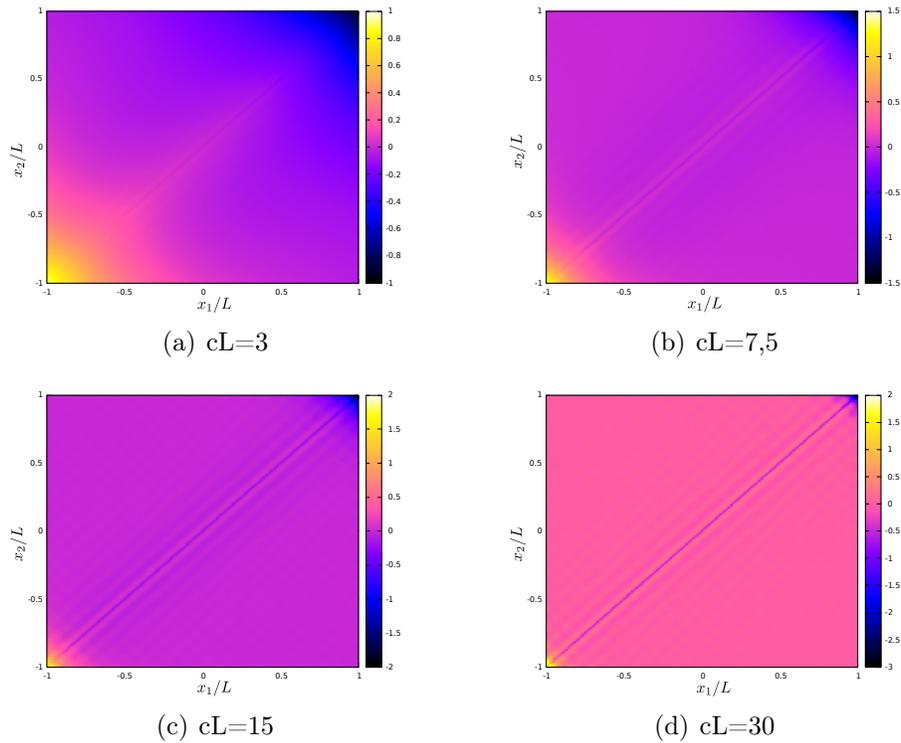


Figura 6.6: Diferencia entre el estado fundamental y su desarrollo en modos de Schmidt con los primeros 30 modos.

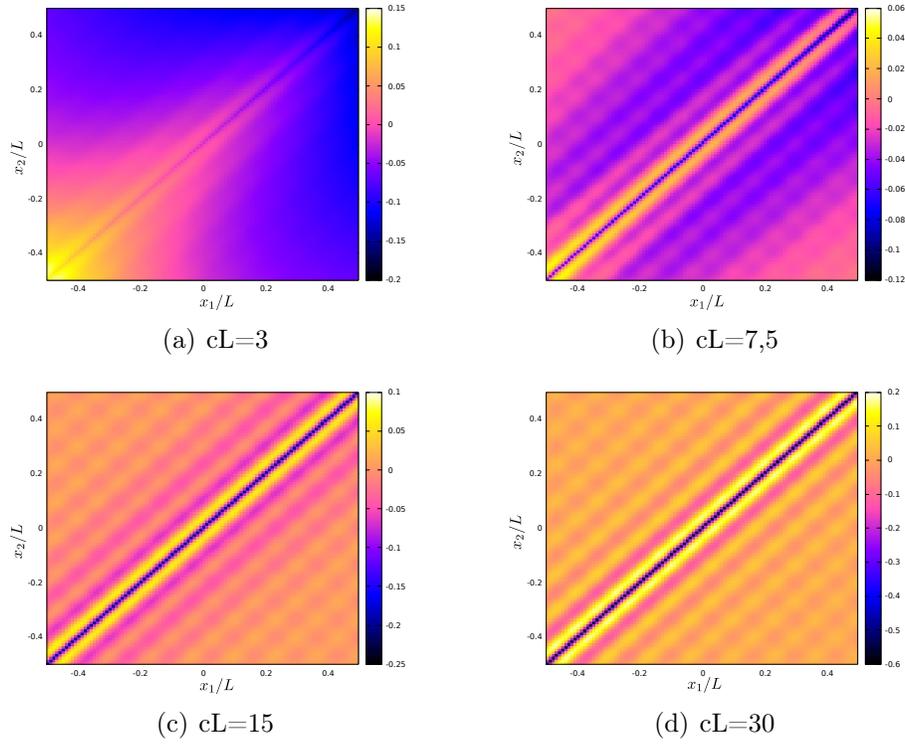


Figura 6.7: Diferencia entre el estado fundamental y su desarrollo en modos de Schmidt con los primeros 30 modos (representación ampliada en el intervalo $[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$).

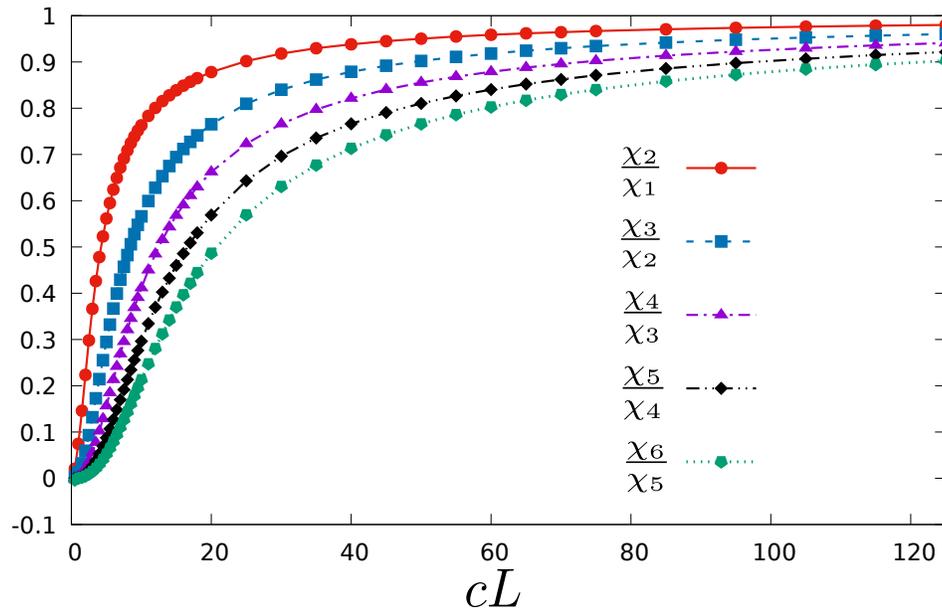


Figura 6.8: Cocientes $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ en función del parámetro $cL = -\frac{m\Omega L}{\hbar^2}$, con $2L$ el ancho de la caja y Ω la energía de interacción.

6.2. Fermiones interactuantes en una trampa armónica

Dado que la función de onda de un par de fermiones en la trampa armónica está definida en términos de funciones especiales como son las parabólicas cilíndricas, podemos darnos cuenta de antemano de la dificultad de hallar una expresión analítica para χ_2 , ya sea en función de la energía de interacción o de la energía del estado fundamental. Así que en principio habrá que evaluar integrales numéricamente. Pero antes, intentemos trabajar aparte los casos $\Omega = 0$, $\Omega \rightarrow -\infty$ y $\Omega \rightarrow \infty$ (recordar que el potencial de interacción era $\Omega \delta(x_1 - x_2)$), para los cuales la función de onda sí está dada en términos de funciones elementales.

6.2.1. $\Omega = 0$

Recordemos que en el régimen de interacción nula tenemos un estado separable dado por la función de onda

$$\Phi_{\text{trampa}}(x_1, x_2) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)},$$

la cual está normalizada a

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \Phi_0(x_1, x_2)^2 = 1.$$

Vimos que el factor χ_2 puede calcularse como

$$\chi_2 = 1 - \mathcal{P},$$

con la pureza dada por

$$\mathcal{P} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_4 \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \Phi_0(x_1, x_2) \Phi_0(x_3, x_4) \Phi_0(x_1, x_4) \Phi_0(x_3, x_2).$$

En este caso, tenemos un estado separable, pues la función de onda puede escribirse de la forma $\Phi_0(x_1, x_2) = \phi(x_1)\phi(x_2)$, por lo que la pureza queda

$$\mathcal{P} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_4 \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \phi(x_1)^2 \phi(x_2)^2 \phi(x_3)^2 \phi(x_4)^2 = 1.$$

Como esperábamos, la entropía lineal da cero para estados separables, por lo que es totalmente inválida la aproximación de cobosones en este régimen.

6.2.2. $\Omega \longrightarrow -\infty$

En este límite, vimos que la función de onda está dada por

$$\Phi_{\text{trampa}}(x_1, x_2) \xrightarrow{\gamma \rightarrow -\infty} \sqrt{2} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} \left(-\frac{2\lambda}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{4\hbar}(x_1+x_2)^2} e^{-\sqrt{-\lambda} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} |x_1-x_2|},$$

la cual esta normalizada a

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \Phi_0(x_1, x_2)^2 = 1.$$

Aquí adimensionalizamos las coordenadas y al función de onda a la amplitud característica del oscilador armónico: $y = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} x$. Algo que nos será muy útil es que

$$\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} 2\sqrt{-\lambda} e^{-2\sqrt{-\lambda}r} = \delta(r), \quad r > 0^1.$$

Con esto, identificamos que

$$\Phi_0(y_1, y_2)^2 \xrightarrow{\gamma \rightarrow -\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}(y_1+y_2)^2} \delta(|y_1 - y_2|).$$

Recordemos la expresión hallada para χ_2 en la ec. (5.20). Ver que, habiendo establecido la relación de orden $y_1 < y_2 < y_3 < y_4$,

$$\Phi_0(y_1, y_2)^2 \Phi_0(y_3, y_4)^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\{(y_1+y_2)^2+(y_3+y_4)^2\}} \delta(y_2 - y_1) \delta(y_4 - y_3), \quad (6.5)$$

$$\Phi_0(y_1, y_3)^2 \Phi_0(y_2, y_4)^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\{(y_1+y_3)^2+(y_2+y_4)^2\}} \delta(y_1 - y_3) \delta(y_2 - y_4),$$

$$\Phi_0(y_1, y_4)^2 \Phi_0(y_2, y_3)^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\{(y_1+y_4)^2+(y_2+y_3)^2\}} \delta(y_1 - y_4) \delta(y_2 - y_3),$$

$$\begin{aligned} & \Phi_0(y_1, y_2) \Phi_0(y_3, y_4) \Phi_0(y_1, y_3) \Phi_0(y_2, y_4) \\ &= -\frac{8\lambda}{\pi} e^{-\frac{1}{4}\{(y_1+y_2)^2+(y_3+y_4)^2+(y_1+y_3)^2+(y_2+y_4)^2\}} e^{-\sqrt{-\lambda}\{y_2-y_1+y_4-y_3+y_3-y_1+y_4-y_2\}} \\ &= -\frac{8\lambda}{\pi} e^{-\frac{1}{4}\{(y_1+y_2)^2+(y_3+y_4)^2+(y_1+y_3)^2+(y_2+y_4)^2\}} e^{-2\sqrt{-\lambda}(y_4-y_1)} \\ &= \frac{4}{\pi} \sqrt{-\lambda} e^{-\frac{1}{4}\{(y_1+y_2)^2+(y_3+y_4)^2+(y_1+y_3)^2+(y_2+y_4)^2\}} \delta(y_4 - y_1), \end{aligned}$$

¹Esta Delta de Dirac estaría normalizada según $\int_0^{\infty} \delta(r) dr = 1$

$$\begin{aligned}
& \Phi_0(y_1, y_2)\Phi_0(y_3, y_4)\Phi_0(y_1, y_4)\Phi_0(y_2, y_3) \\
&= -\frac{8\lambda}{\pi} e^{-\frac{1}{4}\{(y_1+y_2)^2+(y_3+y_4)^2+(y_1+y_4)^2+(y_2+y_3)^2\}} e^{-2\sqrt{-\lambda}(y_4-y_1)} \\
&= \frac{4}{\pi} \sqrt{-\lambda} e^{-\frac{1}{4}\{(y_1+y_2)^2+(y_3+y_4)^2+(y_1+y_4)^2+(y_2+y_3)^2\}} \delta(y_4 - y_1),
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
& \Phi_0(y_1, y_3)\Phi_0(y_2, y_4)\Phi_0(y_1, y_4)\Phi_0(y_2, y_3) \\
&= -\frac{8\lambda}{\pi} e^{-\frac{1}{4}\{(y_1+y_3)^2+(y_2+y_4)^2+(y_1+y_4)^2+(y_2+y_3)^2\}} e^{-2\sqrt{-\lambda}(y_4-y_1)} e^{-2\sqrt{-\lambda}(y_3-y_2)} \\
&= \frac{2}{\pi} e^{-\frac{1}{4}\{(y_1+y_3)^2+(y_2+y_4)^2+(y_1+y_4)^2+(y_2+y_3)^2\}} \delta(y_4 - y_1)\delta(y_3 - y_2).
\end{aligned}$$

Dado que $x_1 < x_2 < x_3 < x_4$, el término (6.5) representa la situación en la que tenemos las 2 partículas de un par interactuante en la misma posición $x_1 = x_2$ y, a la derecha de éste, otro par con sus 2 partículas en la posición $x_3 = x_4$. En los demás términos, dado que en todos ellos tenemos un factor $\delta(y_4 - y_1)$, esto corresponde a la situación con las 4 partículas en la misma posición. Pero recordemos que estas partículas son fermiones. El principio de exclusión de Pauli prohíbe que haya 2 fermiones idénticos ocupando el mismo estado, por lo que estos términos deben ser descartados, ya que describen situaciones físicamente prohibidas. Entonces, tenemos que

$$\chi_2 = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dy_4 \int_{-\infty}^{y_4} dy_2 \frac{2}{\pi} e^{-2(y_2^2+y_4^2)} = 1. \quad (6.6)$$

Esto nos dice que en el límite de interacción atractiva muy fuerte entre las partículas del par en una trampa armónica, éstas como un todo siguen un comportamiento totalmente bosónico. Este resultado concuerda con el de partículas en una caja, donde vimos que en este régimen de la energía de interacción ambos modelos representan físicamente el mismo estado.

6.2.3. $\Omega \longrightarrow \infty$

La función de onda en el límite de interacción repulsiva muy fuerte vimos que está dada por

$$\Phi_0(x_1, x_2) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)} |x_1 - x_2|,$$

normalizada con

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{x_2} dx_1 \Phi_0(x_1, x_2)^2 = 1.$$

Aquí, nuevamente utilizamos la adimensionalización $y = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x$. De acuerdo a la expresión (5.20) el factor χ_2 sería:

$$\begin{aligned}
\chi_2 = & 2 \int_{-\infty}^{\infty} dy_4 \int_{-\infty}^{y_4} dy_3 \int_{-\infty}^{y_3} dy_2 \int_{-\infty}^{y_2} dy_1 \frac{4}{\pi^2} e^{-(y_1^2+y_2^2+y_3^2+y_4^2)} \\
& \{ (y_2 - y_1)^2 (y_4 - y_3)^2 + (y_3 - y_1)^2 (y_4 - y_2)^2 + (y_4 - y_1)^2 (y_3 - y_2)^2 \\
& - (y_4 - y_3)(y_2 - y_1)(y_3 - y_1)(y_4 - y_2) - (y_4 - y_3)(y_2 - y_1)(y_4 - y_1)(y_3 - y_2) \\
& - (y_4 - y_2)(y_3 - y_1)(y_4 - y_1)(y_3 - y_2) \}.
\end{aligned} \tag{6.7}$$

Esta integral es trabajosa, pero se puede calcular analíticamente. Da

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \chi_2 = \frac{5}{6} + \frac{2}{\pi} (1 - \sqrt{3}) \approx 0,367295314857. \tag{6.8}$$

Vemos que en este régimen χ_2 alcanza un valor intermedio entre 0 y 1.

6.2.4. Cálculo numérico del factor χ_2 para valores arbitrarios de Ω

Dado que tenemos una trampa armónica, la base que naturalmente se nos ocurre usar es la de autofunciones del oscilador armónico:

$$U_n(y) = \frac{e^{-\frac{1}{2}y^2}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(y). \tag{6.9}$$

Entonces, para hallar los coeficientes de Schmidt habrá que calcular los autovalores de la matriz

$$\begin{aligned}
\mathbb{A}_{n,m} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 dy_2 U_n(y_1) \Phi_0(y_1, y_2) U_m(y_2) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^{n+m} n! m! \pi}} \sqrt{\frac{2}{\pi} \frac{\Gamma(-\lambda)}{\psi\left(\frac{1-\lambda}{2}\right) - \psi\left(-\frac{\lambda}{2}\right)}} \\
&\cdot \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 dy_2 H_n(y_1) H_n(y_2) e^{-\frac{1}{2}(y_1^2+y_2^2)} e^{-\frac{1}{4}(y_1+y_2)^2} D_\lambda(|y_1 - y_2|).
\end{aligned} \tag{6.10}$$

Por ser las autofunciones del oscilador armónico ortonormales la matriz de overlap es la identidad. Antes de proceder directamente con el cálculo de estos elementos de matriz para valores intermedios de γ , implementemos este procedimiento al caso $\Omega \rightarrow \infty$. Esto nos servirá para comparar el resultado que obtengamos para χ_2 a partir de este método con el resultado exacto que ya conocemos. De esta forma, podremos estudiar cuán grande debemos hacer la matriz \mathbb{A} para obtener mejores precisiones y cuánto esfuerzo nos costará armar esta matriz a medida que aumentemos su tamaño. Por otro lado, la función de onda en este límite tiene una expresión analíticamente tratable, lo que nos permitirá obtener tamaños de \mathbb{A} considerables. Recordemos entonces que la función de onda (ya adimensionalizada via $y = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x$)

en este régimen está dada por

$$\Phi_{\text{trampa}}(y_1, y_2) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{1}{2}(y_1^2 + y_2^2)} |y_1 - y_2|,$$

donde usamos la normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy_2 \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \Phi_0(y_1, y_2)^2 = 1.$$

Tenemos entonces la expresión para los elementos de matriz

$$\mathbb{A}_{n,m} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(y_1^2 + y_2^2)}}{\pi 2^{\frac{n+m}{2}} \sqrt{n! m!}} |y_1 - y_2| H_n(y_1) H_m(y_2) dy_1 dy_2.$$

Dada la paridad de los polinomios de Hermite, vemos que

$$\mathbb{A}_{n,m} = \begin{cases} 0, & \text{si } n + m \text{ es impar} \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{y_2} \frac{e^{-(y_1^2 + y_2^2)}}{\pi 2^{\frac{n+m}{2}} \sqrt{n! m!}} \{H_n(y_1) H_m(y_2) + H_n(y_2) H_m(y_1)\} (y_2 - y_1) dy_1 dy_2, & \text{si } n + m \text{ es par.} \end{cases}$$

Usando ahora la propiedad

$$e^{-y_1^2} H_n(y_1) = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial y_1^n} [e^{-y_1^2}],$$

vemos integrando por partes que, para $n, m \geq 2$,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{y_2} e^{-(y_1^2 + y_2^2)} H_n(y_1) H_m(y_2) (y_2 - y_1) dy_1 dy_2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^m}{\partial y_2^m} [e^{-y_2^2}] \frac{\partial^{n-2}}{\partial y_2^{n-2}} [e^{-y_2^2}] dy_2. \end{aligned}$$

Con esto, para $n, m \geq 2$ y $n + m$ par,

$$\mathbb{A}_{n,m} = -\frac{2}{\pi 2^{\frac{n+m}{2}} \sqrt{n! m!}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^{m-1}}{\partial y_2^{m-1}} [e^{-y_2^2}] \frac{\partial^{n-1}}{\partial y_2^{n-1}} [e^{-y_2^2}] dy_2.$$

Integrando por partes podemos obtener la útil propiedad

$$\mathbb{A}_{n+1, m-1} = -\sqrt{\frac{m}{n+1}} \mathbb{A}_{n,m}. \quad (6.11)$$

Significa que basta con calcular los elementos diagonales y los de la primera columna (pues (6.11) no vale para n o m igual a 0) para obtener todos los elementos de matriz de \mathbb{A} . En la fig.(6.9) se muestran el error relativo que tiene el χ_2 obtenido y $1 - \sum \nu_n^2$ en función del tamaño al que truncamos la matriz \mathbb{A} , en escala semi-logarítmica. Como

vemos, es cada vez más costoso lograr mejores normalizaciones y mejor precisión en el χ_2 . Para valores arbitrarios de γ no contamos con una relación de recurrencia para obtener los elementos de matriz de \mathbb{A} como la que encontramos para $\gamma \rightarrow \infty$. Es importante notar que la cantidad de elementos de matriz a calcular crecerá como \mathcal{N}^2 , siendo \mathcal{N} el tamaño al que truncamos la matriz, y cada uno de ellos es una integral bidimensional que debe evaluarse numéricamente, lo cual hace aún más costoso su cálculo.

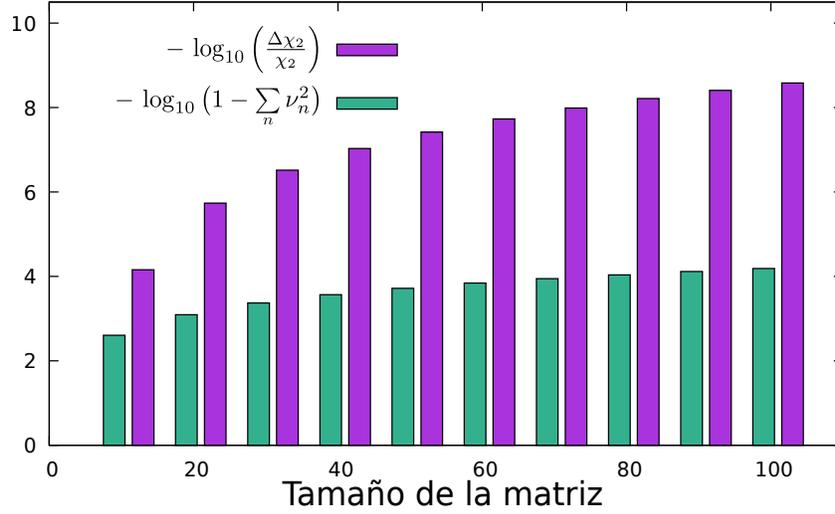


Figura 6.9: Análisis de la precisión que obtenemos al truncar la matriz \mathbb{A} . Llamamos $\frac{\Delta\chi_2}{\chi_2}$ al error relativo que se obtiene para el χ_2 calculado con los coeficientes de Schmidt. Esta cantidad, tomada en $-\log_{10}$, nos da una idea de cuántas cifras de precisión se alcanzan, mientras que $1 - \sum_n \nu_n^2$ nos dice qué tan buena es la normalización obtenida.

Habiendo ya visto cómo aumenta el costo computacional para armar \mathbb{A} a medida que aumentemos su tamaño, elegimos una cantidad a la cual truncaremos el número de filas de \mathbb{A} y luego hacemos un barrido en valores de λ para obtener puntos χ_2 vs γ . Para valores de γ positivos (es decir, interacción repulsiva) y para $\gamma < 0$ pero pequeño se truncó la matriz a 10 columnas, dando siempre $1 - \sum_n \nu_n^2 = O(10^{-3})$. Para valores de γ negativos, rápidamente el estado fundamental toma un grado de entrelazamiento considerable, y necesitaríamos tamaños de la matriz \mathbb{A} más grandes para obtener más coeficientes de Schmidt. Pero las integrales (6.10) se tornan muy difíciles de evaluar para grados altos de los polinomios de Hermite, pues habría que integrar funciones altamente oscilatorias. Por lo que deberemos buscar otra manera de hallar χ_2 . La más directa es tomar la expresión integral (5.20) y evaluarla numéricamente. Esto se hizo con 3 cifras significativas de precisión para hasta $\lambda = -100$. Los valores de χ_2 obtenidos se muestran en la fig. (6.10). Podemos ver que en el régimen atractivo el factor χ_2 comienza a mostrar un comportamiento asintótico. De haber podido obtener χ_2 para energías de interacción atractiva más fuertes, deberíamos ver que converge a 1.

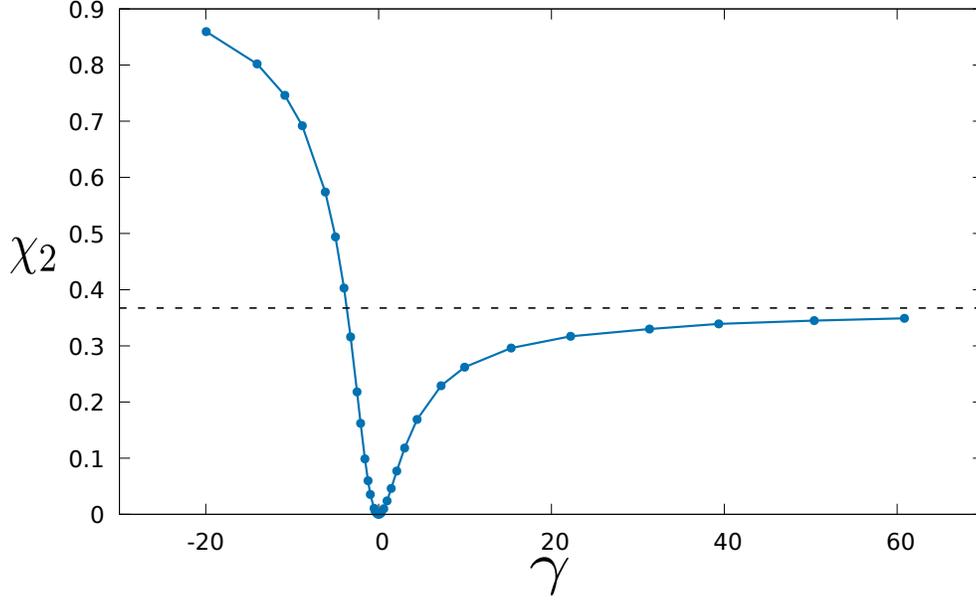


Figura 6.10: Valores de χ_2 obtenidos numéricamente en función del parámetro $\gamma = \frac{\Omega}{\hbar\omega} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$. En línea de puntos se marca el valor asintótico $\chi_2 = \frac{5}{6} + \frac{2}{\pi}(1 - \sqrt{3})$ para el límite $\gamma \rightarrow \infty$.

6.2.5. Cálculo del cociente $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ entre las constantes de normalización para la trampa en régimen atractivo

Como vimos, es muy costoso realizar la descomposición de Schmidt para estados altamente entrelazados si usamos la base de autofunciones del oscilador armónico. Así que, para obtener los coeficientes de Schmidt para valores de γ negativos, recurrimos nuevamente a las funciones base BSplines. Se usaron Splines de orden $d = 2$ y $d = 3$ con $100 + d$ puntos de control y las definimos en el intervalo $[-2, 2]$ para las coordenadas adimensionalizadas $y_1 = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x_1$ e $y_2 = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x_2$ (fuera de ese rango la función de onda ya toma valores muy chicos), teniendo siempre valores de $1 - \sum \nu_n^2$ de aproximadamente 10^{-3} . Sólo se pudo hacer la descomposición de Schmidt para 5 valores más de γ respecto de los que se hicieron usando la base de autofunciones del oscilador armónico, pues las integrales

$$[\mathbb{A}]_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} B_{i,d,knots}(y_1) \Phi_0(y_1, y_2) B_{j,d,knots}(y_2) dy_1 dy_2$$

se hacen numéricamente muy difíciles de evaluar al tener Φ_0 un comportamiento abruptamente decreciente. Para tener una idea del grado de entrelazamiento del estado más entrelazado al que se le pudo calcular la descomposición de Schmidt, en la fig. (6.11 a) se muestra la distribución de los números de ocupación λ_n de sus orbitales naturales. Podemos compararlo con la distribución de los λ_n para el estado en el límite de interacción repulsiva infinita, este es, el estado máximamente entrelazado en este régimen (ver fig. (6.11 b)).

Usando nuevamente la relación de recurrencia

$$\chi_N = \sum_{m=1}^N \frac{(-1)^{m+1} (N-1)! M(m) \chi_{N-m}}{(N-m)!},$$

con

$$M(m) = \sum_i (\lambda_i)^m,$$

se obtuvieron los cocientes $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ para N desde 1 hasta 4. En la fig. (6.12) se muestran estos valores. Para los valores que obtuvimos de estos cocientes vemos que no alcanza a observarse el comportamiento asintótico hacia 1.

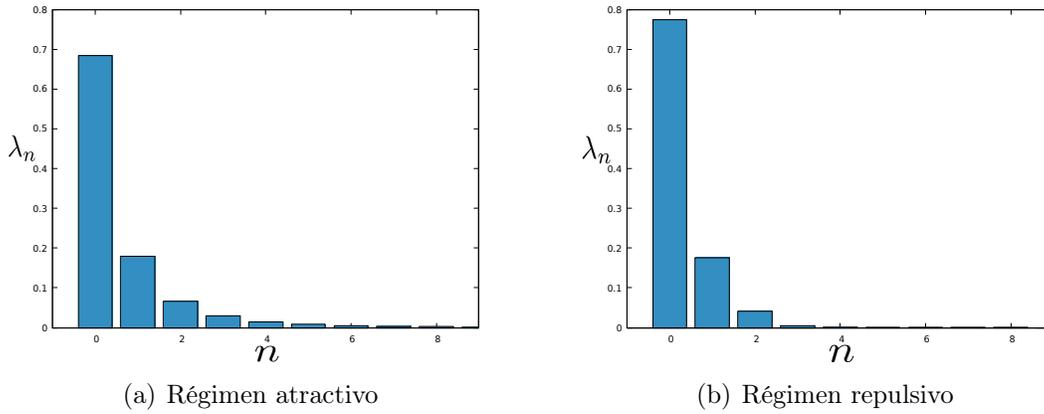


Figura 6.11: Números de ocupación λ_n de los orbitales naturales en el límite de interacción repulsiva infinita y para $\lambda = -6,75$, $\gamma \approx -5$ y $S_L \approx 0,494$.

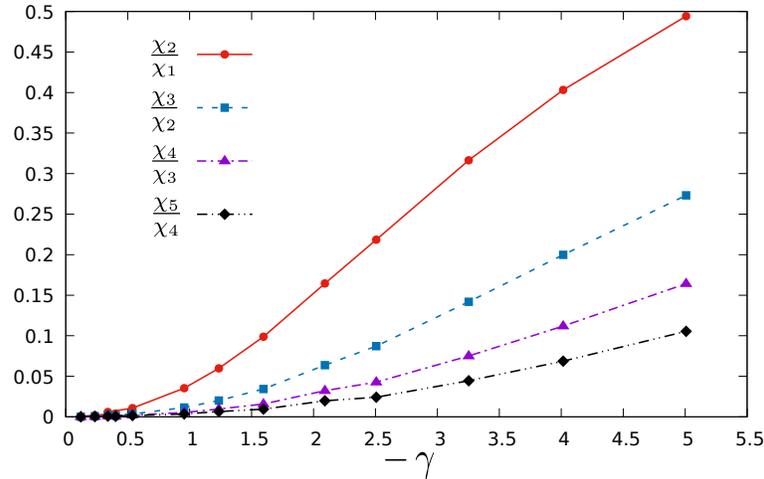


Figura 6.12: Cocientes $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ entre las constantes de normalización para el ansatz de $N+1$ cobosones y el de N pares en la trampa armónica con potencial de interacción $\Omega \delta(x_1 - x_2)$. Aquí, $\gamma = \frac{\Omega}{\hbar\omega} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$.

Capítulo 7

Conclusiones y trabajo a futuro

7.1. Conclusiones

En síntesis, analizamos el comportamiento bosónico de pares de fermiones distinguibles interactuantes en dos modelos unidimensionales continuos con interacción tipo Delta de Dirac entre los fermiones del par: partículas libres restringidas a un intervalo finito y partículas en una trampa armónica. Se supusieron a los fermiones constituyentes distinguibles y de la misma masa. Para el caso de un sólo par de fermiones en cada modelo pudo encontrarse una expresión analítica para la función de onda exacta del estado fundamental del sistema y su energía, mediante el cual construimos el operador de creación de un cobosón en el estado fundamental en términos de operadores de creación de los fermiones constituyentes en la base coordenada.

Luego, consideramos el ansatz de cobosones para el estado de N pares, $N \geq 2$, que consiste en la aplicación repetida del operador de creación de un cobosón. En primera instancia, nos interesamos en el ansatz de $N = 2$ cobosones, para el cual calculamos su factor de normalización χ_2 que, recordemos, es la entropía lineal. Para los modelos estudiados, esto se hizo en el régimen de interacción atractiva para todo el rango de valores de la energía de interacción, hallando χ_2 en función de un parámetro adimensional proporcional a la energía de interacción. Al ver la función de onda de un par en cada modelo, puede verse que cuando este parámetro negativo crece en módulo la separación entre las partículas del par es cada vez más pequeña a comparación del ancho característico del sistema. Para partículas libres restringidas a una caja, pudo hallarse una expresión analítica para χ_2 en función de dicho parámetro, mientras que para la trampa armónica sólo pudo calcularse analíticamente para el caso límite de interacción infinitamente fuerte y también para interacción nula, por lo que tuvo que calcularse numéricamente para algunos valores selectos. En ambos modelos, los resultados muestran que cuando dicho parámetro tiende a cero el par de fermiones no puede ser descripto como un bosón, lo cual tiene sentido pues el estado de un par se vuelve separable, mientras que para valores muy grandes χ_2 converge a 1. Esto nos dice que, para los modelos estudiados, cuando la interacción de contacto entre los fermiones es atractiva y muy intensa los pares interactuantes se comportan como bosones. En este caso, las partículas que componen al par se encuentran muy localizados alrededor

de su centro de masa, es decir, tienen una separación característica muy pequeña comparada con las dimensiones del sistema.

Además del factor χ_2 , se buscó calcular los primeros cocientes $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ para algunos valores de la energía de interacción, para lo cual fue necesario realizar la descomposición de Schmidt del estado de un par. Para partículas libres en una caja esto pudo hacerse para grados de entrelazamiento lo suficientemente altos como para ver el comportamiento asintótico a 1 de estos cocientes, mientras que para partículas en una trampa armónica la dificultad numérica sólo nos permitió llegar hasta valores de $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ donde aún no se nota el comportamiento asintótico. Si bien con tener que $\chi_2 \rightarrow 1$ basta para ver que estos cocientes convergen también a 1, al estudiar el comportamiento de $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}$ en función de la energía de interacción vemos cuán bosónicos son los pares para una misma energía de interacción a medida que aumentamos la cantidad de pares en el sistema. Se puede ver que si dejamos fija la magnitud de interacción entre los fermiones de distintas especies menos bosónicos resultan estos pares de fermiones. En otras palabras, para que al añadir pares de fermiones al sistema la aproximación de considerarlos como bosones compuestos siga siendo igual de buena tendríamos que tener energías de interacción atractiva más fuertes, es decir, pares más fuertemente acoplados.

También se estudió el comportamiento bosónico en el régimen repulsivo para pares de fermiones en una trampa armónica. Se pudo ver que a medida que aumenta la energía de interacción repulsiva entre los fermiones constituyentes, χ_2 crece desde cero hasta llegar a un valor límite de $\approx 0,367$ para energía de interacción infinita. Esto nos dice que al tener una repulsión más fuerte, más bosónico es el comportamiento de los pares, pues aumenta el entrelazamiento entre las partículas que constituyen el par. Pero nunca llega a haber máximo entrelazamiento (es decir, $\chi_2 = 1$), por lo que en principio podríamos pensar que en el régimen repulsivo el modelo de cobosones no es una buena descripción para el sistema.

7.2. Proyecciones a futuro

Como próximos objetivos podríamos mencionar el de mejorar la precisión numérica para hallar la descomposición de Schmidt para un par de fermiones en una trampa armónica en el régimen atractivo cuando la energía de interacción es más grande, esto nos permitiría obtener los cocientes χ_{N+1}/χ_N cuando hay mayor entrelazamiento. Por otro lado, podemos extender el trabajo a otros modelos similares a este o que utilicen un formalismo parecido. Una posibilidad sería estudiar partículas en 3 dimensiones, comenzando por el caso isotrópico por simplicidad. Para los modelos que utilizamos, sus análogos en 3 dimensiones serían partículas libres con interacción Delta de Dirac restringidas a una caja esférica, o partículas con interacción de contacto en un potencial armónico isotrópico. En esto ya estamos trabajando con resultados prometedores.

Por otro lado sería interesante considerar la situación en que los fermiones que constituyen el par sean indistinguibles. En este caso es también posible desarrollar un formalismo de cobosones en el cual el operador creación c^\dagger se escribe en términos de la

descomposición de Slater del par de fermiones [26]. Un problema que ya está resuelto es el de hallar el estado fundamental para un sistema formado por N partículas indistinguibles con interacción de pares tipo Delta en el espacio libre en una dimensión [27]. Algo que resultaría interesante es calcular el ansatz de cobosones para dos pares de fermiones interactuantes indistinguibles y compararlo con la solución exacta para 4 partículas indistinguibles mediante el cálculo de la fidelidad entre estos estados. Dados dos estados puros $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$ se define su fidelidad como $|\langle\psi|\phi\rangle|^2$ [15].

Bibliografía

- [1] C. K. Law, Phys. Rev. A **71**, 034306 (2005).
- [2] C. Chudzicki, O. Oke, and W. K. Wootters, Phys. Rev. Lett. **104**, 070402 (2010).
- [3] J. F. Annett, *Superconductivity, superfluids, and condensates* (Oxford Univ. Press, 2005).
- [4] M. Combescot, O. Betbeder-Matibet, and F. Dubin, Physics Reports **463**, 215 (2008).
- [5] M. Combescot and S.-Y. Shiau, *Excitons and Cooper pairs: two composite bosons in many-body physics* (Oxford University Press, 2015).
- [6] P. A. Bouvrie, M. C. Tichy, and I. Roditi, Phys. Rev. A **95**, 023617 (2017).
- [7] M. Combescot, S.-Y. Shiau, and Y.-C. Chang, Physical Review A **93**, 013624 (2016).
- [8] S.-Y. Shiau, M. Combescot, and Y.-C. Chang, Physical Review A **94**, 052706 (2016).
- [9] P. A. Bouvrie, E. Cuestas, I. Roditi, and A. P. Majtey, Physical Review A **99**, 063601 (2019).
- [10] P. Céspedes, E. Rufeil-Fiori, P. A. Bouvrie, A. P. Majtey, and C. Cormick, Phys. Rev. A **100**, 012309 (2019).
- [11] A. Görlitz *et al.*, Physical Review Letters **87**, 130402 (2001).
- [12] G. Zürn *et al.*, Physical review letters **108**, 075303 (2012).
- [13] S. Chen, X.-W. Guan, X. Yin, L. Guan, and M. T. Batchelor, Physical Review A **81**, 031608 (2010).
- [14] M. Fedorov and N. Miklin, Contemporary Physics **55**, 94 (2014).
- [15] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, Cambridge: Cambridge University Press **2**, 23 (2000).
- [16] E. Cuestas, (2017).

- [17] N. Helbig, I. V. Tokatly, and A. Rubio, *Physical Review A* **81**, 022504 (2010).
- [18] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral, *Reviews of modern physics* **80**, 517 (2008).
- [19] G. Vidal, *J. Mod. Opt.* **47**, 355 (2000).
- [20] F. Buscemi, P. Bordone, and A. Bertoni, *Physical Review A* **75**, 032301 (2007).
- [21] M. C. Tichy, P. A. Bouvrie, and K. Mølmer, *Applied Physics B* **117**, 785 (2014).
- [22] K. Życzkowski, P. Horodecki, A. Sanpera, and M. Lewenstein, *Physical Review A* **58**, 883 (1998).
- [23] R. Shankar, *Principles of quantum mechanics* (Springer Science & Business Media, 2012).
- [24] M. Avakian, G. Pogosyan, A. Sissakian, and V. Ter-Antonyan, *Physics Letters A* **124**, 233 (1987).
- [25] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products* (Academic press, 2014).
- [26] M. C. Tichy, P. A. Bouvrie, and K. Mølmer, *Physical Review A* **86**, 042317 (2012).
- [27] M. Flicker and E. H. Lieb, *Physical Review* **161**, 179 (1967).
- [28] C. De Boor, C. De Boor, E.-U. Mathématicien, C. De Boor, and C. De Boor *A practical guide to splines* Vol. 27 (springer-verlag New York, 1978).

Apéndice A

Funciones base BSplines

Supongamos que poseemos un conjunto de puntos por donde sabemos que pasa una función. Existen varias formas de aproximar dicha función a partir de estos puntos. Una de ellas es aproximarla por polinomios a trozos que pasan por estos puntos. A estas curvas formadas por polinomios a trozos se las llama Splines.

A.1. Splines lineales

La aproximación más simple de una función por una función continua a partir de un conjunto de puntos por donde pasa es unir estos puntos por líneas rectas, y esa curva formada por rectas a trozos sería el Spline lineal. Si tenemos n reales $(t_i)_{i=2}^{n+1}$, con $t_i < t_{i+1}$, y los valores $(c_i)_{i=1}^n$ que toma mi función en esos puntos, la recta que une 2 puntos consecutivos (t_i, c_{i-1}) y (t_{i+1}, c_i) sería

$$p(t|c_{i-1}, c_i; t_i, t_{i+1}) = \frac{t_{i+1} - t}{t_{i+1} - t_i} c_{i-1} + \frac{t - t_i}{t_{i+1} - t_i} c_i.$$

Definamos ahora la función escalón

$$B_{i,0}(t) = \begin{cases} 1, & t \in [t_i, t_{i+1}) \\ 0, & \text{caso contrario.} \end{cases}$$

Tomando $p_{i,1}(t) = p(t|c_{i-1}, c_i; t_i, t_{i+1})$, podemos escribir la función Spline lineal como

$$f(t) = \sum_{i=2}^n p_{i,1}(t) B_{i,0}(t). \quad (\text{A.1})$$

A los valores $(t_i)_{i=2}^{n+1}$ se les llama *knots* y a $(c_i)_{i=1}^n$ se los conoce como puntos de control.

A.2. Splines de grados más altos

Supongamos que ahora queremos construir una curva formada por polinomios a trozos de grado d . Estas curvas se construyen a partir de combinaciones convexas de

los polinomios a trozos de grados más bajos mediante el siguiente algoritmo: dados $d + 1$ puntos de control $(c_j)_{j=i-d}^d$ y $2d$ knots $(t_j)_{j=i-d+1}^{i+d}$, la curva Spline de grado d se define recursivamente como

$$p_{j,r}(t) = \frac{t_{j+d-r+1} - t}{t_{j+d-r+1} - t_j} p_{j-1,r-1}(t) + \frac{t - t_j}{t_{j+d-r+1} - t_j} p_{j,r-1}(t), \quad (\text{A.2})$$

para $i - d + r \leq j \leq i$ y $1 \leq r \leq d$, y definiendo $p_{j,0} = c_j$ [28]. Una curva Spline de grado d con n puntos de control $(c_i)_{i=1}^{n+d}$ y $n + d - 1$ knots $(t_i)_{i=2}^{n+d}$, con $t_i < t_{i+1}$ para $d + 1 \leq i \leq n$ y $t_i \leq t_{i+1}$ para $i \leq d$ e $i \geq n + 1$, está dada por

$$f(t) = \sum_{i=d+1}^n p_{i,d}(t) B_{i,0}(t). \quad (\text{A.3})$$

A.3. Representación de Splines en términos de las funciones base BSplines

Existe una manera de reescribir la ec. (A.3) para que la función Spline quede expresada en términos de los puntos de control c_i y de funciones que se construyen a partir de los knots t_i , del grado d de los polinomios y del número n de puntos de control. Veamos cómo construir dichas funciones. A partir de la relación de recurrencia (A.2), podemos escribir la curva Spline (A.3) como

$$\begin{aligned} f(t) &= \sum_{i=d+1}^n \left[\frac{t_{i+1} - t}{t_{i+1} - t_i} p_{i-1,d-1}(t) + \frac{t - t_i}{t_{i+1} - t_i} p_{i,d-1}(t) \right] B_{i,0}(t) \\ &= \sum_{i=d+1}^{n-1} \left[\left(\frac{t - t_i}{t_{i+1} - t_i} B_{i,0}(t) + \frac{t_{i+2} - t}{t_{i+2} - t_{i+1}} B_{i+1,0}(t) \right) p_{i,d-1}(t) \right] \\ &\quad + \frac{t - t_n}{t_{n+1} - t_n} B_{n,0}(t) p_{n,d-1}(t) + \frac{t_{d+2} - t}{t_{d+2} - t_{d+1}} B_{d+1,0}(t) p_{d,d-1}(t). \end{aligned}$$

Como estamos considerando a la función Spline definida en el intervalo $[t_{d+1}, t_{n+1}]$, podemos considerar nula a la expresión

$$\frac{t - t_n}{t_{n+1} - t_n} B_{n,0}(t) p_{n,d-1}(t) + \frac{t_{d+2} - t}{t_{d+2} - t_{d+1}} B_{d+1,0}(t) p_{d,d-1}(t)$$

dentro de dicho intervalo. Repitiendo esto y definiendo recursivamente las funciones

$$B_{i,r}(t) = \frac{t - t_i}{t_{i+r} - t_i} B_{i,r-1}(t) + \frac{t_{i+r+1} - t}{t_{i+r+1} - t_i} B_{i+1,r-1}(t), \quad (\text{A.4})$$

para $1 \leq r \leq d$, la curva Spline de grado d puede escribirse como

$$f(t) = \sum_{i=1}^n c_i B_{i,d}(t). \quad (\text{A.5})$$

Es importante notar que para poder definir bien $B_{n,d}$ y $B_{1,d}$ es necesario añadir 2 *knots* extra, que llamaremos t_1 y t_{n+d+1} . A estas funciones $B_{i,d}$ se las conoce como funciones base BSplines. Hay que tener presente que están definidas en función de los *knots*, por lo que en principio deberíamos denotarlas $B_{i,d,knots}$, donde *knots* denota un vector formado por las $n + d + 1$ componentes $(t_i)_{i=1}^{n+d+1}$. Siempre que omitamos *knots* en la expresión de las funciones base será porque ya tenemos en claro el conjunto de *knots* que estemos manejando. Se puede demostrar que, dados $n + d + 1$ *knots*, las funciones base $\{B_{i,d}\}_{i=1}^n$ forman un conjunto de n funciones linealmente independientes [28]. Es decir, tenemos una base para expandir cualquier función definida en un cierto intervalo $[t_{d+1}, t_{n+1}]$ con una precisión que mejora cuanto mayor sea el número de puntos de control y el grado de los polinomios aproximantes que elijamos. Tomar más grande el grado de estos polinomios garantiza que la curva Spline tenga mayor cantidad de derivadas continuas en el intervalo $[t_{d+1}, t_{n+1}]$ [28].

Nos será de particular interés el caso donde tomemos los $n + d + 1$ *knots* en el intervalo $[a, b]$ como

$$t_i = \begin{cases} a, & 1 \leq i \leq d \\ a + \frac{i-d-1}{n-d} (b-a), & d+1 \leq i \leq n+1 \\ b, & n+2 \leq i \leq n+d+1. \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

En la fig. (A.1) se muestran las funciones base BSplines de grado 0, 1, 2 y 3 en el intervalo $[0, 1]$ para $n = 10 + d$ puntos de control con *knots* de la forma (A.6).

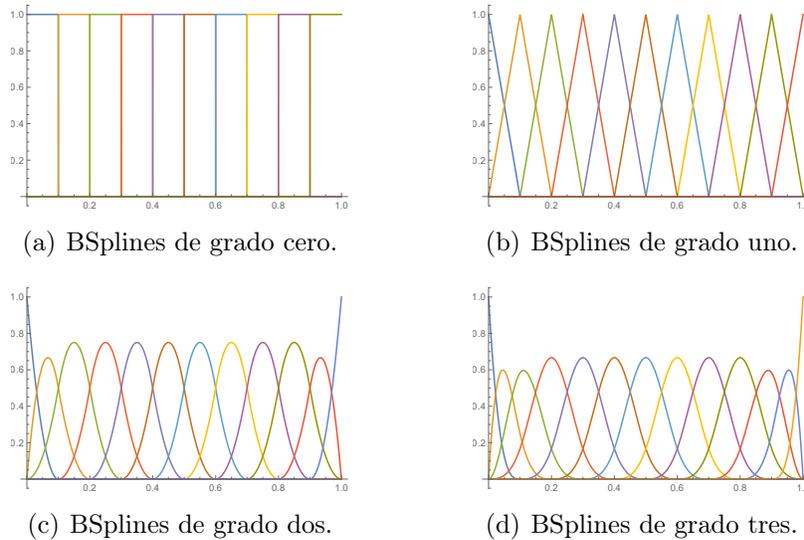


Figura A.1: Funciones base BSplines de hasta grado 3 definidas en $[0, 1]$ con $10 + d$ puntos de control, d el grado del Spline.