

El eco de Loschmidt en sistemas de espines: decoherencia, equilibración, localización y mecanismos emergentes de irreversibilidad

por

Pablo René Zangara

Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía y Física
como parte de los requerimientos para la obtención del grado de

Doctor en Física
de la
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

Diciembre de 2015

FaMAF – UNC

Director: Dr. Horacio M. Pastawski



El eco de Loschmidt en sistemas de espines: decoherencia, equilibración, localización y mecanismos emergentes de irreversibilidad.

Por Pablo René Zangara. Se distribuye bajo [Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 2.5 Argentina](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/2.5/arg/).

Resumen

Si una gota de tinta cae en un estanque, la mancha se difunde hasta que su rastro se desvanece completamente. Podría decirse que tal proceso es, naturalmente, irreversible. En el mundo microscópico, fenómenos similares también son omnipresentes. Por ejemplo, si un exceso de polarización magnética se inyecta en un sistema de espines que está inicialmente en equilibrio térmico, esa “excitación” difundirá como consecuencia de las interacciones espín-espín. Tal proceso, aparentemente irreversible, se conoce como difusión de espín y puede llevar al sistema al “equilibrio”. Esta idea puede generalizarse para un sistema cuántico cerrado de muchos cuerpos interactuantes, que es apartado del equilibrio y que, aun cuando su evolución posterior es unitaria, muchos observables locales tienen algún comportamiento transitorio y luego permanecen cerca de un valor estático durante la mayor parte del tiempo. Tal proceso se conoce como equilibración, y es uno de los temas centrales que se abordarán en esta Tesis.

La idea de equilibración en sistemas cuánticos cerrados rápidamente se encuentra con limitaciones. Por un lado, el equilibración de la polarización puede fallar sistemáticamente, ya que hay casos en los que la excitación inicial no puede propagarse en absoluto. Tal situación se produce cuando el sistema es suficientemente desordenado o cuando las interacciones internas son demasiado fuertes. De hecho, estos regímenes extremos dan lugar a la conocida localización Anderson y la fase aislante de Mott, respectivamente. Para valores arbitrarios de desorden e interacciones, la competencia entre ambos procesos es no trivial. Presentaremos y discutiremos un diagrama dinámico de fases que muestra las regiones paramétricas donde un sistema cuántico de muchos cuerpos puede equilibrar.

Por otro lado, incluso en los casos en que el sistema parece haber equilibrado, la unitariedad de la dinámica cuántica asegura una memoria precisa de la condición inicial de no-equilibrio. Luego, si algún protocolo experimental pudiera revertir la dinámica, conduciría al sistema de regreso al estado de no-equilibrio inicial. Esta idea define al eco de Loschmidt (LE), que engloba los diversos procedimientos de reversión temporal implementados en resonancia magnética nuclear. En la práctica, la reversión siempre es perturbada por grados de libertad no controlados, ya sea internos o del ambiente externo, así como también por imperfecciones en los procedimientos experimentales. Estas perturbaciones constituyen las fuentes de decoherencia, un fenómeno estrechamente ligado a la degradación del LE. De hecho, a lo largo de esta Tesis abordamos sistemáticamente cómo calcular, tanto analítica como numéricamente, el tiempo de decoherencia dependiente de perturbación, τ_Σ . En todos los casos considerados, este tiempo se calcula precisamente sobre la base de la regla de oro de Fermi (FGR).

Por último, pero no menos importante, discutiremos un panorama general acerca del decaimiento del LE como consecuencia del juego relativo entre las interacciones reversibles (caracterizadas por una escala de tiempo T_2) y la perturbación (τ_Σ). Esa interrelación origina en última instancia una nueva escala T_3 , observada experimentalmente y que resulta ser aproximadamente independiente de τ_Σ pero estrechamente cercana a T_2 . Aquí, evaluaremos el LE en una serie de sistemas cerrados de tamaño creciente y realizaremos un análisis tipo escaleo de tamaño finito para los tiempos característicos de decaimiento del LE. Este enfoque proporciona evidencia numérica que indica un mecanismo emergente basado en la proliferación de interacciones efectivas mediadas por estados excitados. A su vez, tal mecanismo conlleva una descripción FGR efectiva de la dinámica LE. Finalmente, en el límite termodinámico, cualquier perturbación (arbitrariamente pequeña) tiene asociada un tiempo FGR característico, y por lo tanto si el sistema permanece equilibrado durante un tiempo más largo, entonces la equilibración se convertirá, para todo fin práctico, en irreversible.

Palabras clave: eco de Loschmidt, equilibración, termalización, localización de muchos cuerpos, decoherencia, irreversibilidad, fenómenos emergentes, resonancia magnética nuclear, regla de oro de Fermi.

Clasificación (Pacs): 03.65.Yz, 05.30.-d, 05.70.Ln, 71.30.+h, 75.10.Pq

Abstract

If an ink drop falls into a pond, the stain diffuses away until no trace of it remains whatsoever. One may naturally say that such a process is in fact irreversible. In the microscopic world, similar phenomena are also ubiquitous. For instance, if a magnetic polarization excess is injected in many-spin system which is initially in thermal equilibrium, then this “excitation” would spread all over as consequence of spin-spin interactions. Such an apparently irreversible process is known as spin diffusion and it can lead the system back to “equilibrium”. One can generalize this idea by considering a closed many-body quantum system which is departed from equilibrium and, even when it evolves unitarily, many local observables have some transient behavior and then remain close to a static value for *most* of the time. This process is known as equilibration, which is one of the central issues to be addressed in this Thesis.

The idea of equilibration in closed quantum systems soon faces limitations. On the one hand, the equilibration of the polarization is not always the rule as there are physical situations where the initial excitation cannot spread at all. Such a situation occurs when the system is sufficiently disordered or when the internal interactions are too strong. In fact, these extreme regimes give rise to the well known Anderson localization and Mott insulating phases respectively. For arbitrary strengths of disorder and interactions, the interplay between both processes is highly non-trivial. We obtain and discuss a dynamical phase diagram which shows the parametric regions where a many-body system equilibrates.

On the other hand, even in the cases where the system seems to have equilibrated, the unitarity of quantum dynamics ensures a precise memory of the non-equilibrium initial condition. Then, if some experimental protocol

could reverse the many-body dynamics, it would drive the system back to the initial non-equilibrium state. Such a general idea defines the Loschmidt echo (LE), which embodies the various time-reversal procedures implemented in nuclear magnetic resonance. As a matter of fact, the reversal is always perturbed by uncontrolled internal or environmental degrees of freedom as well as by imperfections in the pulse sequences. These perturbations constitute the sources of decoherence, a phenomenon closely tied to the LE degradation. Indeed, throughout this Thesis we address systematically how to calculate, both analytically and numerically, the perturbation-dependent decoherence time τ_Σ . In most of the cases considered, this is precisely understood in terms of the the Fermi golden rule (FGR).

Last, but definitely not least, we address a general picture of the LE decay as a consequence of the interplay between the reversible interactions (characterized by a time scale T_2) and the perturbation (τ_Σ). This would ultimately lead to the experimentally observed T_3 , which was found to be roughly independent of τ_Σ but closely tied to T_2 . Here, we evaluate the LE in a sequence of closed systems of increasing size and perform a finite size scaling on the time scales of the LE decay. Such an approach provides numerical evidence supporting an emergent mechanism based on the proliferation of effective interactions mediated by highly excited states. In turn, this justifies an effective FGR description of the LE dynamics. Thus, in the thermodynamic limit, any arbitrarily small perturbation yields a characteristic FGR time, and if the system stays equilibrated during a longer time, then the equilibration will become irreversible for any practical purpose.

Keywords: Loschmidt echo, equilibration, thermalization, many-body localization, decoherence, irreversibility, emergent phenomena, nuclear magnetic resonance, Fermi golden rule.



A mis padres, Norma Teresita Sedeño y Roque Luis Zangara.
A la memoria de Patricia Rebeca Levstein.

Agradecimientos

“SI HE VISTO MÁS LEJOS ES PORQUE ESTOY
SENTADO SOBRE LOS HOMBROS DE GIGANTES.”

ISAAC NEWTON

Deseo expresar mi más sincero agradecimiento a quienes me ayudaron y acompañaron a lo largo de este camino.

En primer lugar a mi director, Horacio M. Pastawski, quien supo transmitirme no sólo conocimientos sino también una verdadera pasión por la Física. Agradezco especialmente la paciencia, la confianza depositada y, al mismo tiempo, la exigencia.

A la Universidad Pública.

A las instituciones que apoyaron y financiaron mi doctorado: el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, la Secretaría de Ciencia y Técnica de la Universidad Nacional de Córdoba (SeCyT-UNC), y el Centro de Computación de Alto Desempeño de la Universidad Nacional de Córdoba (CCAD-UNC).

A Patricia R. Levstein, por ayudarme a dar los primeros pasos de mi doctorado.

A mis entrañables compañeros de trabajo, Axel D. Dente y Denise Bendersky.

A todos aquellos de quienes aprendí y discutí Física en estos años. Especialmente a Lisandro Buljubasich, Luis E. F. Foa Torres, Aníbal Iucci, y Lea F. Santos.

A Carlos Bederián, por su invaluable ayuda.

A los miembros de mi Comisión Asesora, Omar Osenda y Pablo Serra, y los miembros del Tribunal Evaluador de Tesis, Guido Raggio, Sergio Cannas y Diego Wisniacki.

A quienes, a través de su amistad, pusieron una sonrisa en mis días de trabajo. Especialmente a quienes compartieron conmigo la oficina 324.

A mi familia, especialmente a mis padres, Norma y Roque.

A Emilia, por haber compartido conmigo estos maravillosos años.



Índice general

Índice de figuras	IX
Glosario	XIII
1. Introducción	1
1.1. Irreversibilidad y la estructura jerárquica de la Naturaleza	1
1.2. La <i>paradoja</i> de la irreversibilidad en el mundo clásico	3
1.2.1. Tras los ingredientes cruciales: el experimento numérico de Fermi-Pasta-Ulam	4
1.3. El mundo cuántico	6
1.3.1. Un atajo operacional: decoherencia y la teoría de sistemas cuánticos abiertos	6
1.3.2. Equilibración en sistemas cuánticos cerrados.	8
1.3.3. Localización. “ <i>all the running you can do, to keep in the same place</i> ”	10
1.4. Ecos del futuro: la NMR entra en escena	12
1.5. El eco de Loschmidt: irreversibilidad como fenómeno emergente	13
1.6. Organización de la Tesis	16
2. La Regla de Oro de Fermi	19
2.1. Escalas de tiempo en la dinámica de la decoherencia	19
2.2. La transformación de Wigner-Jordan y el formalismo de Keldysh	22
2.3. El arreglo de espines unidimensional	23
2.3.1. La noción de integrabilidad	24
2.4. El caso no-interactuante	25

ÍNDICE GENERAL

2.4.1. Modelos <i>tight binding</i> para la dinámica de excitaciones	25
2.4.2. Dinámica de decaimiento I. La FGR estándar	27
2.4.3. Dinámica de decaimiento II. La FGR autoconsistente.	28
2.5. Caso interactuante	34
2.5.1. Keldysh y la WBA	34
2.5.2. Una <i>self-energy</i> autoconsistente	38
2.5.3. Aspectos relevantes de la FGR y la autoconsistencia	40
2.6. Conclusiones	42
3. El eco de Loschmidt en sistemas de muchos cuerpos	45
3.1. Cuantificando decoherencia	45
3.2. La formulación LE	47
3.3. La escalera de espín	50
3.4. Observaciones en relación al Capítulo 2.	53
3.4.1. De la física de muchos cuerpos a la de un cuerpo, ida y vuelta	53
3.4.2. La descripción FGR	55
3.5. La evaluación numérica del LE	56
3.6. Análisis del decaimiento del LE	62
3.7. Conclusiones	64
4. Fluctuaciones temporales luego de la equilibración	67
4.1. Equilibración en observables de pocos cuerpos	67
4.2. Los sistemas y las magnitudes estudiadas	70
4.2.1. Estados iniciales	72
4.2.2. Observables de pocos cuerpos	73
4.2.3. Método numérico	74
4.3. Espectro y <i>Energy Shell</i>	75
4.3.1. Espectro	76
4.3.2. <i>Energy shell</i>	79
4.4. Resultados numéricos para las fluctuaciones temporales	83
4.4.1. Ley exponencial vs. ley de potencias	87
4.4.2. El Hamiltoniano XY	89
4.5. Relajación	90
4.6. Conclusiones	93

5. Competencia entre interacciones y desorden en un sistema de muchos cuerpos	95
5.1. Tras los pasos de Fermi, Pasta & Ulam	96
5.2. La transición MBL	97
5.3. La formulación LE	99
5.4. La dinámica LE	100
5.5. Ruptura de ergodicidad inducida por competencia de interacciones y desorden	102
5.5.1. Un diagrama de fases dinámico	102
5.5.2. El análisis del diagrama de fases y el rol de las incertezas de energía	104
5.6. Conclusiones	109
6. Del LE local al LE global	113
6.1. Atando cabos sueltos	113
6.2. Las contribuciones no-locales al LE local	115
6.3. Una descripción general del decaimiento del LE	116
6.3.1. Expansiones a tiempos cortos	116
6.3.2. La hipótesis de extensividad en el decaimiento	120
6.4. Un modelo 1D	122
6.5. Estados preparados dinámicamente	125
6.5.1. Ideas operacionales	125
6.5.2. Resultados numéricos para el modelo 1D	129
6.6. Conclusiones	133
7. Proliferación de interacciones efectivas: equilibración inducida por de-coherencia en un sistema cuántico cerrado	137
7.1. Introducción	137
7.2. Hacia la simulación numérica de un experimento LE real	138
7.3. Ideas físicas subyacentes respecto a la dinámica del sistema	141
7.3.1. La estructura espectral	141
7.3.2. La probabilidad de supervivencia y equilibración	142
7.3.3. De las interacciones virtuales a una FGR efectiva	144
7.4. La dinámica LE	146
7.5. La red 2D	150

ÍNDICE GENERAL

7.6. Conclusiones	151
8. Conclusiones finales	153
8.1. De cara al futuro: algunas ideas <i>emergentes</i>	158
A. El algoritmo de Trotter-Suzuki	159
A.1. Resolviendo la ecuación de Schrödinger eficientemente	159
A.2. Dinámica de espines 1/2: la descomposición XYZ	160
B. El sistema de tres niveles	165
B.1. Teoría de perturbaciones a orden infinito	166
B.2. Teoría de Hamiltonianos promedio (AHT)	168
Bibliografía	173

Índice de figuras

1.1. El régimen PID observado experimentalmente.	14
2.1. Modelos <i>tight binding</i> para sistemas abiertos. Casos no-interactuantes .	26
2.2. La descripción FGR estándar.	29
2.3. Evaluación numérica de la probabilidad de supervivencia. Caso no-interactuante.	29
2.4. Representación diagramática de la ecuación de Dyson y <i>self-energy</i> . Caso no-interactuante.	30
2.5. LDoS de superficie y de <i>bulk</i>	33
2.6. Modelos <i>tight binding</i> para sistemas cuánticos abiertos. Casos interac- tuantes.	34
2.7. Representación diagramática de la <i>self-energy</i> . Caso interactuante. . . .	37
2.8. Existencia de soluciones autoconsistentes.	40
2.9. Representación en el espacio de Fock de un par partícula-hueco en una red 2D.	43
3.1. El eco de Loschmidt local.	48
3.2. La configuración tipo escalera: cadenas lateralmente acopladas.	51
3.3. La dependencia temporal del eco de Loschmidt.	57
3.4. El eco de Loschmidt a tiempos cortos.	58
3.5. La transición cuadrática-exponencial.	59
3.6. Tasas características de decaimiento del LE.	61
3.7. Argumento tipo desorden binario para las fluctuaciones de fase.	65
4.1. DoS en sistemas de espines 1D.	72
4.2. Distribución de espaciados de niveles.	77
4.3. Distribución de pesos (LDoS) para el estado de Néel.	80

ÍNDICE DE FIGURAS

4.4. Distribución de pesos (LDoS) para diferentes estados iniciales.	81
4.5. Fluctuaciones temporales para diferentes observables versus N . Estado inicial fijo.	85
4.6. Fluctuaciones temporales para diferentes observables versus N . Hamiltoniano fijo.	87
4.7. Comparación cuantitativa entre la ley de escala exponencial y ley de potencias.	88
4.8. Dependencia temporal de la energía cinética para el estado inicial pared de dominio.	91
4.9. Dependencia temporal de los factores de estructura.	92
5.1. La dependencia temporal del LE en presencia de desorden e interacciones.	101
5.2. Las tasas de decaimiento del LE para sistemas desordenados en función de la magnitud de la interacción.	103
5.3. Diagrama de fases dinámico I.	105
5.4. Diagrama de fases dinámico II.	110
6.1. Un esquema del decaimiento del LE.	120
6.2. Contribuciones no locales al LE local.	123
6.3. La hipótesis de extensividad en el decaimiento.	124
6.4. El LE preparado dinámicamente (DPLE).	125
6.5. Función de autocorrelación <i>hacia delante</i> para la preparación dinámica.	130
6.6. El DPLE como función del tiempo.	130
6.7. El LE global o de muchos cuerpos.	131
6.8. La contribución de correlación “cruzada” en el LE local.	132
6.9. DPLE vs. LE global	133
7.1. Representación pictórica de la LDoS en el sistema no perturbado.	141
7.2. Funciones de autocorrelación “hacia delante” (SP).	143
7.3. Las asíntotas de las funciones de autocorrelación “hacia delante” (SP).	143
7.4. La dinámica LE para diferentes magnitudes de perturbación.	147
7.5. Las asíntotas del LE para diferentes valores de perturbación.	148
7.6. Las tasas de decaimiento del LE, $N = 12, 14, 16$	149
7.7. La red 2D.	150

ÍNDICE DE FIGURAS

7.8. Las tasas de decaimiento del LE para las redes 2D.	151
B.1. Comparación entre el Hamiltoniano efectivo (GF) y la AHT. (I)	171
B.2. Comparación entre el Hamiltoniano efectivo (GF) y la AHT. (II)	172

GLOSARIO

Glosario

AHT	Teoría de Hamiltonianos promedio	KAM	Kolmogorov-Arnold-Moser
AL	Localización de Anderson	KE	Energía cinética
CM	Mecánica Clásica	LDoS	Densidad local de estados
DDCS	Densidad de estados directamente conectados	LE	Eco de Loschmidt
dip	Dipolar	MB	Muchos cuerpos
DoS	Densidad de (auto)estados	MBL	Localización de muchos cuerpos
DPLE	Eco de Loschmidt preparado dinámicamente	ME	Eco Mesoscópico
DQ	Double Quantum	NMR	Resonancia Magnética Nuclear
DW	Pared de dominio	nn	Primeros vecinos
FGR	Regla de oro de Fermi	nnn	Segundos vecinos
FPU	Fermi-Pasta-Ulam	NS	Estado de Néel
GF	Función de Green	PID	Decoherencia independiente de perturbación
GLBE	Ecuación generalizada de Landauer-Büttiker	PP	Pares de espines paralelos
GPU	Unidad de procesamiento gráfico	QDPT	<i>Quantum dynamical phase transition</i>
IE	Energía de interacción	QET	Teorema Ergódico Cuántico
ini	Inicial	QM	Mecánica Cuántica
IPR	Razón de participación inversa	QME	Ecuación Maestra Cuántica
JWT	Transformación de Jordan-Wigner	rf	Radiofrecuencia
		SC-FGR	Regla de oro de Fermi autoconsistente
		SM	Mecánica Estadística
		SP	Probabilidad de supervivencia
		TL	Límite Termodinámico
		TS	Trotter-Suzuki
		WBA	Aproximación de banda ancha
		WD	Wigner-Dyson

“LLAMO A ESTE EXPERIMENTO ‘VOLVER A TOCAR LA CINTA DE LA VIDA.’ USTED APRIETA EL BOTÓN DE REBOBINAR, Y ASEGURÁNDOSE QUE BORRA POR COMPLETO TODO LO QUE REALMENTE SUCEDIÓ, RETROCEDE HASTA CUALQUIER TIEMPO Y ÉPOCA EN EL PASADO (POR EJEMPLO, LOS MARES DE BURGESS SHALE). DESPUÉS DEJA QUE LA CINTA AVANCE DE NUEVO Y OBSERVA SI LA REPETICIÓN SE PARECE EN ALGO AL ORIGINAL. SI CADA NUEVA IMAGEN O SONIDO SE PARECE MUCHO A LA SENDA REAL DE LA VIDA, ENTONCES HEMOS DE LLEGAR A LA CONCLUSIÓN DE QUE LO QUE OCURRIÓ ES EXACTAMENTE LO QUE TENÍA QUE OCURRIR. PERO SUPONGA QUE LAS VERSIONES EXPERIMENTALES DAN TODOS RESULTADOS SENSIBLES ASOMBROSAMENTE DISTINTOS A LA HISTORIA DE LA VIDA TAL COMO LA CONOCEMOS. ¿QUÉ PODRÍAMOS ENTONCES DECIR ACERCA DE LA PREDICTIBILIDAD DE LA INTELIGENCIA AUTOCONSCIENTE? ¿O DE LOS MAMÍFEROS? ¿O DE LOS VERTEBRADOS? ¿O DE LA VIDA EN LA TIERRA? ¿O, SIMPLEMENTE, DE LA PERSISTENCIA DE LOS SERES PLURICELULARES A LO LARGO DE 600 MILLONES DE DIFÍCILES AÑOS?

/.../

REBOBÍNESE LA CINTA DE LA VIDA Y DÉJESE TOCAR DE NUEVO. ¿ OFRECERÁ ESTA NUEVA INTERPRETACIÓN ALGO PARECIDO A LA HISTORIA QUE CONOCEMOS?”

STEPHEN JAY GOULD [Gou90]

Capítulo 1

Introducción

1.1. Irreversibilidad y la estructura jerárquica de la Naturaleza

Nuestro conocimiento acerca del Universo que nos rodea está lejos de ser un cuerpo armoniosamente unificado. En cambio, disponemos un gran catálogo de disciplinas casi independientes que constituye, con diferente grado de éxito, nuestra comprensión acerca de cómo funciona la Naturaleza. Física, Química, Biología, y sus sub-disciplinas, pertenecen a tal catálogo de descripciones parciales o *niveles* de realidad [CRV14]. Cada uno de estos niveles involucra escalas específicas de energía, tiempo, y dimensiones. La relación entre estas descripciones (que generalmente recibe el nombre de *reducción*) es intrínsecamente compleja pues el salto de un nivel a otro puede involucrar “transiciones de fase” [And72, Ber94] cuya descripción matemática responde a expansiones asintóticas singulares [Pri98].

Para comenzar, consideraremos un ejemplo de libro de texto: la derivación de la Termodinámica de equilibrio partiendo desde la Mecánica Estadística (SM) clásica. La primera de estas disciplinas se ha constituido en la rama de la Física más exitosa durante los últimos 200 años, ya que su impacto tecnológico cambió radicalmente la manera en que la Humanidad vive. Específicamente, la Termodinámica describe las propiedades de la materia en términos de presión, volumen, temperatura, entre otras variables macroscópicas. La segunda, SM, considera cada uno de los N constituyentes microscópicos de la materia y su propósito último radica en proveer una descripción probabilística basada en las leyes que rigen sus interacciones. Argumentos estándar [Pat96], que se basan

1. INTRODUCCIÓN

esencialmente en el límite $N \rightarrow \infty$, permiten derivar relaciones macroscópicas simples (ecuaciones termodinámicas de estado) partiendo de ciertos observables microscópicos de la SM. Este esquema de *reducción* funciona en teoría y en gran parte en la práctica, pero falla dramáticamente en situaciones físicas específicas: los puntos críticos. En efecto, un punto crítico indica la existencia de una transición de fase, donde las variables termodinámicas divergen o se vuelven no-analíticas. En tal caso, el paradigma de reducción debe reemplazarse por la *emergencia* de fenómenos cualitativamente nuevos. En palabras de Sir Michael Berry [Ber94],

“La Termodinámica es una teoría del continuo, por lo que la reducción tiene que mostrar que la fluctuación de densidad originada en las fuerzas interatómicas tienen un rango finito (y microscópico). Esto es válido excepto en un punto crítico, donde hay fluctuaciones que alcanzan escalas incluso del tamaño de la muestra. Entonces, en la región crítica el límite continuo no existe, indicando un nuevo estado de la materia. En términos de nuestra descripción general, el estado crítico es una singularidad de la Termodinámica, en la cual su reducción a la Mecánica Estadística se rompe; sin embargo, fuera del punto crítico, emerge una amplia clase de nuevos ‘fenómenos críticos’, que pueden entenderse mediante un minucioso estudio del límite de N grande.”

Nuestra experiencia cotidiana corresponde a un dominio clásico macroscópico, donde el cristal que se cae termina por hacerse añicos, nuestra taza de café se enfría, y un cubo de hielo se derrite fuera de la heladera. Todos estos fenómenos *irreversibles* son manifestaciones de la bien conocida Segunda Ley de la Termodinámica, es decir, los procesos ocurren hacia un inevitable incremento de entropía. De hecho, la descripción física de tal dominio macroscópico involucra ecuaciones de movimiento temporalmente asimétricas, como por ejemplo ecuaciones hidrodinámicas y difusivas. Los constituyentes elementales o microscópicos de cada entidad macroscópica pertenecen a un nivel “más fundamental”, cuya descripción física implica ecuaciones de movimiento temporalmente simétricas, tales como la dinámica Newtoniana o la ecuación de Schrödinger. En pocas palabras, mientras que el mundo microscópico es reversible, el macroscópico no lo es. Este contraste paradójico ha alimentado una controversia recurrente desde finales del siglo XIX hasta nuestros días. Esta Tesis contribuye a dicha discusión presentando argumentos analíticos y numéricos que justifican la idea de irreversibilidad *emergiendo* en el límite termodinámico (TL) desde una dinámica cuántica (microscópica) reversible.

1.2. La *paradoja* de la irreversibilidad en el mundo clásico

A finales del siglo XIX, Ludwig Boltzmann intentó conciliar el carácter irreversible de la Segunda Ley con la reversibilidad propia de las Leyes de Newton del movimiento [Kuh87]. Él consideró la evolución de un gas compuesto por partículas que colisionan entre sí, y cuyo estado inicial está muy lejos del equilibrio. Boltzmann describe entonces este complejo sistema de acuerdo con una ecuación cinética que irreversiblemente lo lleva al equilibrio. Consistentemente, se elimina la simetría de reversión temporal a través de la hipótesis de “caos molecular” o *stosszahlansatz*. La misma, implica que después de cada colisión de partículas (proceso caracterizado por un tiempo característico) no queda memoria remanente del estado anterior. El enfoque cinético de Boltzmann constituye la prueba de su célebre Teorema *H*, que a su vez es la primera justificación formal de la Segunda Ley. En ese momento, Joseph Loschmidt planteó la objeción contra tal demostración argumentando que para cada posible trayectoria que conduce al equilibrio, existirá otra trayectoria, igualmente posible, que llevaría al sistema de regreso al estado inicial de no-equilibrio. En particular, si se revertieran las velocidades de cada partícula el sistema evolucionaría hacia un estado de baja entropía. Como respuesta, Boltzmann enfatizó la dificultad práctica extrema de alcanzar la reversión de velocidades propuesta por Loschmidt diciendo “*es usted quien invertirá las velocidades!*” [BH84].

El propio Boltzmann mejoró su teoría transformándola en una descripción probabilística. Más precisamente, la separación entre escalas microscópicas y macroscópicas, es exactamente lo que nos permite predecir la evolución *típica* de un sistema macroscópico particular. De hecho, esto constituye la visión moderna que explica la llamada “paradoja de la irreversibilidad”. En palabras de Joel Lebowitz [Leb99] (ver también [Leb93, Leb08]),

“... varios ingredientes interrelacionados, que en conjunto proporcionan la clara distinción entre variables microscópicas y macroscópicas, necesarios para la emergencia de un comportamiento temporal asimétrico en la evolución de las variables macroscópicas a pesar de la ausencia total de dicha asimetría en la dinámica de los átomos individuales. Ellos son: (a) la gran disparidad entre escalas microscópicas y macroscópicas, (b) el hecho que los eventos son, como advierte Boltzmann, determinados no sólo por

1. INTRODUCCIÓN

ecuaciones diferenciales, sino también por condiciones iniciales y (c) el uso del razonamiento probabilístico: no es cada estado microscópico de un sistema macroscópico el que evolucionará de acuerdo con la Segunda Ley, sino la ‘mayoría’ de los ellos — una mayoría que sin embargo se vuelve tan abrumadora, cuando el número de átomos en el sistema se vuelve muy grande, que el comportamiento irreversible se convierte en casi una certeza.”

El punto clave aquí es que, ya en el enfoque clásico de Boltzmann, la irreversibilidad emerge precisamente en el salto desde el dominio microscópico al macroscópico. Asimismo, las principales características cualitativas de este paradigma tienen sólo una ligera dependencia en los detalles específicos de la dinámica microscópica subyacente. Estos detalles pueden incluir la sensibilidad ante pequeños cambios en la condición inicial (*caoticidad*), la equivalencia entre los promedios temporales y configuracionales (*ergodicidad*) y una distribución más o menos uniforme del estado del sistema en el espacio de fases (*mezcla*). Sin embargo, estas propiedades microscópicas interrelacionadas son determinantes de la descripción cuantitativa de la evolución macroscópica [Leb99]. En otras palabras, la derivación de ecuaciones macroscópicas hidrodinámicas y difusivas dependerá en última instancia de las inestabilidades en trayectorias microscópicas o, hablando en términos generales, de su dinámica caótica. Esta observación impulsó el estudio de caos, ergodicidad y mezcla, ya que se convirtieron en piezas fundamentales para comprender la irreversibilidad.

1.2.1. Tras los ingredientes cruciales: el experimento numérico de Fermi-Pasta-Ulam

Algunos de los ingredientes mencionados anteriormente ya se pueden encontrar en la Mecánica Clásica (CM) de pocos cuerpos. Según la CM, un sistema compuesto por N partículas en D dimensiones se describe con un punto X en un espacio de fases $(2DN)$ -dimensional. Si el sistema es conservativo, la energía es la cantidad conservada primaria, y el espacio de fases está restringido a una hipersuperficie Ω de $2DN - 1$ dimensiones, generalmente llamada *energy shell*. Sistemas totalmente integrables están incluso más constreñidos, y sus soluciones resultan ser órbitas periódicas regulares, no densas, y estrictamente contenidas en Ω . Si la integrabilidad se rompe, las órbitas se vuelven irregulares y cubren Ω densamente. Esto significa que una trayectoria particular $X(t)$ visitará uniformemente todas las configuraciones dentro de Ω , siempre que un

1.2 La *paradoja* de la irreversibilidad en el mundo clásico

tiempo suficiente haya transcurrido. Esta última observación encarna el concepto de *ergodicidad*: un observable puede ser equivalentemente evaluado vía un promedio de diferentes configuraciones en Ω , o bien por medio de un promedio temporal a lo largo de una sola trayectoria $X(t)$. Tal propiedad es la piedra angular de la SM (clásica) ya que establece la equivalencia entre la descripción de Gibbs en términos de ensambles y el enfoque cinético de Boltzmann. Además, destacamos que las ideas aquí descritas son completamente independientes del límite $N \rightarrow \infty$.

A principios de la década de 1950, Enrico Fermi, John Pasta y Stanislaw Ulam (FPU) [FPU55] intentaron estudiar cuándo y cómo la ruptura integrabilidad puede conducir a un comportamiento ergódico en el marco de una evolución determinista. Ellos consideraron una cadena de osciladores armónicos perturbada por fuerzas anarmónicas con el fin de verificar que estas no-linealidades pueden llevar a la equipartición de la energía como una manifestación de ergodicidad. Si bien el propio Ulam declaró que “*La motivación entonces era observar las tasas de mezcla y termalización ...*” [Fer65], los resultados no fueron los esperados: la dinámica de “termalización” no se observó en absoluto. En su lugar, la evolución temporal en el problema FPU evidenciaba recurrencias notables.

Hoy en día, los resultados sorprendentes de FPU se entienden bien en términos de la teoría del caos [BI05]. En sentido clásico, el caos se define como una sensibilidad exponencial a los cambios en las condiciones iniciales. Esto significa que trayectorias en el espacio de fases, que inicialmente eran arbitrariamente cercanas, se separarán a un ritmo exponencial $\exp[+\lambda t]$. Aquí, la tasa característica λ recibe el nombre de exponente de Lyapunov. En la aparición de este tipo de inestabilidades juegan un papel crucial las llamadas “resonancias no-lineales”. El estudio de tales resonancias, conocido como caos dinámico, fue impulsado por la escuela dirigida por Boris Chirikov [Chi60, IC66]. Precisamente, la aparición de caos dinámico puede identificarse con la transición entre comportamientos no-ergódicos y ergódicos [Zas99]. Existe un criterio más general para el surgimiento de propiedades ergódicas en sistemas mecánicos, y viene dado por la teoría de Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM) [CM10]. Ésta predice que una perturbación no-lineal débil en un sistema integrable destruye las constantes de movimiento sólo localmente en las regiones de resonancias. En otras regiones del espacio de fases, persisten islas de movimiento cuasi-periódico. Aunque una aplicación directa de la teoría KAM al modelo FPU sufre de dificultades técnicas, esta teoría constituye

1. INTRODUCCIÓN

el principal resultado según el cual no debe esperarse ingenuamente ergodicidad por la mera presencia de una débil perturbación no-lineal.

1.3. El mundo cuántico

La descripción KAM no se puede extender directamente a la Mecánica Cuántica (QM). De hecho, cualquier sistema cuántico cerrado y finito involucra un espectro de energía discreto y evoluciona de manera cuasi-periódica en el espacio de Hilbert, el cual resulta un análogo cuántico al espacio de fases clásico. Además, un sistema cuántico cerrado y finito nunca alcanza un estado de equilibrio a través de una evolución no trivial, es decir, nunca equilibra. Ciertamente, esto es una consecuencia de la unitariedad del operador evolución, que a su vez implica la reversibilidad de la dinámica.

Si bien integrabilidad, ergodicidad y caos son conceptos bien establecidos en el contexto de la CM, sus extensiones en QM son mucho menos claras. En particular, la noción de *integrabilidad* en la literatura de QM puede referir a diferentes criterios. Contrariamente a lo que sucede en CM, la existencia de “ N cantidades conservadas u operadores (locales) linealmente independientes y que conmutan mutuamente” no implica necesariamente que el sistema es “exactamente soluble” en el dominio cuántico [CM11, GME11]. Además, el concepto de *ergodicidad* en QM también ha generado un intenso debate, básicamente desde el reciente redescubrimiento del Teorema Ergódico Cuántico (QET) de John von Neumann [von10, GLTZ10]. Por último, pero no menos importante, la definición clásica de caos entendida según la sensibilidad en las condiciones iniciales no se aplica a una teoría ondulatoria como la QM. De hecho, tal como discutiremos más abajo, la presencia de caos dinámico en sistemas cuánticos se encuentra como una inestabilidad de la evolución ante perturbaciones en el Hamiltoniano [JP01].

1.3.1. Un atajo operacional: decoherencia y la teoría de sistemas cuánticos abiertos

La descripción fenomenológica de una dinámica irreversible en el marco de la QM puede realizarse postulando que el sistema de interés está en contacto con un ambiente externo. En efecto, esto implica remover la hipótesis por la cual se asume al sistema como “cerrado”. En palabras de Göran Lindblad [Lin76],

“Parece que la única posibilidad para introducir un comportamiento irreversible en un sistema finito es reemplazar la evolución de tipo unitaria, considerando sistemas no Hamiltonianos. Una forma de hacerlo es postular una interacción del sistema considerado S con un sistema externo R que actúa como baño térmico o instrumento de medición.”

La primera consecuencia de acoplar al sistema a un número infinitamente grande de grados de libertad externos parece ser la destrucción de muchos fenómenos puramente cuánticos que ocurrirían en él. Más precisamente, sería de esperar una atenuación de las interferencias en observables específicos y, en última instancia, la aparición de la clasicidad [Zur03]. Dado que la degradación se origina en la pérdida de coherencia de fase entre los componentes específicos de una superposición cuántica, tal proceso recibe el nombre de *decoherencia*. Este paradigma implica automáticamente el carácter irreversible de la dinámica de sistemas abiertos.

La formulación matemática rigurosa de la dinámica de sistemas cuánticos abiertos se remonta a 1976, cuando el trabajo de Lindblad [Lin76] fue independiente y simultáneamente complementado por el de Vittorio Gorini, Andrzej Kossakowski, y George Sudarshan [GKS76]. Ambos trabajos proporcionan la estructura matemática que deben satisfacer las ecuaciones maestras cuánticas (QME). Éstas pueden ser entendidas como ecuaciones diferenciales de Liouville-von Neumann generalizadas para la matriz densidad reducida. En general, para describir el ambiente externo deben asumirse hipótesis específicas, que son esencialmente conocidas como aproximación de Markov. Muchas de estas suposiciones ya eran conocidas y discutidas en la década de 1950 por Felix Bloch [WB53] y Ugo Fano [Fan57]. Tal como sintetiza Karl Blum [Blu96],

“Se supone que R tiene tantos grados de libertad que los efectos de la interacción con S se disipan muy rápidamente y no hay reacción de respuesta hacia S en una medida significativa, de manera que R se mantiene descrito por una distribución de equilibrio térmico a temperatura constante, independientemente de la cantidad de energía y polarización que difunde hacia él desde el sistema S . En otras palabras, se supone que la reacción de S sobre R es despreciable y las correlaciones entre S y R , inducidas por la interacción, tampoco son considerables.”

El enfoque QME ha demostrado ser operacionalmente exitoso para describir decoherencia en muchos escenarios específicos. Estos son típicamente sistemas cuánticos de pocos cuerpos acoplados inevitablemente a un ambiente, como ocurre en óptica cuántica

1. INTRODUCCIÓN

[GZ04, PB02]. Sin embargo, el grado extremo del aislamiento en recientes realizaciones experimentales de muchos cuerpos [BDN12, BR12] ha reorientado nuevamente los esfuerzos teóricos hacia el estudio de la dinámica y los fundamentos de SM en sistemas cuánticos cerrados.

1.3.2. Equilibración en sistemas cuánticos cerrados.

Al igual que en el gas de Boltzmann constituido por moléculas o partículas que chocan, consideremos aquí un sistema cuántico cerrado compuesto por un gran número N de partículas interactuantes. Suponemos que el estado inicial del sistema ($t = 0$) está dado por $\hat{\rho}_0$, y que éste no conmuta con el Hamiltoniano \hat{H} . En otras palabras, $\hat{\rho}_0$ es un estado de no-equilibrio. Su evolución temporal está dada por

$$\hat{\rho}_t = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right] \hat{\rho}_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right],$$

que, siendo dependiente del tiempo a través de funciones cuasiperiódicas, presenta marcadas recurrencias y, en sentido estricto, no puede describir la convergencia a un estado de “equilibrio”. Ésta es una mera consecuencia de la unitariedad en la dinámica.

Dado un observable específico, digamos \hat{O} , la evolución temporal de su valor de expectación está dado por:

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \text{tr} \left(\hat{\rho}_t \hat{O} \right).$$

Sorprendentemente, a condición que \hat{O} cumpla ciertas condiciones, puede ocurrir la *equilibración* de $\langle \hat{O}(t) \rangle$. Aquí, equilibración significa que después de algún comportamiento transitorio, $\langle \hat{O}(t) \rangle$ alcanza cierto valor “estacionario” y permanece *cercano* al mismo durante la *mayor parte* del tiempo. Existen varias preguntas teóricas acerca de la idea de equilibración que actualmente generan un intenso debate. Dos de las más importantes son: ¿cuáles son las condiciones requeridas en \hat{O} , \hat{H} y $\hat{\rho}_0$ para que se observe equilibración en la dinámica de $\langle \hat{O}(t) \rangle$? y, ¿hay algún ensamble de equilibrio de la SM que pudiera ser utilizado para predecir el valor asintótico estacionario de $\langle \hat{O}(t) \rangle$?

Parece que un requisito clave para el equilibración es la *localidad* de \hat{O} . En términos simples, esto significa que \hat{O} involucre sólo un pequeño número de sitios o partículas. La idea de localidad proporciona un argumento natural en favor de un comportamiento aparentemente irreversible en $\langle \hat{O}(t) \rangle$. De hecho, si “observamos” un subsistema local que involucra sólo una pequeña fracción de los grados de libertad de todo el sistema,

el acoplamiento al resto del sistema imita un acoplamiento a un ambiente externo. Por lo tanto, como en la discusión sobre la dinámica de sistemas abiertos, la relajación de $\langle \hat{O}(t) \rangle$ se produce debido a la presencia de un gran ambiente (“el resto”) que “observa” al subsistema. En tal caso, se dice que el sistema completo puede actuar como su propio ambiente.

En comparación con equilibración, la *termalización* constituye un proceso mucho más específico [RDO08]. Termalización implica que $\langle \hat{O}(t) \rangle$ asintóticamente se acerca a un valor estático que puede ser evaluado con uno de los ensambles estándar de la termodinámica de equilibrio. Conforme a la descripción anterior, esto significaría que el subsistema finalmente alcanza un *equilibrio térmico* impuesto por un ambiente (el resto del sistema). En lo que se refiere a la evaluación de los valores de expectación, el estado asintótico no puede distinguirse de un estado de Gibbs $\exp[-\beta \hat{H}]$, que se caracteriza por cierta temperatura efectiva β^{-1} .

Durante los últimos años, la literatura sobre las condiciones requeridas para la existencia de equilibración y termalización ha crecido abrumadoramente (ver [PSSV11, EFG15, HN15] y sus referencias). Sin embargo, gran parte del “progreso” en este campo es básicamente una especie de reformulación del QET de von Neumann. A pesar que el QET original fue publicado por primera vez en alemán en 1929, su traducción inglesa fue publicada recientemente [von10, GLTZ10]. El QET establece las condiciones matemáticas precisas necesarias para la existencia de equilibración en *macroobservables* específicos.

Como se mencionó anteriormente, hay varias preguntas que siguen abiertas en este campo. Entre ellas, vamos a considerar sólo tres, que serán discutidas en cierta medida en esta Tesis. Éstas son:

1. ¿Cómo se comportan las fluctuaciones temporales de $\langle \hat{O}(t) \rangle$ alrededor su valor asintótico cuando N aumenta? ¿Cómo dependen dichas fluctuaciones de \hat{O} , \hat{H} , y el estado inicial $\hat{\rho}_0$?

2. ¿Existen casos en los que el paradigma de equilibración falla sistemáticamente? Si es así, ¿qué podemos aprender de ellos?

3. ¿En qué medida la equilibración es genuina? ¿Es en última instancia irreversible?

En lo que sigue, vamos a elaborar con más detalle las dos últimas preguntas.

1. INTRODUCCIÓN

1.3.3. Localización. “*all the running you can do, to keep in the same place*”

Existen fenómenos sorprendentes en los cuales se inhiben los mecanismos de equilibración. De hecho, los ejemplos que se pueden dar aquí corresponden a dos áreas muy activas en la Física: los *aislantes topológicos* y los *sistemas localizados*. La primera involucra el estudio de nuevos materiales que se comportan como aislantes estándar en su interior, pero que evidencian estados de superficie (conductores) topológicamente protegidos contra perturbaciones externas [Wen04]. La segunda se originó con el trabajo pionero de Philip W. Anderson [And58], que describe la ausencia de difusión de ondas en un medio desordenado. Mientras que los aislantes topológicos no se abordarán en esta Tesis, el fenómeno de localización constituye una pieza importante en nuestro rompecabezas.

La transición extendido-localizado o localización de Anderson (AL) está originalmente inspirada en los experimentos realizados por George Feher (ver [And78] y sus referencias). Feher utilizó Doble Resonancia Electrón-Núcleo para evaluar la difusión de espín (en sentido estricto, la ausencia de la misma) en semiconductores dopados con impurezas. La teoría desarrollada por Anderson para explicar los resultados experimentales requirió de veinte años para tomar su forma acabada y le valió el Premio Nobel en 1977. Básicamente, la dinámica de un sistema de electrones no interactuantes en una red D -dimensional, puede cambiar dramáticamente cuando se introduce un potencial espacialmente desordenado. De hecho, si la magnitud del desorden es pequeña, los autoestados de una partícula se describen en términos de ondas de Bloch extendidas con alguna vida media finita. En tal caso, una excitación local puede describirse como un paquete de ondas que se difunde a lo largo del sistema. Pero cuando la magnitud del desorden es lo suficientemente grande, los autoestados del sistema se localizan en el espacio real. Esto implica que la excitación se mantendría cerca de su ubicación inicial y su difusión (fenómenos de transporte) ya no es posible. En cierto sentido, las mismas impurezas que originalmente favorecen la difusión, el transporte disipativo y la equilibración (vía alguna forma de caos y exponentes de Lyapunov [Lau87]), terminan conspirando contra ellos. El cambio de paradigma entre estos dos regímenes dinámicos actualmente se refiere como una *quantum dynamical phase transition* (QDPT) [ADLP06].

El paso siguiente al problema de AL estándar corresponde al estudio del fenómeno de localización en sistemas con interacciones. Conviene señalar primero que incorporar

interacciones aumenta la complejidad del problema de manera significativa. Un sistema ordenado interactuante puede por sí mismo evidenciar una transición a una fase aislante si las interacciones son lo suficientemente fuertes: la transición de Mott-Hubbard, que ocurre cuando la banda de estados electrónicos se separa en una banda ocupada y una no-ocupada [Mot68]. Si el sistema está desordenado, la expectativa ingenua aquí sería que las interacciones impiden la existencia de AL esencialmente por dos razones. En primer lugar, el desfase por colisiones destruiría las interferencias específicas necesarias para localizar. En segundo lugar, incluir las interacciones implica automáticamente un incremento exponencial en el tamaño del espacio de Hilbert, que a su vez terminaría por favorecer la difusión. Sin embargo, un tipo diferente de transición ocurre entre una fase extendida y una localizada en sistemas de muchos cuerpos interactuantes, recibiendo el nombre de *many body localization* (localización de muchos cuerpos, MBL) [BAA06, AAS10]. La MBL es una QDPT que se produce cuando están presentes tanto las interacciones como el desorden de Anderson. En cierto sentido, la diferencia conceptual entre AL y MBL es jerárquica: mientras que el primero trata con los autoestados de partículas independientes en el espacio de Hilbert, el segundo se basa en las propiedades de los autoestados de muchos cuerpos en un considerablemente mayor espacio de Fock.

¿Por qué resultan los fenómenos de localización, y en particular la MBL, tan atractivos para estudiar? La respuesta a esta pregunta se remonta al problema FPU y el marco teórico (clásico) desarrollado para entenderlo. Al igual que en el intento de Fermi y sus colaboradores, el objetivo actual es el estudio de los modelos cuánticos simples que puedan ir paraméricamente desde una dinámica cuántica ergódica a una no-ergódica. Más aún, una cuestión fundamental sería si tal eventual transición se produce como un cruce suave o bien tiene un valor crítico definido, es decir, una especie de umbral cuántico KAM generalizado [PSSV11]. De hecho, en el dominio cuántico, el candidato prometedor en tal sentido, es la transición MBL. Si el estado del sistema de muchos cuerpos es extendido, entonces se puede esperar que el sistema sea lo suficientemente ergódico como para comportarse como su propio ambiente y posibilitar la equilibración de observables. En tal caso, los autoestados individuales de energía producirían valores de expectación para los observables de pocos cuerpos que coinciden con los evaluados en el ensamble térmico microcanónico [PSW06, RDO08]. Es pocas palabras, los observables no sólo equilibran, sino también termalizan. Muy por el contrario, si el estado del

1. INTRODUCCIÓN

sistema de muchos cuerpos está localizado, cualquier excitación inicial se mantendría fuera de equilibrio. En este caso, la termalización estaría inhibida. Por tanto, la MBL evidenciaría el umbral buscado entre comportamientos ergódicos y no-ergódicos.

1.4. Ecos del futuro: la NMR entra en escena

Nos focalizaremos ahora en el núcleo de esta Tesis. Consideremos primero un sistema cuántico de muchos espines interactuantes en equilibrio a alta temperatura. Luego asumamos que ese sistema se aparta del equilibrio mediante la inyección de una excitación, que está dada por un exceso local de polarización. Supongamos que el sistema sí puede equilibrarse, es decir, la dinámica puede conducir a una distribución homogénea de la polarización local. Tal equilibración de la polarización es una consecuencia del proceso generalmente llamado *difusión de espín* [BH70, For75]. Sin embargo, a pesar que ese observable particular parece haber alcanzado el “equilibrio”, la unitariedad de la dinámica cuántica asegura una memoria precisa de la condición inicial de no-equilibrio. En otras palabras, el estado inicial está completamente codificado en correlaciones específicas (eventualmente no locales) presentes en el estado evolucionado.

Si algún protocolo experimental pudiera lograr el inverso del operador evolución, es decir, *revertir* la dinámica de muchos cuerpos, entonces conduciría al sistema de regreso al estado de no-equilibrio inicial [BH84]. Esta idea de “eco” se ha mantenido en el corazón de la resonancia magnética nuclear (NMR) desde su nacimiento a finales de la década de 1940. De hecho, el primer experimento de reversión en NMR fue realizado por Erwin Hahn en 1950 [Hah50]. El procedimiento, conocido como eco de espín, revierte la dinámica de precesión de cada espín independiente alrededor de su campo magnético local, invirtiendo el signo de la energía Zeeman. Sin embargo, el signo de la energía asociada a las interacciones espín-espín no se invierte y, en consecuencia, la señal del eco se degrada. Tal deterioro se produce en una escala de tiempo T_2 que caracteriza a la propagación difusiva inducida por las interacciones espín-espín.

A principios de la década de 1970, Horst Kesslemeier, Won-Kyu Rhim, Alex Pines, y John Waugh implementaron la reversión de la dinámica inducida por la interacción dipolar espín-espín [RK71, RPW71]. El procedimiento resulta en el llamado “eco mágico”, es decir una señal que indica la refocalización de una polarización global. Dos

1.5 El eco de Loschmidt: irreversibilidad como fenómeno emergente

décadas más tarde, Richard Ernst y colaboradores introdujeron el “eco de polarización” [ZME92]. Allí, una excitación local inyectada en un sistema de muchos espines, se deja de evolucionar, para luego revertir tal dinámica y finalmente detectar localmente en el sitio inicial. Aunque el éxito de estos experimentos de reversión temporal puso de manifiesto inequívocamente la naturaleza determinista de la dinámica de espines en NMR, resulta claro que la reversión siempre estará inevitablemente degradada por grados de libertad no controlados, ya sea internos, del ambiente o imperfecciones en las secuencias de pulsos. En términos de la teoría de sistemas cuánticos abiertos, estas perturbaciones constituirían las fuentes de decoherencia. Sin embargo, la degradación parece ocurrir en una escala de tiempo, digamos T_3 , mucho más corta que una estimación ingenua de la escala de tiempo característica de las perturbaciones, que llamaremos τ_Σ . Por lo tanto, resulta natural preguntar si la complejidad inherente a un gran número de espines correlacionados aumentaría la fragilidad del procedimiento en presencia de perturbaciones.

1.5. El eco de Loschmidt: irreversibilidad como fenómeno emergente

Los procedimientos de reversión temporal que acabamos de describir pueden ser considerados como una realización moderna del “experimento” propuesto por Loschmidt. Con el propósito de refutar el teorema H de Boltzmann, Loschmidt propuso revertir las velocidades de las partículas como un mecanismo para deshacer el aumento de la entropía. En efecto, los experimentos de NMR mencionados anteriormente son realizaciones específicas de la idea original de “desandar” la evolución temporal [WRP72]. Más aún, esta concepción inspiró a Patricia Levstein y Horacio Pastawski a definir el “eco de Loschmidt” (LE) como una idealización que engloba los procedimientos de reversión temporal, eventualmente imperfectos, implementados en NMR [LUP98, PUIL98, JP01].

Una nueva generación de experimentos en cristales orgánicos [LUP98, PLU⁺00, UPL98], sugirió que la escala de tiempo para la irreversibilidad T_3 nunca excede más de un par de veces T_2 . Por lo tanto, parece que estamos frente a un límite insuperable

$$T_2 \lesssim T_3 \ll \tau_\Sigma.$$

1. INTRODUCCIÓN

La conclusión más inmediata sería que existe todavía una fuente incontrolada de decoherencia, una explicación a la que suscribirían tanto experimentales como teóricos [ZCP07]. Sin embargo, se planteó que la existencia de una “decoherencia independiente de perturbación” (PID) tendría un origen mucho más profundo, con T_3 actuando como una especie de inverso de exponente Lyapunov [PLU⁺00].

Cuando la tasa de decaimiento $1/T_3$ se grafica en función de la intensidad del único término no revertido, es decir, la interacción no secular residual, se observa una saturación a un valor finito: $T_3 \sim 4T_2$ [Usa99]. Esto se muestra explícitamente en la Fig. 1.1. El gráfico se asemeja al comportamiento estándar de la resistividad vs. temperatura en un metal impuro, donde un *offset* de resistividad finita se observa en el límite de temperatura cero. Tal valor está determinado por los procesos de dispersión con las impurezas [DS74], es decir, por el caos [Lau87]. Análogamente, T_3 en el límite de cero perturbación, permanece ligado a la escala de tiempo que caracteriza a la interacción reversible. Esta observación llevó a postular la *hipótesis central de irreversibilidad*: en un sistema de muchos espines (infinitamente grande), lejos de su estado fundamental, su dinámica propia amplifica la acción de cualquier pequeña interacción no invertida que perturbe el procedimiento de reversión. Por lo tanto, interacciones reversibles responsables de la difusión de espín se vuelven determinantes para la tasa de irreversibilidad.

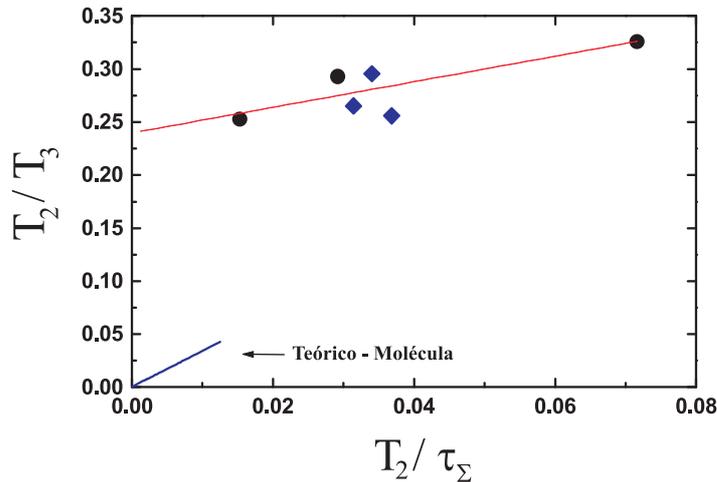


Figura 1.1: La tasa de decaimiento del LE experimental $1/T_3$ como función de la tasa característica de la perturbación $1/\tau_\Sigma$. Ambas cantidades se multiplican por la escala de tiempo T_2 , que corresponde a las interacciones reversibles (Hamiltoniano que se puede controlar). Adaptado de [Usa99].

1.5 El eco de Loschmidt: irreversibilidad como fenómeno emergente

La hipótesis anterior impulsó el estudio teórico de casos simples en los que el LE se puede evaluar sistemáticamente [GPSZ06, JP09, GJPW12]. En particular, el “banco de pruebas” está dado por la dinámica cuántica de un sistema no interactuante cuya contraparte clásica es caótica. Allí, el LE se define como el cuadrado del *overlap* entre dos funciones de onda de un cuerpo, una de ellas evoluciona según un dado Hamiltoniano y la otra con una pequeña perturbación adicional [Cuc04]. Si la evolución no perturbada tiene contraparte clásica caótica entonces existe un valor crítico de perturbación por encima del cual la tasa de decaimiento del LE corresponde al exponente clásico de Lyapunov [JP01, CPJ04]. Tal resultado constituye un régimen PID particular. Éste ocurre para un estado inicial semiclásico construido a partir de un espectro denso y se requiere que la perturbación exceda cierto umbral. Por debajo de ese umbral, el decaimiento del LE depende de la intensidad de las perturbaciones vía una regla de oro de Fermi (FGR) [JSB01, CDPZ03].

El descubrimiento de los regímenes PID en evaluaciones específicas de LE fue una sorpresa que puso en marcha a las comunidades de Caos Cuántico e Información Cuántica. De hecho, el régimen PID tiene implicaciones profundas para el grado de controlabilidad de dispositivos cuánticos, ya que pondría de manifiesto una fragilidad intrínseca de la dinámica cuántica hacia perturbaciones minúsculas. La sensibilidad ante perturbaciones o fragilidad de los sistemas cuánticos [JAB02, KJZ02, BZP13] se ha convertido en un problema importante que afecta transversalmente a varios campos, por ejemplo, la posible caoticidad en computadoras cuánticas [GS00, Fla00], el procesamiento de información cuántica usando NMR [KS04, MOB12, KAC13, SAL⁺14], fenómenos críticos [QSL⁺06, Sil08] y, más recientemente, la teoría de control cuántico [CSF⁺14]. Sin embargo, la prueba definitiva, ya sea numérica o analítica, que justifique la hipótesis planteada arriba, y explique las observaciones experimentales, todavía no se ha alcanzado. La razón de tal atascamiento teórico se basa en la dificultad inherente al estudio de la dinámica de sistemas de muchos cuerpos. Precisamente, la asociación de la complejidad de tales sistemas con una forma de caos [FI00, FI01a], proporcionaría un camino posible para entender la PID observada experimentalmente.

El punto de partida inevitable para el análisis del régimen PID es la identificación de las condiciones para un régimen de “decoherencia *dependiente* de perturbación”, es decir, la FGR. Como ya mencionamos anteriormente, en sistemas de un cuerpo la FGR ocurre desde perturbaciones relativamente débiles (pero suficientes para romper la

1. INTRODUCCIÓN

teoría de perturbaciones estándar) hasta un umbral bastante grande que indica el inicio del PID. Podríamos preguntarnos entonces, ¿es posible que en un sistema de muchos cuerpos el umbral para un régimen PID sea cero? Si ese es el caso, deberá aparecer como una QDPT en el TL ($N \rightarrow \infty$). Esta sería la prueba definitiva de una genuina irreversibilidad emergente.

Como cuestión de hecho, un experimento estándar en NMR involucra una sistema cristalino con un número infinitamente grande (macroscópico) de espines interactuantes. En otras palabras, los experimentos están “ya en el TL”. Por el contrario, cualquier aproximación numérica para evaluar la dinámica de muchos espines sólo puede lidiar con una cantidad estrictamente finita N . Se requiere entonces un procedimiento apropiado de *finite size scaling* para comprender el mecanismo emergente que gobierna la irreversibilidad en el TL. De hecho, podríamos imaginar un aumento progresivo de N yendo desde pequeños sistemas a los más grandes con una perturbación completamente controlada. El TL adquiere entonces un significado preciso, pues el comportamiento emergente seguiría sólo en un orden definido de los límites: primero $N \rightarrow \infty$ y luego $\tau_\Sigma \rightarrow \infty$.

A pesar de que una verificación concluyente del régimen PID puede estar fuera del alcance de las técnicas numéricas actuales, nuestros resultados son consistentes con un imagen emergente de irreversibilidad. Más precisamente, cuantificaremos la escala de tiempo que caracteriza la aparición de una equilibración *irreversible*. Es decir, describiremos las condiciones bajo las cuales un proceso de equilibración unitaria se convierte, en última instancia, irreversible en el TL.

1.6. Organización de la Tesis

Esta Tesis visita los paradigmas dinámicos más relevantes mencionados anteriormente: decoherencia, equilibración, localización y, finalmente, los mecanismos emergentes de irreversibilidad.

En el Capítulo 2 abordamos el problema de un sistema de dos niveles en presencia de ambiente estructurado de espines. El propósito será el de discutir muchas de las herramientas teóricas utilizadas a lo largo de la Tesis, de un manera simple pero no trivial. En particular, introduciremos la transformación de Jordan-Wigner entre electrones y espines 1/2, el formalismo de no-equilibrio de Keldysh, y resultados analíticos

exactos para modelos unidimensionales. Estas herramientas se utilizan para cuantificar las escalas de tiempo en términos de la FGR. La mayoría de estos elementos ya se han estudiado de forma exhaustiva en las Tesis de doctorado de Ernesto Danieli [Dan06], Gonzalo Álvarez [Alv07], Elena Rufeil-Fiori [RF09], y Axel Dente [Den12].

En el Capítulo 3 formulamos el LE como una función de autocorrelación de espín. Discutiremos el papel del LE como un cuantificador de decoherencia, cuando un sistema de espines interactuantes está acoplado a un ambiente de espines similar. En particular, estudiaremos la dinámica de dos cadenas de espín acopladas lateralmente, es decir, una configuración tipo escalera de espines. Allí, como en el paradigma estándar de sistemas cuánticos abiertos, una de las cadenas es “el sistema” y la otra es “el ambiente”. En este contexto, re-elaboraremos muchas de las ideas físicas introducidas en el Capítulo 2: la descripción de las tasas de decoherencia FGR y la transformación de la dinámica de un cuerpo en un verdadero problema de muchos cuerpos.

En el Capítulo 4 abordamos la idea de equilibración en sistemas cuánticos cerrados. En particular, discutiremos una descripción general de la dinámica de observables de pocos cuerpos en sistemas de muchos cuerpos. El objetivo principal se basa en la descripción de las fluctuaciones temporales después de que se haya producido la equilibración (en los casos en que efectivamente se produce tal fenómeno). Mostraremos que estas fluctuaciones decaen exponencialmente con N , y por lo tanto se anulan en el TL. Por otra parte, investigaremos la dependencia precisa en el Hamiltoniano, los estados iniciales y los observables específicos considerados.

En el Capítulo 5 empleamos el LE como un testigo dinámico para estudiar la ruptura de ergodicidad, que a su vez implica la imposibilidad real de equilibración. Esto nos lleva a un diagrama de fases en el que identificamos regiones dinámicas según sus mecanismos predominantes: decoherente, ergódica, vítrea, localización de Anderson, y localización de muchos cuerpos. Argumentos dimensionales basados en el cálculo de incertidumbres de energía proporcionan buenas estimaciones de dos líneas críticas en el diagrama.

El Capítulo 6 da un paso más en la formulación y evaluación del LE en comparación con lo expuesto en los Capítulos 3 y 5. Aquí abordamos la relación entre la autocorrelación de espín, es decir, un LE local y la evaluación estándar del LE definido como *overlap* de funciones de onda de una partícula. La extensión de esta última magnitud al caso de sistemas de muchos cuerpos, nos permite definir acordemente al LE global o LE de muchos cuerpos. Discutiremos la dependencia en N de las escalas de tiempo

1. INTRODUCCIÓN

y pondremos a prueba una hipótesis de extensividad que vincula los LE local y global. Además, proponemos algunas ideas operativas para transformar un LE local en uno global por medio de un LE preparado dinámicamente (DPLE).

En el Capítulo 7 evaluamos el LE en una serie de sistemas cerrados de espines interactuantes. Tanto las interacciones reversibles como la perturbación corresponden a una situación experimental real. Presentaremos una forma de *finite size scaling* en las escalas de tiempo que caracterizan el decaimiento del LE. Esta evidencia numérica indica un mecanismo emergente basado en la proliferación de interacciones efectivas. Dicho mecanismo desencadena una FGR efectiva que describe la dinámica LE. Esto nos lleva a la conclusión que, en el TL y para una perturbación arbitrariamente pequeña, si el sistema permanece equilibrado durante un tiempo más largo que el correspondiente FGR, entonces la equilibración será irreversible.

Discutiremos nuestras conclusiones generales en el Capítulo 8, donde se sintetizan los principales resultados de esta Tesis.

El material suplementario se organiza en dos apéndices. En el Apéndice A discutimos el algoritmo empleado para evaluar numéricamente la dinámica de sistemas de espines interactuantes. En el Apéndice B discutimos la física de un sistema de tres niveles y la derivación de interacciones efectivas.

Capítulo 2

La Regla de Oro de Fermi

En este capítulo se introducen varias herramientas teóricas utilizadas a lo largo de la presente Tesis. En particular, se discutirá el mapeo entre electrones y espines $1/2$, el formalismo de no-equilibrio de Keldysh, los modelos unidimensionales, y los procesos de decaimiento descritos por la Regla de Oro de Fermi. La mayoría de estos elementos están exhaustivamente estudiados en las Tesis de Doctorado de E. Danieli [Dan06], G. Álvarez [Alv07], E. Rufeil-Fiori [RF09], y A. Dente [Den12].

2.1. Escalas de tiempo en la dinámica de la decoherencia

El control y la manipulación coherentes de un sistema cuántico es un desafío central tanto para la nanotecnología [NMM⁺14, NB14] como para la ciencia básica [Ved14, Pop14, AH14, SML014]. La dificultad de tal empresa radica en que los sistemas cuánticos inevitablemente interactúan con el ambiente que los rodea, lo cual provoca la degradación de su dinámica unitaria. Tal proceso, llamado *decoherencia*, involucra la destrucción progresiva de los fenómenos de interferencia cuántica [Zur03].

La manera más común para describir decoherencia está dada por la teoría de sistemas cuánticos abiertos [PB02]. La dinámica de un sistema cuántico abierto \mathcal{S} , acoplado a un ambiente \mathcal{E} , está descrita por una ecuación maestra cuántica (que llamaremos QME) y cuya estructura matemática general se conoce como Lindblad-GKS [Lin76, GKS76]. Esencialmente, una QME es una ecuación diferencial de Liouville - von Neumann generalizada que describe la evolución de la matriz densidad reducida [Sli80]. En la mayoría de los casos, esta estrategia se basa en la hipótesis de “fluctuacio-

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

nes rápidas” para \mathcal{E} , lo cual se conoce como aproximación Markoviana. Esto significa que cualquier excitación difunde por completo casi instantáneamente en \mathcal{E} . En términos de escalas dinámicas, la aproximación Markoviana implica que la escala de tiempo de \mathcal{E} es la más corta en comparación con cualquier otra escala relevante. Además, las interacciones \mathcal{SE} entre el sistema y el ambiente ocurren en un tiempo característico dado por la Regla de Oro de Fermi (FGR), típicamente evaluada como una magnitud independiente de energía. Estas premisas suelen ser suficientes para la mayoría de las aplicaciones, pero dejan de lado efectos de memoria e interferencias en el dominio temporal producidas por un juego \mathcal{SE} coherente.

Una alternativa al esquema propuesto por la QME radica en el formalismo de no-equilibrio de Keldysh [Kel64, KB62] en la representación integral propuesta por Danielewicz [Dan84]. Esta estrategia emplea una expansión perturbativa a orden infinito en diagramas de Feynman específicos y permite la manipulación del dominio energía-tiempo tal como en la representación de Wigner. Para el caso particular de fermiones, la ecuación integral de Danielewicz puede transformarse y resolverse bajo la forma de una ecuación generalizada de Landauer-Büttiker (GLBE) [Pas91, Pas92]. En este contexto, es importante remarcar que el formalismo de Keldysh permite naturalmente introducir condiciones de *auto-consistencia* en la descripción de procesos de decaimiento. El trabajo pionero de Langreth y Wilkins [LW72, SLW76] es un ejemplo concreto en tal sentido.

La dinámica de sistemas cuánticos abiertos está caracterizada esencialmente por una tasa de interacción $1/\tau_{\mathcal{SE}}$ entre \mathcal{S} y \mathcal{E} . De hecho, el juego entre las escalas de tiempo del sistema (digamos, por ejemplo, $1/\omega_0$) y aquellas propias de la interacción ($\tau_{\mathcal{SE}}$) pueden resultar en efectos muy particulares. Mientras que interacciones débiles ($1/\tau_{\mathcal{SE}} \ll 2\omega_0$) simplemente degradan las interferencias dinámicas a una tasa $1/\tau_\phi \propto 1/\tau_{\mathcal{SE}}$, interacciones fuertes podrían cambiar radicalmente la respuesta de sistema. Este último es el caso de transiciones de fase dinámicas o *quantum dynamical phase transition* (QDPT) [ADLP06]. Aquí, la posibilidad de un comportamiento no-analítico aparece porque el Hamiltoniano *efectivo* del sistema deja de ser Hermítico [Rot09, Pas07]. La razón de este fenómeno se vincula con el hecho que el ambiente tiene un número de grados de libertad N que puede considerarse infinito.

En este capítulo utilizaremos el formalismo de Keldysh para estudiar analíticamente la tasa de interacción $1/\tau_{\mathcal{SE}}$. El sistema (\mathcal{S}) está dado por dos espines $1/2$ acoplados,

2.1 Escalas de tiempo en la dinámica de la decoherencia

que sólo pueden adoptar las configuraciones $\uparrow\downarrow$ y $\downarrow\uparrow$. Tras aplicar la transformación de Jordan-Wigner (JWT) [LSM61], el sistema en cuestión se reduce a una excitación que puede ocupar dos estados degenerados A y B , que están acoplados vía una amplitud de *hopping* V_{AB} . Si se comienza en el estado A , la probabilidad de retorno oscila con la frecuencia de Rabi $\omega_0 = 2V_{AB}/\hbar$. Tal oscilación se degrada progresivamente debido a una débil interacción $\mathcal{S}\mathcal{E}$. En particular, consideramos un ambiente (\mathcal{E}) que está representado por una cadena infinita de espines $1/2$. La dinámica de decaimiento puede atravesar diferentes regímenes temporales [DBMP08], pasando por un decaimiento cuadrático a tiempos cortos, luego el usual decaimiento exponencial y, finalmente una ley de potencias que aparece a tiempos muy largos [RFP06a]. Aquí, nos focalizaremos en el régimen más relevante: el exponencial, el cual será discutido en términos de la FGR. El conocimiento acabado de la estructura espectral del ambiente resulta entonces ser crucial. Para el caso que se considera, tal información está disponible pues la JWT mapea \mathcal{E} en una cadena lineal *tight-binding* completamente integrable.

Discutiremos dos descripciones diferentes. Por un lado, presentaremos la aproximación Markoviana, que toma la forma de una FGR basada en la aproximación de Banda Ancha (aproximación que llamaremos WBA, por sus siglas en inglés). En tal caso, la tasa de interacción $1/\tau_{\mathcal{S}\mathcal{E}}$ es independiente de energía. Por otro lado, evaluaremos una FGR auto-consistente (SC-FGR) que proporciona una descripción no-Markoviana [RFP06a]. En contraposición a la WBA, la tasa calculada de acuerdo con la SC-FGR es dependiente de energía pues viene dada por las auto-energías complejas exactas para el conjunto $\mathcal{S} + \mathcal{E}$ [RF09].

En el caso específico de una interacción $\mathcal{S}\mathcal{E}$ del tipo Ising, la tasa que se calcula según WBA es divergente. Con el propósito de evitar tal divergencia, proponemos un procedimiento de regularización que puede entenderse como una energía propia (*self-energy*) auto-consistente. Esta estrategia, no sólo permite el cómputo de una contribución finita de los procesos tipo Ising, sino que también posibilita una interpretación física del decaimiento originado por tales procesos. En particular, discutiremos cómo la naturaleza de “dos cuerpos” de la interacción Ising implica un incremento en la dimensionalidad efectiva de \mathcal{E} .

2.2. La transformación de Wigner-Jordan y el formalismo de Keldysh

En esta sección introduciremos brevemente el mapeo JWT entre espines y electrones [LSM61] y el formalismo de Keldysh para procesos de no-equilibrio [KB62, Kel64, Dan84]. Detalles específicos están discutidos extensivamente en la Ref. [Dan06].

La dinámica de un sistema de N espines 1/2, que evoluciona de acuerdo al Hamiltoniano \hat{H} , será descrita con una función de correlación de dos sitios,

$$P_{f,i}(t) = \frac{\langle \Psi_{eq} | \hat{S}_f^z(t) \hat{S}_i^z(t_0) | \Psi_{eq} \rangle}{\langle \Psi_{eq} | \hat{S}_f^z(t_0) \hat{S}_i^z(t_0) | \Psi_{eq} \rangle}. \quad (2.1)$$

Esta función mide la cantidad de polarización local en la componente z a tiempo t en el sitio f -ésimo, a condición de que el sistema estaba a tiempo t_0 en su estado de equilibrio con un espín “up” en el sitio i -ésimo. Además, $\hat{S}_f^z(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{S}_f^z e^{-i\hat{H}t}$ es el operador de espín escrito en la representación de Heisenberg y $|\Psi_{eq}\rangle = \sum_m a_m |\Psi_{eq}^{(m)}\rangle$ es el estado de equilibrio termodinámico de muchos cuerpos, construido sumando estados de diferente número de espines “up” con el peso estadístico apropiado y fases aleatorias [Dan06].

La JWT relaciona los operadores de espín y los fermiónicos en cada sitio vía la siguiente expresión:

$$\hat{S}_n^+ = \hat{c}_n^\dagger \exp \left\{ i\pi \sum_{j=1}^{n-1} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \right\} \quad (2.2)$$

donde \hat{S}_n^\pm son los operadores de subida y bajada de espín $\hat{S}_n^\pm = \hat{S}_n^x \pm i\hat{S}_n^y$, mientras que $\hat{c}_j^\dagger, \hat{c}_j$ son los operadores fermiónicos de creación y aniquilación.

En la representación fermiónica, $|\Psi_{eq}\rangle$ es el estado de equilibrio termodinámico (régimen de alta temperatura): una mezcla, con pesos uniformes, de todos los posibles determinantes de Slater. Para transformar la función de correlación de espín $P_{f,i}(t)$ en su representación fermiónica, definimos aquí el estado de no-equilibrio $|\Psi_{n.e.}\rangle = \hat{c}_i^\dagger |\Psi_{eq}\rangle$. Este estado representa una excitación de partícula (electrón) en el sitio i . La dinámica en el sistema electrónico esta descrita por funciones densidad de partícula y agujero:

$$G_{kl}^<(t_2, t_1) = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_{n.e.} | \hat{c}_l^\dagger(t_1) \hat{c}_k(t_2) | \Psi_{n.e.} \rangle, \quad (2.3)$$

y

$$G_{kl}^>(t_2, t_1) = -\frac{i}{\hbar} \langle \Psi_{n.e.} | \hat{c}_k(t_2) \hat{c}_l^\dagger(t_1) | \Psi_{n.e.} \rangle. \quad (2.4)$$

2.3 El arreglo de espines unidimensional

respectivamente. Los operadores de creación y aniquilación están escritos en su representación de Heisenberg. Los propagadores de dos partículas o funciones de Green (GF) del sistema están definidos por:

$$G_{kl}^R(t_2, t_1) = \Theta(t_2 - t_1)[G_{kl}^>(t_2, t_1) - G_{kl}^<(t_2, t_1)] = [G_{lk}^A(t_1, t_2)]^*, \quad (2.5)$$

donde $\Theta(t_2 - t_1)$ es la función escalón de Heaviside. Tal como se mostrará en la Sec. 2.4, en el caso de Hamiltonianos integrable (casos no-interactuantes), las GF definidas en la Ec. (2.5) son simplemente propagadores de una partícula que conservan densidad.

La aplicación de la JWT a la Ec. (2.1) finalmente nos lleva a [DPL04, DPA05]:

$$P_{f,i}(t) = \frac{2\hbar}{i} G_{ff}^<(t, t) - 1, \quad (2.6)$$

con

$$G_{ff}^<(t, t) = \sum_{m=1}^N \frac{1}{2^{N-1}} \binom{N-1}{m-1} G_{ff}^{<(m)}(t, t). \quad (2.7)$$

Aquí, $G_{ff}^{<(m)}(t, t)$ corresponde a las contribuciones de cada subespacio con m partículas (o equivalentemente m espines *up*). La dependencia de $G_{ff}^<(t, t)$ en el índice i está implícita en la condición inicial. En efecto,

$$G_{kl}^{<(m)}(0, 0) = \frac{i}{\hbar} \left(\frac{m-1}{N-1} \delta_{kl} + \frac{N-m}{N-1} \delta_{ki} \delta_{il} \right). \quad (2.8)$$

El primer término en la Ec. (2.8) es la densidad de equilibrio y puede verificarse que es idéntica para todos los sitios. El segundo término representa la contribución de no-equilibrio donde sólo el sitio i -ésimo es distinto de cero.

2.3. El arreglo de espines unidimensional

Introducimos ahora explícitamente el Hamiltoniano de espín:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{n=1}^{N-1} J_{n,n+1} \left[2\alpha \hat{S}_n^z \hat{S}_{n+1}^z - (\hat{S}_n^x \hat{S}_{n+1}^x + \hat{S}_n^y \hat{S}_{n+1}^y) \right] + \sum_{n=1}^N \hbar \Omega_n \hat{S}_n^z, \\ &= \sum_{n=1}^{N-1} J_{n,n+1} \left[2\alpha \hat{S}_n^z \hat{S}_{n+1}^z - \frac{1}{2} (\hat{S}_n^+ \hat{S}_{n+1}^- + \hat{S}_n^- \hat{S}_{n+1}^+) \right] + \sum_{n=1}^N \hbar \Omega_n \hat{S}_n^z. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Este Hamiltoniano corresponde a un arreglo unidimensional (1D) con interacciones a primeros vecinos (nn) en presencia de un campo magnético externo orientado en la dirección z . El parámetro α representa la anisotropía en tal dirección. La Ec. (2.9) engloba

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

los escenarios de NMR típicos: el “planar” o interacción XY [MBSH⁺97] está dado por $\alpha = 0$; la interacción isotrópica de Heisenberg [LPC91] viene dada por $\alpha = -\frac{1}{2}$; y finalmente la interacción dipolar truncada [ZME92] corresponde a $\alpha = 1$.

Aplicando la JWT a la Ec. (2.9) obtenemos

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{N-1} \left[U_{n,n+1} \left(\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n \hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_{n+1} - \frac{1}{2} \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n - \frac{1}{2} \hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_{n+1} + \frac{1}{4} \right) + \right. \\ \left. -V_{n+1,n} \left(\hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_n + \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1} \right) \right] + \sum_{n=1}^N \varepsilon_n \left(\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n - \frac{1}{2} \right). \quad (2.10)$$

Aquí $\varepsilon_n \equiv \hbar\Omega_n$ son las energías de sitio; $U_{n,n+1} = 2\alpha J_{n,n+1}$ es la integral directa estándar de la interacción Coulombiana entre un electrón en el sitio n y un electrón en el sitio $n+1$; y $V_{n,n+1} \equiv \frac{1}{2}J_{n,n+1}$ es la amplitud de *hopping*. Si todos los términos que involucran corrimientos de energía se suman en energías de sitio re-definidas, entonces

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{N-1} \left[U_{n,n+1} \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n \hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_{n+1} - V_{n+1,n} \left(\hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_n + \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1} \right) \right] + \sum_{n=1}^N \varepsilon_n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n. \quad (2.11)$$

La Ec. (2.11) normalmente recibe el nombre de Hamiltoniano de Hubbard y constituye un modelo ampliamente utilizado en la Teoría de Materia Condensada.

2.3.1. La noción de integrabilidad

Antes de continuar, conviene poner de manifiesto la convención que usaremos en esta Tesis respecto a la noción de *integrabilidad* cuántica. Como ya dijimos, no existe un criterio unificado en la literatura al respecto [CM11]. Con el propósito de evitar la amplia variedad de definiciones de *integrabilidad* en sistemas cuánticos, nuestra noción refiere simplemente a la ausencia de interacciones. De esta forma, usaremos el término “integrable” como sinónimo de “no-interactuante”, lo cual significa que el sistema es “mapeable a partículas libres o física de un cuerpo”. Consistentemente, diremos que el Hamiltoniano en la Ec. (2.11) es integrable cuando $U_{n,n+1} \equiv 0 \forall n$. Luego, según nuestra convención, diremos que el Hamiltoniano XY es integrable, mientras que el Hamiltoniano Heisenberg no lo es, aun cuando este último puede “resolverse” vía el *ansatz* de Bethe.

2.4. El caso no-interactuante

2.4.1. Modelos *tight binding* para la dinámica de excitaciones

El caso específico $\alpha = 0$ en el Hamiltoniano definido por la Ec. (2.9) corresponde a $U_{n,n+1} \equiv 0$ en la Ec. (2.11). De hecho, esta situación representa la dinámica de una única partícula. Aquí, cada subespacio con $\binom{N}{m}$ estados de proyección es espín $\langle \sum_{n=1}^N \hat{S}_n^z \rangle = m - N/2$ es ahora un subespacio con m fermiones no-interactuantes evolucionando en una cadena lineal *tight binding*. En tales circunstancias, y si definimos $|i\rangle \equiv \hat{c}_i^\dagger |\emptyset\rangle$ (con $|\emptyset\rangle$ el vacío fermiónico), la Ec. (2.1) se reduce a:

$$P_{f,i}(t) = \left| \langle f | \exp \left[-i\hat{H}t/\hbar \right] |i\rangle \Theta(t) \right|^2 = \hbar^2 |G_{f,i}^R(t)|^2. \quad (2.12)$$

Aquí $G_{f,i}^R(t)$ es la GF retardada para un único fermión.

Los modelos tratables analíticamente proveen de una importante intuición sobre la dinámica de sistemas cuánticos abiertos. Aquí, presentamos dos modelos particulares y los analizaremos en términos de física de un cuerpo. Un sistema \mathcal{S} compuesto por dos sitios (básicamente un sistema de dos niveles) está acoplado a un ambiente \mathcal{E} dado por una cadena lineal infinita *tight-binding*. Los modelos considerados se muestran en la Fig. 2.1. Dado que \mathcal{E} es “integrable”, los efectos de memoria pueden caracterizarse acabadamente. Obviamente, hay casos en los que la topología de acoples tiene puntos de bifurcación o lazos cerrados en los que la biyección de JWT se rompe. Es decir, no se puede volver a un problema de espines equivalente. Sin embargo, aún en tales situaciones la dinámica de decaimiento y los efectos de memoria deberían ser similares.

Para los casos considerados, el Hamiltoniano completo se escribe de la siguiente forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes I_{\mathcal{E}} + I_S \otimes \hat{H}_{\mathcal{E}} + \hat{V}_{S\mathcal{E}}, \quad (2.13)$$

donde:

$$\hat{H}_S = E_A \hat{c}_A^\dagger \hat{c}_A + E_B \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_B - V_{AB} (\hat{c}_A^\dagger \hat{c}_B + \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_A). \quad (2.14)$$

La amplitud de *hopping* V_{AB} define la única escala de tiempo del sistema siempre que $E_A = E_B$. El ambiente \mathcal{E} , cuyo ancho espectral es $4V$, está descrito por el Hamiltoniano:

$$\hat{H}_{\mathcal{E}} = \sum_{n=n_0}^{\infty} \left[E_n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n - V (\hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_n + \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1}) \right]. \quad (2.15)$$

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

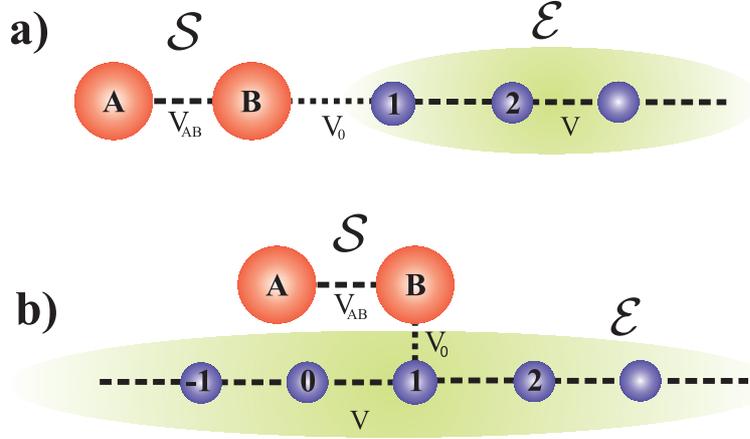


Figura 2.1: Sistema de dos sitios \mathcal{S} ; la configuración inicial está dada por una partícula en el sitio **A**. El sitio **B** está acoplado al sitio 1 del ambiente \mathcal{E} . Dos modelos alternativos se consideran para \mathcal{E} : **(a)** cadena semi infinita (superficie), y **(b)** cadena infinita (“*bulk*”).

Con el fin de simplificar el análisis sin perder generalidad, fijaremos $E_n = 0 = E_A = E_B$ (salvo que se indique explícitamente lo contrario). Las dos alternativas consideradas son: $n_0 = 1$, es decir la cadena lineal semi-infinita que se muestra en la Fig. 2.1**(a)** y $n_0 = -\infty$, es decir la cadena lineal infinita de la Fig. 2.1**(b)**. El Hamiltoniano $\hat{V}_{\mathcal{S}\mathcal{E}}$ que describe la interacción $\mathcal{S}\mathcal{E}$ es

$$\hat{V}_{\mathcal{S}\mathcal{E}} = -V_0 \left(\hat{c}_B^\dagger \hat{c}_1 + \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_B \right), \quad (2.16)$$

donde el índice 1 corresponde al sitio específico en el que el ambiente está directamente acoplado al sistema.

Resulta importante remarcar que V_{AB} , V_0 y V determinan las escalas de tiempo relevantes. Las primeras dos proveen la amplitud de *hopping* del sitio *A* al sitio *B* y a \mathcal{E} , respectivamente. El tercero es la amplitud de *hopping* entre los sitios en el ambiente. Todos los casos considerados aquí corresponden al régimen de acoplamiento débil, dado que imponemos $V_0 \ll V_{AB}$. Ésto nos asegura una degradación suave de la evolución coherente en \mathcal{S} . Tal degradación o proceso de decaimiento será descrito vía la FGR. Antes de realizar tal descripción para los modelos ya introducidos, discutiremos brevemente el uso estándar o académico de la FGR.

2.4.2. Dinámica de decaimiento I. La FGR estándar

El paradigma más ampliamente usado para describir un decaimiento “irreversible” desde un sistema \mathcal{S} a un ambiente \mathcal{E} es la FGR. La FGR predice un decaimiento exponencial de las funciones de correlación en \mathcal{S} por presencia de \mathcal{E} , siendo este último el que provee un espectro suficientemente denso o cuasi-continuo de energía. Más aún, la FGR provee una fórmula simple para estimar la escala característica de decaimiento $1/\tau_{\mathcal{SE}}$. Comúnmente, en este punto se asume que las escalas dinámicas relevantes en \mathcal{E} son mucho más cortas que aquellas de \mathcal{S} y que aquellas de la interacción \mathcal{SE} . Tal separación de escalas de tiempo está típicamente asociada a una aproximación Markoviana.

Con la finalidad de formalizar estas ideas y presentar la FGR, vamos a discutir aquí el modelo académico que se muestra en la Fig. 2.2. Consideramos un único estado $|A\rangle$ con energía E_A débilmente acoplado a un conjunto de N niveles de energía $\{E_k\}_{k=1}^N$ que hace las veces de \mathcal{E} . El ancho espectral de \mathcal{E} es $B = Nd$, donde d representa el espaciado medio entre niveles $d = \overline{|E_{k+1} - E_k|}$. La intensidad del acoplamiento entre E_A y un dado estado E_k está dado por V_{Ak} . Además, asumimos que $d \ll V_{Ak} \ll B$. La primera desigualdad asegura que el tiempo característico de la interacción \mathcal{SE} , definido como \hbar/V_{Ak} , es mucho más pequeño que el tiempo de Heisenberg de \mathcal{E} . Este último tiempo, denotado por T_H , es el momento en el que se manifiestan las recurrencias propias de un sistema finito $T_H \sim \hbar/d = \hbar N/B$.

La corrección perturbativa a primer orden para la energía E_A es

$$\tilde{E}_A \simeq E_A + \sum_k \frac{|V_{Ak}|^2}{(E_k - E_A)}. \quad (2.17)$$

El siguiente paso consiste en tomar el número N de niveles de energía que tienda a infinito. Dado que $B = Nd$, este paso es normalmente denominado *aproximación de banda ancha* (denotaremos WBA).

$$\tilde{E}_A \simeq E_A + \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_k \frac{|V_{Ak}|^2}{(E_k - E_A) + i\eta} \quad (2.18)$$

$$\simeq E_A + \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|V_{Ak}|^2}{(E_k - E_A) + i\eta} N(E_k) dE_k. \quad (2.19)$$

Aquí, la segunda igualdad explícitamente muestra que asumimos la hipótesis de continuo para el espectro de \mathcal{E} . Consistentemente, $N(E_k)$ es la densidad de estados en

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

\mathcal{E} que específicamente están conectados vía la interacción \mathcal{SE} , también conocida como densidad de estados directamente conectados (DDCS). Luego, la corrección a la energía E_A es [Mat77]:

$$\tilde{E}_A \simeq E_A + \Delta_0 - i\Gamma_0. \quad (2.20)$$

En consecuencia, Γ_0 provee una vida media finita para el estado $|A\rangle$,

$$\frac{1}{\tau_{\mathcal{SE}}} = \frac{2\Gamma_0}{\hbar} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} |V_{Ak}|^2 N(E_k) \delta(E_k - E_A) dE_k \quad (2.21)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \left\| \hat{V}_{\mathcal{SE}} \right\|^2 N(E_A). \quad (2.22)$$

Entonces, la escala de tiempo característica FGR $1/\tau_{\mathcal{SE}}$ resulta ser un producto entre el segundo momento de la interacción \mathcal{SE} , formalmente denotado por $\left\| \hat{V}_{\mathcal{SE}}^2 \right\|$, y la DDCS evaluada en $E \simeq E_A$. Al estar evaluada en una energía representativa, Γ_0 se considera una magnitud “independiente de energía”, y la razón última de tal independencia radica en la WBA. Además, la delta de Dirac en la Ec. (2.21) implica que la FGR requiere la mezcla (o acoplamiento) de un número “infinitamente” grande de estados degenerados. En la práctica, esto significa que hay un gran número de estados k en \mathcal{E} que tienen casi la misma energía que el estado $|A\rangle$, es decir $E_k \sim E_A$.

También conviene notar que, a pesar de ser estándar, la descripción aquí discutida ignora comportamiento dinámicos sorprendentes que aparecen a tiempos muy largos, tales como el colapso de la supervivencia [RFP06a, DBMP08] y el subsecuente decaimiento tipo ley de potencias [Kha58, FGR78, GCMM95]. Más aún, cualquier efecto de memoria o retroalimentación coherente de \mathcal{E} a \mathcal{S} es descartado. Esto último ocurre en dinámicas no-Markovianas, en las que las escalas de tiempo típicas de \mathcal{S} y \mathcal{E} son similares.

2.4.3. Dinámica de decaimiento II. La FGR autoconsistente.

Evaluaremos ahora la Ec. (2.12) para los modelos de la Fig. 2.1. En particular, calcularemos la Probabilidad de Supervivencia (SP)

$$P_{AA}(t) = \left| \langle A | \exp \left[-i\hat{H}t/\hbar \right] | A \rangle \Theta(t) \right|^2 = \hbar^2 |G_{AA}^R(t)|^2. \quad (2.23)$$

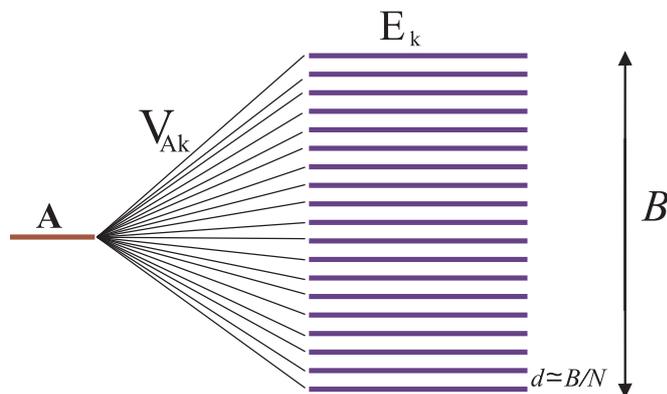


Figura 2.2: Un único estado $|A\rangle$ está débilmente acoplado a un conjunto de estados que representa un espectro cuasi-continuo. Reproducido de [RF09].

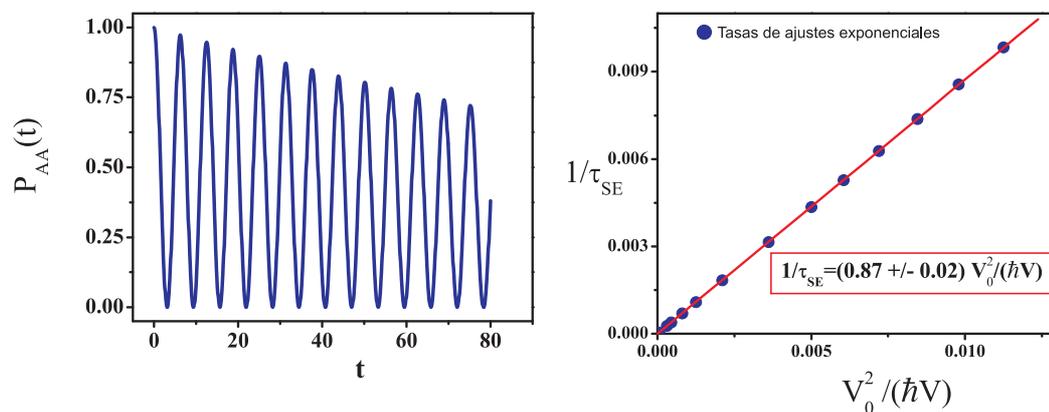


Figura 2.3: (a) Evaluación numérica de la Ec. (2.23) como función del tiempo en unidades de \hbar/V . (b) Tasas de decaimiento $1/\tau_{SE}$ como función de $V_0^2/(\hbar V)$. Las constantes de decaimiento corresponden a la función de ajuste $y(t) = \exp\{-2t/\tau_{SE}\} [\cos(\omega t/2) + (1/(\omega\tau_{SE}))\sin(\omega t/2)]^2$ [Den12].

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

En el dominio de energía,

$$G_{AA}^R(\varepsilon) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \langle A | \exp \left[-i \left(\hat{H} - i\eta \hat{I} \right) t / \hbar \right] | A \rangle \Theta(t) \exp [+i\varepsilon t / \hbar] dt \quad (2.24)$$

$$= \frac{1}{\varepsilon - E_A - \frac{V_{AB}V_{BA}}{\varepsilon - E_B - \Sigma(\varepsilon)}}, \quad (2.25)$$

donde $\Sigma(\varepsilon)$ recibe el nombre de *self-energy*. En particular, $\Sigma(\varepsilon)$ está dada por $|V_0|^2 \overline{G}_{11}^R(\varepsilon)$, siendo $\overline{G}_{11}^R(\varepsilon)$ la GF exacta del ambiente \mathcal{E} aislado, en el sitio 1. La correspondiente representación diagramática se muestra en la Fig. 2.4. A diferencia de la descripción WBA anterior, la “memoria” del ambiente está contenida en la dependencia explícita de $\Sigma(\varepsilon)$ en la energía ε .

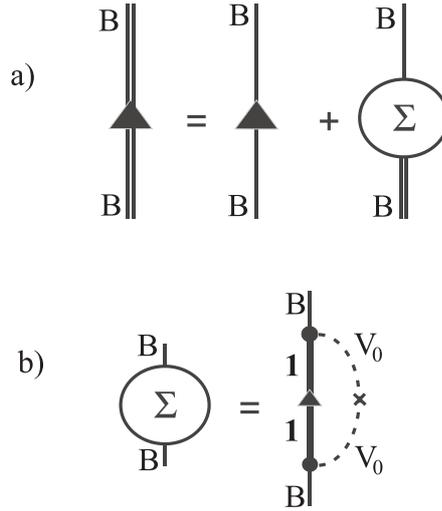


Figura 2.4: (a) Representación diagramática de la GF retardada en el sitio B , bajo la forma de ecuación de Dyson. La línea doble con flechas representa la GF exacta (vestida a orden infinito según la *self-energy*), mientras que la línea simple con flechas representa la GF en ausencia de interacción \mathcal{SE} . (b) Diagrama de *Self-energy* sumando todos los órdenes en el *hopping* al ambiente. La línea gruesa con flechas es el propagador exacto en el sitio 1 de \mathcal{E} aislado, denotado por \overline{G}_{11}^R (ver texto).

La idea operacional se sigue ahora del procedimiento de fracción continua que se discute en la Ref. [PM01]. Una vez que se obtiene explícitamente $\Sigma(\varepsilon)$, los polos de la GF en la Ec. (2.25) se encuentran analíticamente, es decir,

$$0 = \varepsilon_{polo} - E_A - \frac{V_{AB}V_{BA}}{\varepsilon_{polo} - E_B - \Sigma(\varepsilon_{polo})} \quad (2.26)$$

La parte imaginaria Γ del correspondiente polo de la GF provee la escala característica de decaimiento que buscamos,

$$\frac{1}{\tau_{\mathcal{SE}}} = \frac{2\Gamma}{\hbar} = \frac{2}{\hbar} \text{Im}(\varepsilon_{\text{polo}}). \quad (2.27)$$

Este esquema se conoce como regla de oro autoconsistente (SC)- FGR [RFP06b, RFP06a, RFP09]. Notemos que aquí los polos son complejos como consecuencia de la naturaleza no acotada (abierto) de las cadenas lineales infinitas, lo cual evita la aparición de ecos Mesoscópicos [PLU95] y recurrencias de Poincaré.

Para el primer modelo, que se muestra en la Fig. 2.4(a), se obtiene con el esquema SC FGR:

$$\Gamma = \left[\frac{V_0^4 - V_{AB}^2(2V^2 - V_0^2)}{4(V^2 - V_0^2)} + \sqrt{\frac{V_{AB}^4 V_0^2}{4(V^2 - V_0^2)}} \right]^{1/2} \simeq -\frac{1}{4} \sqrt{4 - \left(\frac{V_{AB}}{V}\right)^2} \frac{V_0^2}{V}, \quad (2.28)$$

mientras que para el segundo modelo, que se muestra en la Fig. 2.4(b), obtenemos

$$\Gamma \simeq -\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{4 - \left(\frac{V_{AB}}{V}\right)^2}} \frac{V_0^2}{V}. \quad (2.29)$$

Aquí surge la pregunta de cómo comparan los cálculos SC FGR anteriores con una predicción del tipo WBA para los modelos específicos considerados. De hecho, la WBA descarta la dinámica interna en \mathcal{S} y la correspondiente *self-energy* es evaluada en una energía “representativa”.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\mathcal{SE}}} &= \frac{2}{\hbar} \text{Im}(\Sigma(E_A)) \\ &= \frac{2}{\hbar} \text{Im} \left(|V_0|^2 \overline{G}_{11}^R(E_A) \right) \\ &= \frac{2}{\hbar} |V_0|^2 \text{Im} \left(\overline{G}_{11}^R(E_A) \right) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |V_0|^2 N_1(E_A), \end{aligned} \quad (2.30)$$

donde hemos introducido la densidad local de estados (LDoS) del ambiente $N_1(\varepsilon)$. Notese aquí la equivalencia entre la Ec. (2.22) y la Ec. (2.30). Luego, podemos identificar que N_1 hace las veces de la correspondiente DDCS. En particular, cada modelo en la Fig. 2.4 tiene una N_1 diferente. Para el primer caso, Fig. 2.4(a), corresponde la cadena semi-infinita ($n_0 = 1$, estado en superficie),

$$N_{1s}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi V^2} \left[V^2 - \frac{\varepsilon^2}{4} \right]^{1/2} \Theta \left(V^2 - \frac{\varepsilon^2}{4} \right), \quad (2.31)$$

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

Tabla 2.1: Escala característica \mathcal{SE} para todos los métodos descritos: una evaluación numérica de la SP (Ec. (2.23), ajuste en Fig. 2.3), la WBA (Ecs. (2.33) y (2.34) normalizadas¹) y la SC FGR. Las etiquetas (a) y (b) corresponden a los modelos exhibidos en la Fig. 2.1.

Sistema	Tasa de degradación SP	$\frac{ V_0 ^2}{\hbar V}$	WBA	$\frac{ V_0 ^2}{\hbar V}$	SC-FGR	$\frac{ V_0 ^2}{\hbar V}$
(a) - ($V = V_{AB}$)	0.88 ± 0.05		1		0.87	
(a) - ($V = 5V_{AB}$)	1.00 ± 0.02		1		0.995	
(b) - ($V = V_{AB}$)	0.56 ± 0.02		0.5		0.577	
(b) - ($V = 5V_{AB}$)	0.50 ± 0.02		0.5		0.502	

mientras que para el segundo caso, Fig. 2.4(b), corresponde la cadena infinita ($n_0 = -\infty$, estado en el “*bulk*”):

$$N_{1b}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \left[V^2 - \frac{\varepsilon^2}{4} \right]^{-1/2} \Theta \left(V^2 - \frac{\varepsilon^2}{4} \right). \quad (2.32)$$

Para ambos casos se asume que $E_n = 0$. Finalmente, la hipótesis $0 = E_A = E_B$ implica que:

$$\frac{1}{\tau_{SE}} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_0|^2 N_{1s}(0) = \frac{2}{\hbar} \frac{|V_0|^2}{V} \quad (2.33)$$

en el caso de la Fig. 2.4(a), mientras que

$$\frac{1}{\tau_{SE}} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_0|^2 N_{1b}(0) = \frac{1}{\hbar} \frac{|V_0|^2}{V} \quad (2.34)$$

para el caso de la Fig. 2.4(b).

En la tabla 2.1 comparamos las tasas de decaimiento obtenidas mediante la SC FGR, la WBA y el decaimiento obtenido por ajuste numérico de la SP tal como en la Fig. 2.3 (diagonalización exacta de sistemas finitos). Dos diferentes situaciones consideraremos para \mathcal{E} en comparación a \mathcal{S} . Por una lado, usaremos las mismas escalas temporales ($V = V_{AB}$). Por otro lado, \mathcal{E} se “acelerará” fijando que $V = 5V_{AB}$.

Cuando \mathcal{E} tiene la misma escala dinámica que \mathcal{S} , la WBA no es una buena aproximación a la tasa de decaimiento. Sin embargo, el cálculo de acuerdo con la SC FGR es exactamente lo que se obtendría del ajuste de la SP evaluada numéricamente. En este caso, la tasa de decaimiento puede re-interpretarse como la LDoS de \mathcal{E} siendo evaluada

¹Un factor 1/2 extra aparece porque en \mathcal{S} hay dos estados posibles.

en el valor exacto de los autovalores del completo ($\mathcal{S} + \mathcal{E}$), y *no* en el centro de la banda como en la Ec. (2.30). Ver Fig. 2.5. En efecto, el tiempo característico SC-FGR es obtenido evaluando la LDoS en la parte real del polo de la GF [DBMP08].

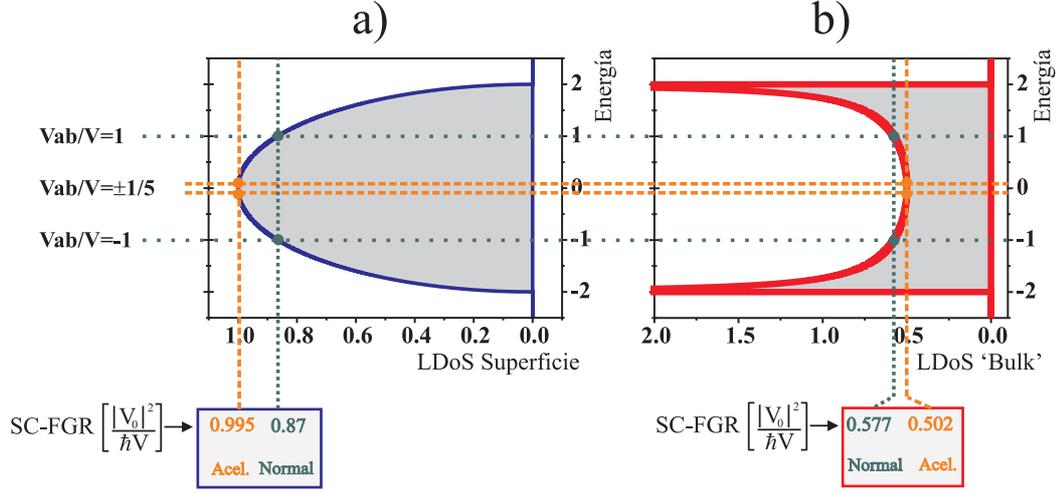


Figura 2.5: Densidad local de estados para: (a) cadena semi infinita (superficie) y (b) cadena infinita (*bulk*). Las líneas horizontales a trazos representan los cocientes V_{AB}/V que se corresponden con las energías del sistema. Las líneas verticales a trazos indican la evaluación de la LDoS para cada sistema en la configuración normal ($V = V_{AB}$) y la acelerada ($V = 5V_{AB}$).

Notemos aquí que las escalas temporales obtenidas según la SC-FGR son *mayores* o *menores* que la predicha por la WBA, dependiendo si \mathcal{E} es una cadena *semi-infinita* o *infinita*. Este resultado puede interpretarse de acuerdo con la Fig. 2.5. Al evaluar la LDoS en $\text{Re}(\varepsilon_{polo}) \simeq \pm V_{AB}/V$, se observa que la tasa de decaimiento SC FGR es menor que la WBA en el caso cadena semi-infinita, y de lo contrario mayor si la LDoS se corresponde con la cadena infinita. En pocas palabras, podemos vincular convexidad de la estructura espectral del ambiente (su LDoS) con la tasa de decaimiento correspondiente. En particular, si la LDoS es *convexa*, los escalas de decaimiento exactas son *mayores* que las predichas según WBA. Por el contrario, si es *cóncava* las escalas exactas son *menores*. En última instancia, dependerá del corrimiento relativo al centro de la banda espectral, moviéndose a lo largo de la LDoS.

El escenario genuinamente Markoviano, en el que la respuesta coherente (memoria) desde \mathcal{E} hacia \mathcal{S} es despreciable, se corresponde con el ambiente acelerado. En tal situación, las escalas temporales SC-FGR coinciden con la predicción WBA. En efecto,

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

en la Fig. 2.5-a se aprecia que las soluciones exactas se mueven hacia el centro de la banda, dado que se verifica la condición $V \gg V_{AB}$.

2.5. Caso interactuante

2.5.1. Keldysh y la WBA

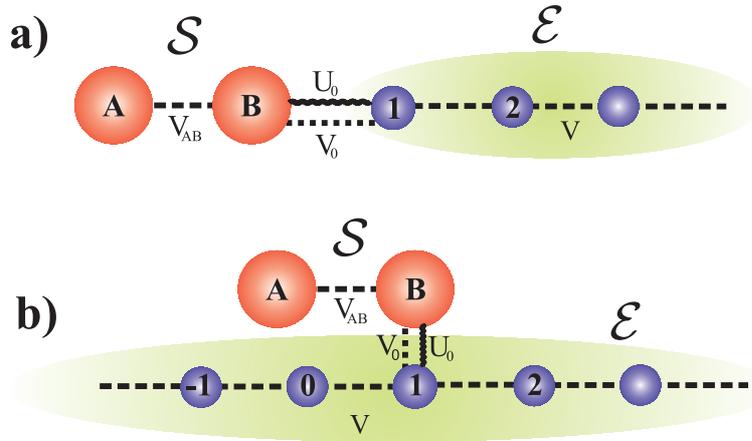


Figura 2.6: Tal como en Fig. 2.1, un sistema de dos sitios \mathcal{S} está acoplado al sitio 1 de un ambiente \mathcal{E} . La interacción \mathcal{SE} incluye tanto los procesos de *hopping* como la interacción Coulombiana.

Comenzaremos modificando los modelos presentados en la Sec. 2.4.1 vía la introducción de interacciones de dos cuerpos, es decir, un acople \mathcal{SE} Coulombiano. Ver Fig. 2.6. Esto significa que ahora consideraremos

$$\hat{V}_{\mathcal{SE}} = U_0 \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_B \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1 - V_0 \left(\hat{c}_B^\dagger \hat{c}_1 + \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_B \right) \quad (2.35)$$

y los Hamiltonianos $\hat{H}_{\mathcal{S}}$ y $\hat{H}_{\mathcal{E}}$ tal como se definieron en la Ec. (2.14) y la Ec. (2.15) respectivamente.

La evolución la función densidad de partícula $\mathbf{G}^<$ para el sistema abierto se describe según [Dan84]:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^<(t, t) &= \hbar^2 \mathbf{G}^R(t, 0) \mathbf{G}^<(0, 0) \mathbf{G}^A(0, t) \\ &+ \int_0^t \int_0^t dt_k dt_l \mathbf{G}^R(t, t_k) \mathbf{\Sigma}^<(t_k, t_l) \mathbf{G}^A(t_l, t). \end{aligned} \quad (2.36)$$

El primer término representa la evolución “coherente” atenuada y el segundo la “reinyección incoherente” descrita por la *self-energy* $\Sigma^<$. Para resolver la ecuación anterior, es necesario conocer la *self-energy* de partícula (y agujero) $\Sigma^{<(>)}(t_k, t_l)$. La solución explícita de la Ec. (2.36), para el caso de la Fig. 2.6(a) se encuentra en las Refs. [Dan06, Alv07]. La idea se basa en la GLBE [Pas91, Pas92] y utiliza las escalas características FGR como argumentos de entrada. Aquí, nos concentraremos solamente en el cálculo de la FGR.

Si expandimos perturbativamente la interacción \mathcal{SE} :

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij}^{\lessgtr}(t_k, t_l) &= |V_0|^2 G_{11}^{\lessgtr}(t_k, t_l) \delta_{ij} \\ &\quad + |U_0|^2 \hbar^2 G_{11}^{\lessgtr}(t_k, t_l) G_{11}^{\gtrless}(t_l, t_k) G_{BB}^{\lessgtr}(t_k, t_l) \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

El primer término corresponde al proceso descrito en la Sec. 2.4, es decir, el *hopping* desde \mathcal{S} al sitio 1 en \mathcal{E} . El segundo término representa la interacción Coulombiana, es decir, un par electrón-hueco es creado en el sitio 1 de \mathcal{E} y luego aniquilado. La descripción diagramática de ambos procesos se muestra en la Fig. 2.7(a).

Introducimos ahora variables tiempo-energía. En particular, el “tiempo físico” $t_i = (t_k + t_l)/2$, y el tiempo propio de las “correlaciones” $\delta t_i = (t_k - t_l)$. Luego, podemos reescribir la integración en la Ec. (2.36),

$$\begin{aligned} &\int_0^t \int_0^t dt_k dt_l \mathbf{G}^R(t, t_k) \Sigma^<(t_k, t_l) \mathbf{G}^A(t_l, t) \\ &= \int_0^t dt_i \int_{-t}^t d\delta t_i \mathbf{G}^R(t, t_i + \frac{\delta t_i}{2}) \Sigma^<(t_i + \frac{\delta t_i}{2}, t_i - \frac{\delta t_i}{2}) \mathbf{G}^A(t_i - \frac{\delta t_i}{2}, t). \end{aligned} \quad (2.38)$$

Además, dado que \mathcal{E} permanece en equilibrio,

$$G_{11}^<(t_i + \delta t_i/2, t_i - \delta t_i/2) = i2\pi g_1(\delta t_i) f_1, \quad (2.39)$$

$$G_{11}^>(t_i + \delta t_i/2, t_i - \delta t_i/2) = -i2\pi g_1(\delta t_i) [1 - f_1]. \quad (2.40)$$

donde f_1 es el factor de ocupación en el sitio 1. El régimen de alta temperatura implica que tal factor es $f_1 = 1 - f_1 = 1/2$. La estructura espectral de \mathcal{E} está contenida en $g_1(\delta t_i)$,

$$g_1(\delta t_i) = \int N_1(\varepsilon) \exp\{-i\varepsilon\delta t_i\} \frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar}, \quad (2.41)$$

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

donde $N_1(\varepsilon)$ es la LDoS según la Ec. (2.31) o bien la Ec. (2.32).

Usamos ahora la hipótesis Markoviana para el ambiente. En primer lugar, notamos que $g_1(\delta t_i)$ decae típicamente en una escala de tiempo \hbar/V (V es la amplitud de *hopping* en \mathcal{E}). En este escenario, la WBA significa que tal escala de tiempo es mucho más corta que la de \mathcal{S} , es decir \hbar/V_{AB} (y que es la escala dinámica propia de G_{BB}^{\lessgtr}). Tal como ya dijimos, esta separación de escalas es equivalente a afirmar $V \gg V_{AB}$. En tal situación, la contribución central a la integral en δt_i en la Ec. (2.38) es del orden de \hbar/V , y podemos entonces reemplazar $\mathbf{G}^R(t, t_i + \delta t_i/2)$ y $\mathbf{G}^A(t_i - \delta t_i/2, t)$ por $\mathbf{G}^R(t, t_i)$ y $\mathbf{G}^A(t_i, t)$ respectivamente. Entonces,

$$\begin{aligned} & \int_0^t dt_i \int_{-t}^t d\delta t_i \mathbf{G}^R(t, t_i + \frac{\delta t_i}{2}) \Sigma^<(t_i + \frac{\delta t_i}{2}, t_i - \frac{\delta t_i}{2}) \mathbf{G}^A(t_i - \frac{\delta t_i}{2}, t) \\ & \simeq \int_0^t dt_i \mathbf{G}^R(t, t_i) \left[\int_{-t}^t d\delta t_i \Sigma^<(t_i + \frac{\delta t_i}{2}, t_i - \frac{\delta t_i}{2}) \right] \mathbf{G}^A(t_i, t). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Ahora nos centramos en el término entre corchetes, es decir, en la integración sobre δt_i . Explícitamente,

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij}^<(t_i) & : = \int_{-t}^t d\delta t_i \Sigma_{ij}^<(t_i + \frac{\delta t_i}{2}, t_i - \frac{\delta t_i}{2}) \\ & = \int_{-t}^t d\delta t_i \left[|V_0|^2 i\pi g_1(\delta t_i) \delta_{ij} + |U_0|^2 \hbar^2 \pi^2 (g_1(\delta t_i))^2 G_{BB}^<(t_i, t_i) \delta_{ij} \right]. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Donde, por el mismo argumento anterior, $G_{BB}^<(t_i + \delta t_i/2, t_i - \delta t_i/2)$ es reemplazado por $G_{BB}^<(t_i, t_i)$. La escala característica de decaimiento se calcula de la siguiente manera:

$$\frac{1}{\tau_{SE}} = \frac{i}{\hbar} [\Sigma_{BB}^>(t_i) - \Sigma_{BB}^<(t_i)] \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned} & = \frac{1}{\hbar} |V_0|^2 2\pi \left[\int_{-t}^t g_1(\delta t_i) d\delta t_i \right] + |U_0|^2 \hbar^2 \pi^2 \left[\int_{-t}^t [g_1(\delta t_i)]^2 d\delta t_i \right] \frac{i}{\hbar} [G_{BB}^>(t_i, t_i) - G_{BB}^<(t_i, t_i)] \\ & = \frac{1}{\hbar} |V_0|^2 2\pi \left[\int_{-t}^t g_1(\delta t_i) d\delta t_i \right] + |U_0|^2 \pi^2 \left[\int_{-t}^t [g_1(\delta t_i)]^2 d\delta t_i \right] \end{aligned} \quad (2.45)$$

Dado que $t \gg \hbar/V$, las integrales anteriores puede tomarse hasta infinito (WBA), y por lo tanto definimos las dos contribuciones a la escala de decaimiento, $1/\tau_{SE} =$

$$(2/\hbar) (\Gamma_{V_0} + \Gamma_{U_0}),$$

$$\frac{2}{\hbar} \Gamma_{V_0} = \frac{1}{\hbar} |V_0|^2 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} g_1(\delta t_i) d\delta t_i \quad (2.46)$$

$$\frac{2}{\hbar} \Gamma_{U_0} = |U_0|^2 \pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} [g_1(\delta t_i)]^2 d\delta t_i. \quad (2.47)$$

Las expresiones anteriores se corresponden con las escalas de decaimiento para procesos de *hopping* y Coulomb respectivamente. Luego de calcularlas explícitamente, la función densidad en la Ec. (2.36) queda completamente determinada usando la solución de la GLBE, ver Refs. [Alv07, Dan06].

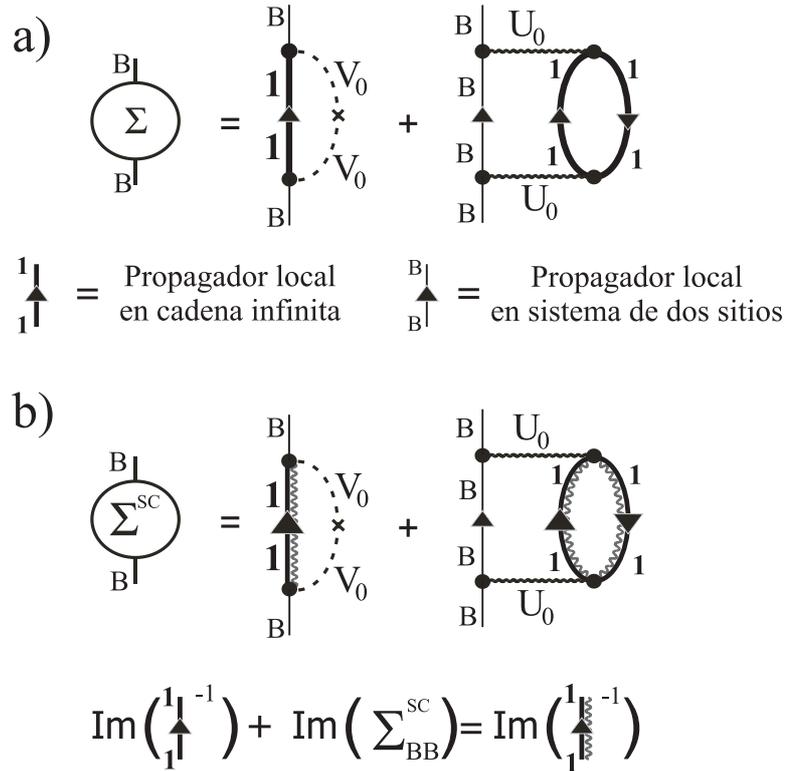


Figura 2.7: (a) Representación diagramática de la *self-energy*, sumando las interacciones con el ambiente en una base local. Las líneas finas con flechas son los propagadores (GF) en ausencia de interacción \mathcal{SE} . Las líneas gruesas son los propagadores locales en \mathcal{E} , representando la dinámica propia de una cadena lineal 1D. (b) *Self-energy* autoconsistente, que incluye una “relajación impuesta” en \mathcal{E} . Aquí, los propagadores están regularizados con una línea con ondulaciones. La condición de autoconsistencia se muestra abajo.

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

2.5.2. Una *self-energy* autoconsistente

En el caso de la Fig. 2.6(a), es decir Ec. (2.31), la transformada de Fourier de $N_{1s}(\varepsilon)$ es

$$g_1(\delta t_i) = \int N_{1s}(\varepsilon) \exp\{-i\varepsilon\delta t_i\} \frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar} = \frac{1}{2\pi V} \frac{J_1(\frac{2V}{\hbar}\delta t_i)}{\delta t_i}, \quad (2.48)$$

donde $J_1(\cdot)$ es la función de Bessel de primer tipo y orden uno. Luego, las contribuciones a la constante de decaimiento son [ADLP07, DALP07]

$$\frac{2}{\hbar}\Gamma_{V_0} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_0|^2 \frac{1}{\pi V} \quad (2.49)$$

$$\frac{2}{\hbar}\Gamma_{U_0} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_0|^2 \frac{2}{3\pi^2 V}. \quad (2.50)$$

En el caso de la Fig. 2.6(b), es decir Ec. (2.32), la transformada de Fourier de $N_{1b}(\varepsilon)$ es

$$g_1(\delta t_i) = \int N_{1b}(\varepsilon) \exp\{-i\varepsilon\delta t_i\} \frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar} = \frac{1}{2\pi\hbar} J_0(\frac{2V}{\hbar}\delta t_i), \quad (2.51)$$

donde J_0 denota la función de Bessel de primer tipo y orden cero. En consecuencia, la contribución de los procesos de *hopping* pueden calcularse,

$$\frac{2}{\hbar}\Gamma_{V_0} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_0|^2 \frac{1}{2\pi V}, \quad (2.52)$$

mientras que la contribución de Coulomb

$$\frac{2}{\hbar}\Gamma_{U_0} = |U_0|^2 2\pi^2 \left[\int_0^\infty \left[\frac{1}{2\pi\hbar} J_0\left(\frac{2V\delta t_i}{\hbar}\right) \right]^2 d\delta t_i \right] \quad (2.53)$$

no puede evaluarse ya que $\int_{-\infty}^\infty [J_0(x)]^2 dx$ diverge.

Con el objeto de evitar esta divergencia, procederemos a regularizarla usando una condición de autoconsistencia. La idea es que la función de correlación $g_0(\delta t_i)$ en \mathcal{E} también está sujeta a decaimiento, y con la misma escala característica $1/\tau_{SE}$. Entonces, proponemos regularizar la correlación temporal $g_0(\delta t_i)$ vía un factor exponencial: $g_0(\delta t_i) \exp\{-\delta t_i/\tau_{SE}\}$. Este procedimiento tiene una interpretación física en términos de una *self-energy* autoconsistente Σ^{SC} , cuya representación diagramática se muestra en la Fig. 2.7(b), y será discutida en la Sec. 2.5.3. Entonces,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{SE}^r} &= \frac{2}{\hbar} (\Gamma_{V_0}^r + \Gamma_{U_0}^r) = \frac{2}{\hbar^2} |V_0|^2 \left[\int_0^\infty J_0\left(\frac{2V\delta t_i}{\hbar}\right) \exp\left\{-\frac{\delta t_i}{\tau_{SE}^r}\right\} d\delta t_i \right] + \\ &+ \frac{1}{2\hbar^2} |U_0|^2 \left[\int_0^\infty \left[J_0\left(\frac{2V\delta t_i}{\hbar}\right) \right]^2 \exp\left\{-\frac{2\delta t_i}{\tau_{SE}^r}\right\} d\delta t_i \right]. \end{aligned} \quad (2.54)$$

La primer integral permanece soluble:

$$\frac{2}{\hbar}\Gamma_{V_0}^r = \frac{2}{\hbar^2}|V_0|^2 \int_0^\infty J_0\left(\frac{2V\delta t_i}{\hbar}\right) \exp\left\{-\frac{\delta t_i}{\tau_{SE}^r}\right\} d\delta t_i = \frac{|V_0|^2}{\hbar V \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{2V\tau_{SE}^r}\right)^2}}. \quad (2.55)$$

Para calcular el segundo término en la Ec. (2.54), definimos cantidades adimensionales: $u^2 = [U_0/V]^2$, $v^2 = [V_0/V]^2$ and $q = \hbar/(V\tau_{SE}^r)$. Luego,

$$q = \frac{u^2}{4} \int_0^\infty [J_0(x)]^2 \exp\{-qx\} dx + v^2 \frac{1}{\sqrt{1 + (q/2)^2}}. \quad (2.56)$$

La integral en la Ec. (2.56) es la transformada de Laplace de $[J_0(x)]^2$, que puede escribirse en la forma $\int_0^\infty [J_0(x)]^2 \exp\{-qx\} dx = (2/\pi) [q^2 + 4]^{-1/2} K\left(2[q^2 + 4]^{-1/2}\right)$, donde $K(\xi)$ es la integral elíptica completa de primer tipo [AS64, GR07]. La Ec. (2.56) ahora se escribe:

$$2\sqrt{\frac{1}{\xi^2} - 1} = \frac{u^2}{4\pi}\xi K(\xi) + v^2\xi, \quad (2.57)$$

donde $\xi = [(q/2)^2 + 1]^{-1/2}$, es decir $q = 2\sqrt{1/\xi^2 - 1}$. Dado que estamos interesados en la región paramétrica en la que $q \ll 1$, o sea $\xi \lesssim 1$ (la integral elíptica tiene la divergencia en $\xi = 1$), usaremos la expansión para $K(\xi)$, en el intervalo $(0, 1)$. Ver Ref. [AS64],

$$\begin{aligned} K(\xi) &= [a_0 + a_1(1 - \xi^2) + a_2(1 - \xi^2)^2] + \\ &\quad + [b_0 + b_1(1 - \xi^2) + b_2(1 - \xi^2)^2] \ln\left(\frac{1}{1 - \xi^2}\right) + Er(\xi^2) \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$|Er(\xi^2)| \leq 3 \times 10^{-5}$$

con $a_0 = 1.38629$, $a_1 = 0.11197$, $a_2 = 0.07252$, $b_0 = 0.5$, $b_1 = 0.12134$, and $b_2 = 0.02887$. Existe una solución para la Ec. (2.57) en la región de interés. Para una elección arbitraria de parámetros, el lado derecho y el lado izquierdo de la Ec. (2.57) están dibujados en la Fig. 2.8.

Resumamos ahora los pasos necesarios para calcular las contribuciones a la escala de tiempo regularizada $1/\tau_{SE}^r$. Primero introducimos un rango apropiado de valores para los parámetros u y v en la Ec. (2.57), con el propósito de resolverla numéricamente para ξ . Luego, usamos la relación entre ξ , q , V y τ_{SE}^r para obtener la escala de decaimiento como función de los parámetros. Una vez que conocemos cómo depende $1/\tau_{SE}^r$ de u y

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

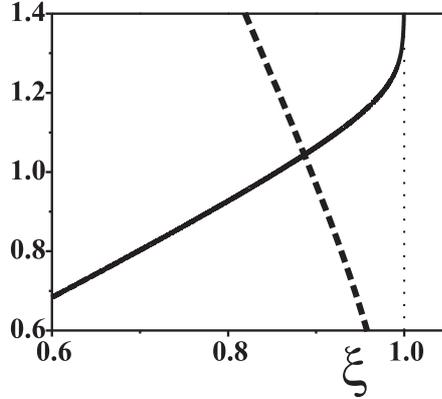


Figura 2.8: La línea continua corresponde al lado derecho de la Ec. (2.57) y la línea a trazos al lado izquierdo. La línea punteada vertical indica la divergencia de $K(\xi)$ en $\xi \rightarrow 1^-$.

v , podemos separar cada una de las contribuciones. Una manera de hacer esto último radica en emplear el valor exacto de la contribución $(2/\hbar)\Gamma_{V_0}$ (de la Ec. (2.52)), para inmediatamente después conocer la otra contribución, es decir $(2/\hbar)\Gamma_{U_0}^r = 1/\tau_{SE}^r - (2/\hbar)\Gamma_{V_0}^r$.

2.5.3. Aspectos relevantes de la FGR y la autoconsistencia

En primer lugar, cabe señalar que la escala de tiempo WBA para los procesos de *hopping* en la Ec. (2.52) es exactamente la misma que en la Ec. (2.34). Esto se puede interpretar fácilmente como la LDoS de una cadena lineal infinita haciendo las veces de DDOS y siendo evaluada en el medio de la banda (WBA). Tal como en la Ec. (2.22), $(2/\hbar)\Gamma_{V_0} = (2\pi/\hbar) \times |V_0|^2 \times (1/2\pi V) = (2\pi/\hbar) \times |V_0|^2 \times N_{1b}(\varepsilon = 0)$.

La condición de autoconsistencia utilizada para regularizar la interacción Coulombiana \mathcal{SE} nos provee una manera de evitar la divergencia en el cálculo WBA. De hecho, tal divergencia es consecuencia de la LDoS *bulk* en la Ec. (2.32). Tal como en el diagrama tipo burbuja de la Fig. 2.7, el mecanismo de decaimiento se interpreta como un par electrón-hueco que se crea en el sitio 1 de la cadena lineal, luego se propaga y finalmente el par es aniquilado al retornar al sitio original. Pensando en una representación en el espacio de Fock, la propagación independiente de una partícula y un hueco, cada cual en una cadena 1D, puede asimilarse como una única excitación que vuelve al mismo sitio original en una red 2D (ver Fig. 2.9). En efecto, la Ec. (2.53) involucra la convolución de dos LDoS *bulk* 1D, lo cual da como resultado una LDoS 2D [PW87].

Dicha convolución puede hacerse explícitamente:

$$\begin{aligned}
 N_{1,\square}(\varepsilon) &= \int N_{1b}(\varepsilon') N_{1b}(\varepsilon - \varepsilon') d\varepsilon' \\
 &= \frac{1}{4\pi^2 V^2} \int \frac{\Theta(2V - |\varepsilon'|) \Theta(2V - |\varepsilon - \varepsilon'|)}{\sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon'}{2V}\right)^2} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon'}{2V}\right)^2}} d\varepsilon' \\
 &= \frac{1}{2\pi^2 V} \int_{-1+x_0}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2} \sqrt{1-(x_0-x)^2}},
 \end{aligned} \tag{2.59}$$

con $x_0 = \varepsilon/(2V)$. Luego de apropiada manipulación [AS64, GR07], esta última expresión puede escribirse en la forma:

$$N_{1,\square}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2 V} K \left(\sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{4V}\right)^2} \right), \tag{2.60}$$

la cual es precisamente la LDoS *bulk* 2D (red cuadrada) de un Hamiltoniano *tight-binding* [Eco83]. Notar además, que $N_{1,\square}(\varepsilon)$ tiene la bien conocida divergencia logarítmica en el centro de banda $\varepsilon = 0$, debido a la divergencia de $K(\xi)$ en $\xi = 1$. Por lo tanto, el origen de la divergencia en el cálculo FGR-WBA puede asociarse directamente no sólo con la estructura espectral de \mathcal{E} sino también con el tipo de interacción \mathcal{SE} . Aquí, a diferencia del caso *hopping*, la interacción Coulombiana requiere la LDoS de una red cuadrada en el rol de correspondiente DDCS,

$$(2/\hbar)\Gamma_{U_0} = (2\pi/\hbar) |\bar{U}_0|^2 N_{1,\square}(\varepsilon = 0), \tag{2.61}$$

con $|\bar{U}_0|^2 = \frac{1}{4} |U_0|^2$. El factor $\frac{1}{4}$ puede rastrearse e identificarse como el producto de factores de ocupación, $f_1(1-f_1) = \frac{1}{4}$.

En analogía con la Ec. (2.59), la convolución de dos LDoS de superficie da como resultado

$$\begin{aligned}
 N_{1,\blacksquare}(\varepsilon) &= \int N_{1s}(\varepsilon') N_{1s}(\varepsilon - \varepsilon') d\varepsilon' \\
 &= \frac{1}{\pi^2 V^2} \int \Theta(2V - |\varepsilon'|) \Theta(2V - |\varepsilon - \varepsilon'|) \left[1 - \left(\frac{\varepsilon'}{2V}\right)\right]^{1/2} \left[1 - \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon'}{2V}\right)\right]^{1/2} d\varepsilon' \\
 &= \frac{2}{\pi^2 V} \int_{-1+x_0}^1 \sqrt{1-x^2} \sqrt{1-(x_0-x)^2} dx,
 \end{aligned} \tag{2.62}$$

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

es decir, la LDoS de “superficie” (vértice) de una red cuadrada (2D), denotada como $N_{1,\blacksquare}(\varepsilon)$. Dado que $x_0 = \varepsilon/(2V)$, si evaluamos $N_{1,\blacksquare}(\varepsilon)$ en el centro de banda,

$$N_{1,\blacksquare}(\varepsilon = 0) = \frac{2}{\pi^2 V} \int_{-1}^1 (1 - x^2) dx = \frac{8}{3\pi^2 V}. \quad (2.63)$$

Luego, similarmente a la Ec. (2.61), podemos volver a la Ec. (2.50) y reescribirla en la forma

$$(2/\hbar)\Gamma_{U_0} = (2\pi/\hbar) |\bar{U}_0| N_{1,\blacksquare}(\varepsilon = 0). \quad (2.64)$$

El cálculo autoconsistente, como procedimiento de regularización, puede asimilarse a un pequeño corrimiento en el plano complejo que remueve una singularidad. De esta forma, se puede pensar que $(2/\hbar)\Gamma_{U_0}^r$ difiere de la Ec. (2.61) en que $N_{1,\square}$ se evalúa para $\varepsilon \neq 0$. En términos de la *self-energy*, la regularización significa que usamos propagadores “vestidos” en \mathcal{E} (ver Fig. 2.7(b)). Estos propagadores incluyen no sólo la dinámica propia del ambiente (cadena infinita), sino también un proceso de decaimiento intrínseco. Como tal decaimiento es el mismo que aquél que queremos calcular, este cálculo recibe el nombre de *self-energy* autoconsistente (Σ^{SC}).

En términos físicos, agregar un comportamiento no trivial en las funciones de correlación del ambiente puede considerarse como una corrección no-Markoviana a una aproximación Markoviana (WBA). Imponer un decaimiento exponencial en \mathcal{E} podría interpretarse como un proceso de decaimiento concatenado, en el que varios ambientes se acoplan consecutivamente $\mathcal{S} \rightarrow \mathcal{E}_1 \rightarrow \mathcal{E}_2 \rightarrow \mathcal{E}_3 \rightarrow \dots$

2.6. Conclusiones

En este capítulo presentamos dos herramientas analíticas para analizar la dinámica de espines interactuantes en presencia de ambientes estructurados. Estas herramientas son: la transformación JWT entre espines y fermiones, y el formalismo de no-equilibrio de Keldysh. En particular, discutimos la dinámica de decaimiento en dos modelos específicos.

Describimos el decaimiento exponencial de una dada función de correlación en términos de la FGR. Así, la escala característica de decaimiento resulta ser el producto entre una adecuada DDCS y el segundo momento de la interacción $\mathcal{S}\mathcal{E}$. En sentido estricto, dos estrategias diferentes se usaron para evaluar la FGR. La primera, llamada WBA,

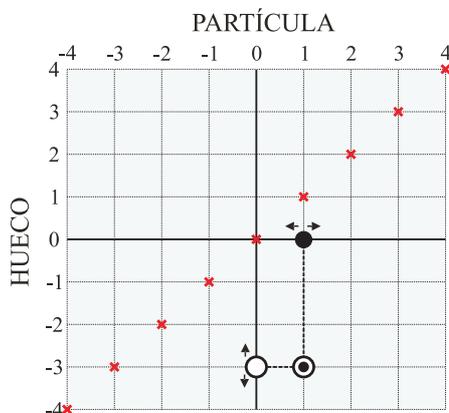


Figura 2.9: Un par partícula-hueco es creado vía la interacción \mathcal{SE} Coulombiana. La dimensión horizontal representa la coordenada unidimensional asociada al movimiento de la partícula (círculo relleno), mientras que la dimensión vertical representa la del hueco (círculo vacío). El par (círculos concéntricos) se propaga como una única excitación en una red cuadrada (2D). La excitación se crea y se aniquila en el sitio (1,1).

se basa en la hipótesis de una marcada separación de escalas de tiempo entre \mathcal{S} , \mathcal{E} y \mathcal{SE} . Siendo intrínsecamente Markoviana, la WBA ignora la dinámica de \mathcal{S} en comparación con una rápida y fluctuante dinámica en \mathcal{E} . La segunda consiste en una FGR autoconsistente, que requiere el cálculo de los polos exactos de la GF. Dado que incluye los efectos de memoria o juego coherente de \mathcal{E} hacia \mathcal{S} , este método provee la escala de decaimiento exacta incluso para situaciones no Markovianas.

La contribución Ising (que vía JWT se mapea a Coulomb) a la escala de interacción \mathcal{SE} diverge al ser evaluada en WBA. Presentamos una alternativa de regularización de tal divergencia vía una condición de autoconsistencia, la cual impone el mismo proceso de decaimiento tanto a \mathcal{S} como a \mathcal{E} . Resulta importante notar que el mecanismo Ising (Coulomb) conlleva una LDoS de una red 2D en el rol de DDCS, a pesar que \mathcal{E} es 1D. Esta observación implica un incremento en la dimensionalidad efectiva que surge por tratarse de una interacción de dos cuerpos.

Las contribuciones originales de este capítulo fueron publicadas en:

“*Non-Markovian decay and dynamics of decoherence in private and public environments*”, Axel D. Dente, Pablo R. Zangara, and Horacio M. Pastawski, [Phys. Rev. A 84, 042104 \(2011\)](#).

2. LA REGLA DE ORO DE FERMI

Capítulo 3

El eco de Loschmidt en sistemas de muchos cuerpos

En este Capítulo introduciremos el eco de Loschmidt definido como una función de autocorrelación de espín. En particular, lo utilizaremos como un testigo dinámico para cuantificar decoherencia. Discutiremos su evaluación numérica en un sistema tipo escalera de espines.

3.1. Cuantificando decoherencia

La manera estándar de cuantificar un tiempo característico de decoherencia τ_ϕ requiere la identificación de un “testigo” de coherencia. En el Capítulo anterior, tal rol era desempeñado por la autocorrelación de espín definida en la Ec. (2.1). Los casos tratados allí consisten en un sistema de dos estados acoplado a un ambiente 1D estructurado. La autocorrelación se reducía entonces a una SP tal como se define en la Ec. (2.23), y su tasa característica de decaimiento es justamente la que se asocia al proceso de decoherencia.

El paso siguiente está dado por considerar sistemas más *complejos* que el caso anterior de dos estados. En particular, el sistema (\mathcal{S}) que analizaremos será una cadena XY de espines 1/2. Este modelo puede implementarse experimentalmente en NMR [MBSH⁺97] y tiene amplias aplicaciones en el campo de información cuántica [Cap14]. En tal caso, la pregunta que surge es ¿cuál sería el cuantificador de decoherencia? La primera respuesta podría ser una extensión de la estrategia ya utilizada: evaluar la

3. EL ECO DE LOSCHMIDT EN SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS

atenuación de una autocorrelación de espín en la cadena. En tal caso, dicho observable evidenciaría recurrencias bien definidas, también conocidas como ecos Mesoscópicos (ME), que aparecen típicamente en sistemas 1D finitos [PAEI94, PLU95, PUL96]. En efecto, la intensidad de los ME ha sido empleada recientemente para cuantificar decoherencia en cadenas de espín acopladas lateralmente [ADLP10].

En este Capítulo, formularemos una función de autocorrelación de espín diferente a la ya estudiada. Se trata del eco de Loschmidt (LE), que constituirá nuestro principal “testigo” dinámico empleado en esta Tesis. En general, el LE se define como la señal obtenida luego de un procedimiento de reversión temporal imperfecta [GPSZ06, JP09, GJPW12]. En sistemas de espines, el LE involucra la evolución, reversión temporal y la detección de una excitación local [LUP98, PLU+00, UPL98]. Más precisamente, se “inyecta” un exceso de polarización en un sistema que se encuentra en equilibrio a alta (infinita) temperatura y luego se deja evolucionar (*hacia delante* en el tiempo) hasta algún instante específico. En ese momento, un procedimiento de reversión cambia el signo del Hamiltoniano, que hace evolucionar al sistema durante un período de tiempo simétrico (pero *hacia atrás* en el tiempo). Finalmente, se mide la polarización en el mismo sitio donde se inyectó inicialmente. En la práctica, cualquier procedimiento de reversión temporal resultaría imperfecto. Es decir, el LE es inexorablemente atenuado por la presencia de grados de libertad no controlados, ya sea interacciones internas al sistema, imperfecciones en el protocolo experimental, o simplemente grados de libertad del ambiente. Esta observación va de la mano con la noción de *decoherencia* y la identificación del LE como un cuantificador de decoherencia.

Estudiaremos entonces la dinámica de una excitación local en una cadena de espines (\mathcal{S}) que se encuentra acoplada a otra cadena, la cual hace las veces de ambiente (\mathcal{E}). La degradación del LE caracteriza la decoherencia debido a la perturbación producida por \mathcal{E} sobre la dinámica en \mathcal{S} . En efecto, la interacción o acoplamiento $\mathcal{S}\mathcal{E}$ rompe la integrabilidad de la cadena aislada, lo cual conlleva a un genuino problema de muchos cuerpos. Se observa un comportamiento bien marcado en cuanto a los regímenes dinámicos de decoherencia: un decaimiento a tiempos cortos cuadrático, un régimen exponencial y finalmente un amesetamiento o saturación a tiempos largos. En particular, analizaremos detalladamente el decaimiento exponencial del LE, identificando cómo las tasas de decaimiento (inverso del tiempo característico) se comportan de acuerdo con la FGR. Además, dado que para acoplamiento débil el LE de una excitación local puede

asimilarse a una SP, los resultados numéricos se comparan con predicciones analíticas previas para tal cantidad [FI01b].

La evaluación numérica de la dinámica en estos sistemas de espines interactuantes corresponde a una descomposición Trotter-Suzuki (TS) de orden cuatro descrita en el Apéndice A.

3.2. La formulación LE

Especifiquemos primero el estado inicial como una “*excitación local en un sistema de muchos espines*”. En efecto, consideramos un sistema de N espines $1/2$ en un estado de temperatura infinita, es decir una mezcla completamente despolarizada, más una polarización localmente inyectada,

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{2^N}(\hat{\mathbf{I}} + 2\hat{S}_1^z). \quad (3.1)$$

Aquí, el espín 1 está polarizado mientras que los otros no lo están, es decir $\text{tr}[\hat{S}_1^z \hat{\rho}_0] = \frac{1}{2}$ y $\text{tr}[\hat{S}_i^z \hat{\rho}_0] = 0 \forall i \neq 1$. Tal estado inicial puede implementarse experimentalmente no sólo en NMR [Cap14] sino también en átomos fríos [WES⁺11, FKE⁺13].

Tal como en los experimentos originales [LUP98, PLU⁺00, UPL98], nuestra evaluación numérica del LE se basa en una reversión temporal imperfecta, seguida por una medición local. El procedimiento se muestra esquemáticamente en la Fig. 3.1. Un Hamiltoniano \hat{H}_0 dicta la evolución *hacia delante* del sistema hasta un cierto tiempo t_R . En ese momento, se cambia el signo de \hat{H}_0 , produciendo un evolución simétrica *hacia atrás*. No obstante, inevitablemente existen perturbaciones, denotadas por $\hat{\Sigma}$, cuyo origen radica en un control imperfecto del Hamiltoniano “total”. En efecto, dado que no pueden controlarse, el signo de estos términos no puede invertirse. Luego, los operadores evolución para cada período de tiempo t_R son:

$$\hat{U}_+(t_R) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_0 + \hat{\Sigma})t_R\right] \quad (3.2)$$

y

$$\hat{U}_-(t_R) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(-\hat{H}_0 + \hat{\Sigma})t_R\right] \quad (3.3)$$

respectivamente. El operador LE está definido como:

$$\hat{U}_{LE}(2t_R) = \hat{U}_-(t_R)\hat{U}_+(t_R), \quad (3.4)$$

3. EL ECO DE LOSCHMIDT EN SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS

y produce una “refocalización” imperfecta a tiempo $2t_R$. Una medición local de la polarización en el sitio 1 termina por definir nuestro LE local:

$$M_{1,1}(t = 2t_R) = 2tr[\hat{S}_1^z \hat{U}_{LE}(t) \hat{\rho}_0 \hat{U}_{LE}^\dagger(t)] = 2tr[\hat{S}_1^z \hat{\rho}_t]. \quad (3.5)$$

Aquí, elegimos como variable libre $t = 2t_R$, el tiempo total en presencia de la perturbación. La dependencia temporal está implícita en $\hat{\rho}_t$ vía la imagen de Schrödinger,

$$\hat{\rho}_t = \hat{U}_{LE}(t) \hat{\rho}_0 \hat{U}_{LE}^\dagger(t). \quad (3.6)$$

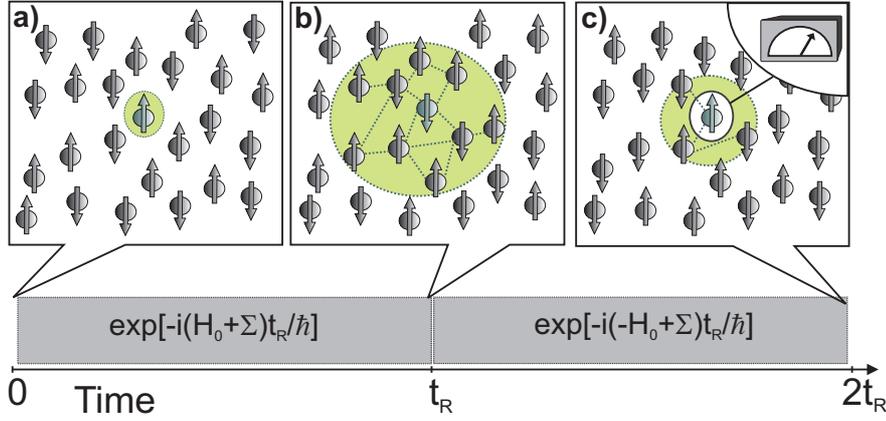


Figura 3.1: (a) Representación pictórica del estado inicial dado por la Ec. (3.1), es decir, un estado de temperatura infinita más un único espín completamente polarizado (excitación local). El operador unitario $\hat{U}_+(t_R) = \exp[-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_0 + \hat{\Sigma})t_R]$ transforma al estado inicial del sistema en un estado correlacionado que se representa en (b). Una reversión temporal, que involucra la inversión del signo de \hat{H}_0 , se aplica a tiempo t_R . Inmediatamente después, la evolución del sistema está dada por $\hat{U}_-(t_R) = \exp[-\frac{i}{\hbar}(-\hat{H}_0 + \hat{\Sigma})t_R]$. Finalmente, (c) se realiza una medición local en el mismo espín que inicialmente se había polarizado.

Usando la Ec. (3.1), y luego de manipulación algebraica, el LE puede escribirse explícitamente como una función de correlación a temperatura infinita:

$$M_{1,1}(t) = \frac{1}{2^{N-2}} tr[\hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z(0) \hat{U}_{LE}(t) \hat{S}_1^z(0)] = \frac{tr[\hat{S}_1^z(t) \hat{S}_1^z(0)]}{tr[\hat{S}_1^z(0) \hat{S}_1^z(0)]}. \quad (3.7)$$

Aquí, la dependencia temporal está escrita según la imagen de Heisenberg,

$$\hat{S}_1^z(t) = \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z(0) \hat{U}_{LE}(t). \quad (3.8)$$

Notemos que la Ec. (3.7) es explícitamente una función correlación en el mismo sitio pero a diferentes tiempos, razón por la cual recibe el nombre de *autocorrelación*. De

hecho, resulta muy importante remarcar que la Ec. (3.7) es un caso particular de la Ec. (2.1), en la cual $i = f = 1$ y el operador unitario de evolución corresponde a $\hat{U}_{LE}(2t_R)$.

En términos del producto interno Hilbert–Schmidt entre las matrices densidad inicial y final, es decir Ecs. (3.1) y (3.6) respectivamente, el LE puede escribirse como:

$$M_{1,1}(t) = 2^N \text{tr}[\hat{\rho}_0 \hat{\rho}_t] - 1 = 2 \frac{\text{tr}[\hat{\rho}_0 \hat{\rho}_t]}{\text{tr}[\hat{\rho}_0 \hat{\rho}_0]} - 1, \quad (3.9)$$

que puede interpretarse, en algún sentido, como el solapamiento estadístico entre dos estados, tal como en la definición estándar del LE para paquetes de onda [JP01] (en el caso de estados mezcla, ver también Refs. [CDPZ03, BZP13]).

Expresiones equivalentes para el LE pueden derivarse descomponiendo la matriz densidad en una base de estados puros. Para proceder en esa dirección, consideraremos la base computacional Ising $\{|\beta_i\rangle\}$. Además, definiremos el conjunto \mathcal{A} de índices j que etiquetan los estados base que tienen el 1^{er} espín *up*, es decir, $j \in \mathcal{A} \Leftrightarrow \hat{S}_1^z |\beta_j\rangle = +\frac{1}{2} |\beta_j\rangle$. Se verifica entonces que $\hat{\rho}_0 = \sum_{j \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} |\beta_j\rangle \langle \beta_j|$. Luego, tal como se introdujo en la Ref. [PLU95],

$$M_{1,1}(t) = 2 \left[\sum_{i \in \mathcal{A}} \sum_{j \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left| \langle \beta_j | \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \right|^2 - \frac{1}{2} \right]. \quad (3.10)$$

$$(3.11)$$

Si utilizamos la identidad $\hat{S}_1^z = \hat{S}_1^+ \hat{S}_1^- - \frac{1}{2} \hat{\mathbf{I}}$ en la Ec. (3.7), la invarianza de la traza ante permutaciones cíclicas nos asegura que $\text{tr}[\hat{S}_1^z(t) \hat{S}_1^z(0)] = \text{tr}[\hat{S}_1^-(0) \hat{S}_1^z(t) \hat{S}_1^+(0)] - \frac{1}{2} \text{tr}[\hat{S}_1^z(t)]$. Dado que $\text{tr}[\hat{S}_1^z(t)] = \text{tr}[\hat{S}_1^z(0)] = 0$, entonces:

$$\begin{aligned} M_{1,1}(t) &= 2 \sum_i \frac{1}{2^{N-1}} \langle \beta_i | \hat{S}_1^-(0) \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z(0) \hat{U}_{LE}(t) \hat{S}_1^+(0) | \beta_i \rangle \\ &= 2 \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \langle \beta_i | \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle, \end{aligned} \quad (3.12)$$

la cual es de hecho una manera explícita de reescribir la Ec. (3.5) en la forma de promedio sobre ensamble. Resulta crucial aquí usar que \hat{S}_1^z es un operador local¹, y por lo tanto su promedio en la Ec. (3.12) puede reemplazarse por el valor de expectación calculado con un único estado puro [ADLP08],

$$M_{1,1}(t) = 2 \langle \Psi_{neq} | \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}_{LE}(t) | \Psi_{neq} \rangle, \quad (3.13)$$

¹El término *local* aquí tiene un significado explícito, pues se trata de un observable de “un cuerpo”. Esta localidad manifiesta será promovida a una noción más abstracta más adelante.

3. EL ECO DE LOSCHMIDT EN SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS

donde:

$$|\Psi_{neq}\rangle = \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{\sqrt{2^{N-1}}} e^{i\varphi_i} |\beta_i\rangle. \quad (3.14)$$

Aquí, φ_i es una fase aleatoria distribuida uniformemente en $[0, 2\pi)$. El estado definido en la Ec. (3.14) es una superposición aleatoria que puede imitar al cálculo tipo “promedio sobre ensamble” y por lo tanto provee de una mejora cuadrática en el uso de recursos computacionales [ADLP08, EF13, PPV14]. Con el propósito de introducir notación que será útil en los próximos capítulos, reescribimos la Ec. (3.14) en la forma

$$|\Psi_{neq}\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes \sum_i \frac{1}{\sqrt{2^{N-1}}} e^{i\varphi_i} |\zeta_i\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\Phi_{2^{N-1}}\rangle. \quad (3.15)$$

Aquí, el índice de suma i recorre completamente el espacio de Hilbert correspondiente a un conjunto de $N - 1$ espines. Además, $\{|\zeta_i\rangle\}$ denota la base computacional Ising de tal espacio. Por lo tanto, $|\Phi_{2^{N-1}}\rangle$ es una superposición aleatoria no polarizada definida sobre todo el espacio de Hilbert de los $N - 1$ espines.

3.3. La escalera de espín

Los modelos específicos que consideramos en este capítulo se muestran en la Fig. 3.2. En el primer caso, Fig. 3.2(a), el sistema \mathcal{S} es una cadena de N espines, que eventualmente podría constituir un canal cuántico. Este sistema interactúa con una segunda cadena \mathcal{E} de N espines, que hace las veces de un “ambiente” que perturba la dinámica de \mathcal{S} . En el segundo caso, Fig. 3.2(b), se imponen condiciones de borde periódicas, transformando así las cadenas en anillos. Conviene notar aquí que el número total de espines ($\mathcal{S} + \mathcal{E}$) es $2N$ en vez de N . Obviamente, la evaluación de todas las fórmulas alternativas de la autocorrelación $M_{1,1}(t)$ discutidas en la Sec. 3.2 se efectúa considerando el número total, es decir, $2N$ espines.

Para ambos casos, el Hamiltoniano de espín está dado por:

$$\hat{H}_{total} = \hat{H}_{\mathcal{S}} \otimes I_{\mathcal{E}} + I_{\mathcal{S}} \otimes \hat{H}_{\mathcal{E}} + \hat{V}_{\mathcal{S}\mathcal{E}}, \quad (3.16)$$

donde el primer y segundo términos representan los Hamiltonianos de \mathcal{S} y \mathcal{E} respectivamente, mientras que el tercero es la interacción $\mathcal{S}\mathcal{E}$. Para simplificar la notación escribiremos simplemente $\hat{H}_{\mathcal{S}}$ y $\hat{H}_{\mathcal{E}}$ en vez de los productos tensoriales con las identidades. Tanto para \mathcal{S} como para \mathcal{E} , usaremos el Hamiltoniano “planar” o XY [MBSH⁺97],

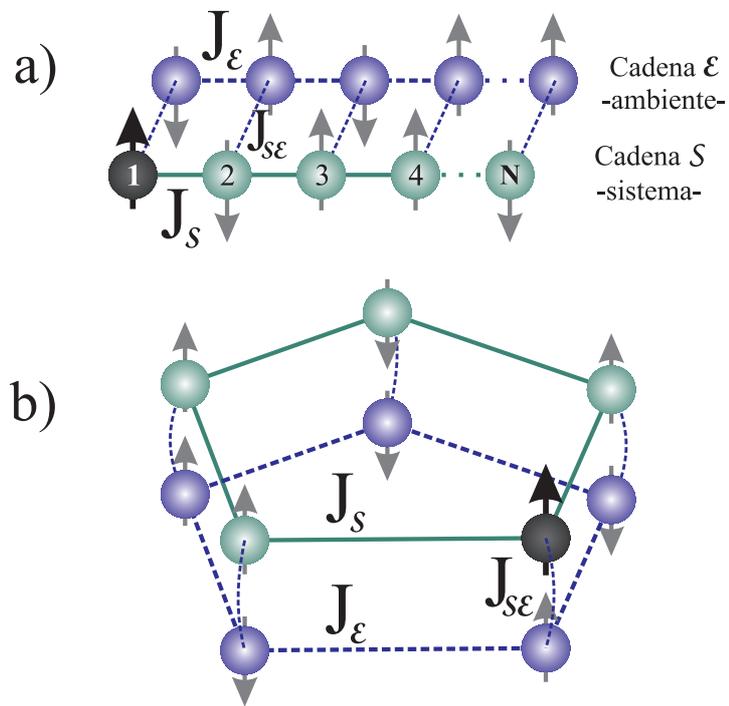


Figura 3.2: El sistema de espines. (a) Condiciones de borde abiertas. (b) Condiciones de borde periódicas (anillos). Las líneas continuas verdes representan interacciones cuyo signo puede invertirse. Las líneas a trazo azules representan interacciones cuyo signo no puede ser invertido. El primer espín (círculo negro) está inicialmente polarizado.

3. EL ECO DE LOSCHMIDT EN SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS

que describe procesos de *flip-flop* entre pares de espines adyacentes. Para el modelo que se muestra en la Fig. 3.2(a), es decir, la cadena abierta,

$$\hat{H}_S = \sum_{n=1}^{N-1} J_S (\hat{S}_{S,n+1}^x \hat{S}_{S,n}^x + \hat{S}_{S,n+1}^y \hat{S}_{S,n}^y) = \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2} J_S (\hat{S}_{S,n+1}^+ \hat{S}_{S,n}^- + \hat{S}_{S,n+1}^- \hat{S}_{S,n}^+). \quad (3.17)$$

$$\hat{H}_E = \sum_{n=1}^{N-1} J_E (\hat{S}_{E,n+1}^x \hat{S}_{E,n}^x + \hat{S}_{E,n+1}^y \hat{S}_{E,n}^y) = \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2} J_E (\hat{S}_{E,n+1}^+ \hat{S}_{E,n}^- + \hat{S}_{E,n+1}^- \hat{S}_{E,n}^+). \quad (3.18)$$

Tal como ya se discutió en las Secciones 2.3 y 2.4, estos Hamiltonianos de espín pueden transformarse a fermiones no-interactuantes (cadenas *tight binding*). Para considerar un modelo tipo anillo, es decir Fig. 3.2(b), un acople tipo *XY* extra debe incluirse entre los espines 1 y N -ésimo. Estas condiciones de borde periódicas no afectan la validez del mapeo a fermiones libres, ver Ref. [DPL04].

El acople inter-cadena es:

$$\begin{aligned} \hat{V}_{SE} &= \sum_{n=1}^N J_{SE} [2\alpha \hat{S}_{S,n}^z \hat{S}_{E,n}^z - (\hat{S}_{S,n}^x \hat{S}_{E,n}^x + \hat{S}_{S,n}^y \hat{S}_{E,n}^y)] \\ &= \sum_{n=1}^N J_{SE} [2\alpha \hat{S}_{S,n}^z \hat{S}_{E,n}^z - \frac{1}{2} (\hat{S}_{S,n}^+ \hat{S}_{E,n}^- + \hat{S}_{S,n}^- \hat{S}_{E,n}^+)]. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Tal como mencionamos en la Sec. 2.3, el parámetro α determina la anisotropía del acoplamiento y puede incluir diferentes interacciones relevantes para el escenario experimental (NMR). En nuestras simulaciones, con el fin de extender y sistematizar nuestro análisis, consideraremos no sólo los casos relevantes para NMR, sino también varios valores seleccionados de α . Notar que para cualquier valor finito de α la interacción \mathcal{SE} tiene siempre los mismos términos *XY*. Tales términos permiten la transferencia de polarización de una cadena a la otra, un proceso que puede pensarse en la representación fermiónica como “tuneleo de una partícula”. En tal imagen pictórica, el término Ising corresponde con una interacción Coulombiana de dos cuerpos.

También en analogía con las Secciones 2.4 y 2.5, resulta importante identificar a las constantes J_S , J_E y J_{SE} en su rol para estimar las escalas de tiempo relevantes. En efecto, las primeras dos determinan el *hopping* o proceso *XY* homogéneo a lo largo de \mathcal{S} y \mathcal{E} respectivamente, mientras que J_{SE} determina la escala de interacción inter-cadena. Para asegurar una degradación suave de la dinámica coherente en \mathcal{S} , fijamos J_{SE} en un régimen de acoplamiento débil, es decir $J_{SE} \ll J_S, J_E$.

3.4. Observaciones en relación al Capítulo 2.

3.4.1. De la física de muchos cuerpos a la de un cuerpo, ida y vuelta

Antes de evaluar numéricamente el LE para los modelos específicos descritos anteriormente, discutiremos algunas ideas físicas subyacentes. En particular, consideremos primero la función de autocorrelación en una cadena XY completamente aislada. Tal caso puede tratarse usando los argumentos expuestos en el Capítulo 2, los cuales llevan desde la Ec. (2.1) a la Ec. (2.6) y finalmente a la Ec. (2.12). Luego, en una evolución ideal “hacia delante” regida por \hat{H}_S , la autocorrelación de temperatura infinita estará dada precisamente por una GF de una partícula. Esto es equivalente a la evolución de un único espín *up* en una cadena de espines *down*,

$$|\Psi_1\rangle = |\uparrow_1\rangle \otimes |\downarrow_2\rangle \otimes |\downarrow_3\rangle \otimes \dots \otimes |\downarrow_N\rangle, \quad (3.20)$$

que, en definitiva, es una función de onda de un cuerpo definida en un subespacio de \mathcal{S} donde la proyección de espín total (dirección z) es $-(N/2 - 1)$. La autocorrelación se evalúa tal como en la Ec. (2.12),

$$P_{1,1}(t) = \left| \langle \Psi_1 | \exp[-i\hat{H}_S t] | \Psi_1 \rangle \right|^2. \quad (3.21)$$

Dado que la cadena tiene N espines, aparecerán efectos de tamaño finito en forma de recurrencias de la polarización. Estas reciben el nombre de ecos mesoscópicos (ME) [PAEI94, PLU95] y ocurren cuando interferencias constructivas se manifiestan en el tiempo de Heisenberg T_H . Tal como señalamos en la Sección 2.4.2, $T_H \sim \hbar/d$, siendo d el espaciado medio entre niveles de energía. En el caso de la cadena, podemos usar como estimado $d \sim J_S/N$, y por lo tanto

$$T_H \sim N \frac{\hbar}{J_S}. \quad (3.22)$$

Estimaciones más específicas evaluadas para modelos particulares no difieren demasiado respecto a nuestro argumento “espectral” dado por la Ec. (3.22). Por ejemplo, tal como se discute en la Ref. [PLU95] para un anillo de N espines acoplados vía interacciones dipolares,

$$T_H = 2\sqrt{2}N \frac{\hbar}{J}. \quad (3.23)$$

Esta cantidad puede interpretarse como el tiempo que una excitación local requiere para recorrer un anillo de largo $L = N \times a$, a una velocidad promedio de $v_M/\sqrt{2}$, siendo

3. EL ECO DE LOSCHMIDT EN SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS

la velocidad de grupo máxima $v_M = a \times \frac{1}{2}J/\hbar$. Una estimación numérica [Usa99] en anillos con interacciones XY resulta en

$$T_H = (1.03N + 1.44) \frac{\hbar}{J}. \quad (3.24)$$

La presencia de una segunda cadena, \mathcal{E} , débilmente acoplada a la primera, no destruye completamente la propagación de la polarización a lo largo de \mathcal{S} . Esto quiere decir que la idea de “dinámica de un cuerpo” que hemos discutido para la cadena XY es válida incluso cuando la cadena no está completamente aislada. En efecto, esta robustez de las interferencias mencionadas permitió su observación experimental [MBSH⁺97, PUL96, KF99]. En nuestro caso, la presencia de \mathcal{E} , ocasionará una progresiva atenuación de los MEs, lo cual provee una forma de cuantificar la decoherencia inducida por el ambiente en términos de la FGR [ADLP10].

Consideremos ahora el caso particular en el que \mathcal{E} se corresponde con una cadena que permanece estática en una configuración aleatoria y que $\hat{V}_{\mathcal{S}\mathcal{E}}$ se restringe a una interacción del tipo Ising. Bajo estas hipótesis, el sistema de espines que se presenta en la Sec. 3.3 aún se reduce a la dinámica de una partícula no-interactuante (física de un cuerpo), es decir, Ecs. (3.20) y (3.21). En consecuencia, $\hat{\Sigma}$ se convierte en un operador *self-energy* $\hat{\Sigma}_{\mathcal{S}}$ actuando en el espacio de Hilbert de \mathcal{S} . De hecho, $\hat{\Sigma}_{\mathcal{S}}$ representa un conjunto de campos locales aleatorios (cuyo signo no se puede invertir), y que se originan en la interacción Ising con los espines estáticos de \mathcal{E} . En términos de partícula no-interactuante, $\hat{\Sigma}_{\mathcal{S}}$ provee de un “potencial desordenado binario” (para cada configuración específica del ambiente) que es una variante del problema de Anderson [And78]. Esta analogía anticipa el caso que será tratado en el Capítulo 5.

El mismo procedimiento que nos permitió reducir la Ec. (2.1) a la Ec. (2.12), transforma la Ec. (3.5) en el LE de una partícula:

$$M_{1,1}(2t_R) = \left| \langle \Psi_1 | \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(-\hat{H}_{\mathcal{S}} + \hat{\Sigma}_{\mathcal{S}})t_R\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_{\mathcal{S}} + \hat{\Sigma}_{\mathcal{S}})t_R\right\} | \Psi_1 \rangle \right|^2. \quad (3.25)$$

Aquí, podemos reconocer la definición usual del LE, introducida en la Ref. [JP01], como el *overlap* de dos funciones de onda evolucionando en presencia de un desorden estático.

La separación del conjunto de espines entre un subconjunto controlable (\mathcal{S}) y uno no controlable (\mathcal{E}) tiene un espíritu similar a la discusión de la fidelidad parcial, llamada eco de Boltzmann, analizado en Ref. [PJ06] para un problema de dos cuerpos. En analogía,

nuestro problema de espines también verifica: (i) la separación entre dos sistemas que interactúan entre sí (\mathcal{S} y \mathcal{E}), (ii) el estado inicial en \mathcal{S} está bien determinado como una polarización inyectada localmente, Ec. (3.1), y al final se realiza una medición local en el mismo sitio de la inyección inicial, (iii) el subsistema \mathcal{E} permanece en el equilibrio térmico de alta temperatura, y (iv) el Hamiltoniano de \mathcal{S} puede ser revertido (cambiarle el signo), mientras que el de \mathcal{E} y el de la interacción \mathcal{SE} no pueden controlarse de esa forma. En contraposición, la Ref. [PJ06] considera un sistema *caótico* de un cuerpo acoplado a otro sistema *caótico* de un cuerpo. Nuestro caso, en cambio, tanto \mathcal{S} como \mathcal{E} (aislados) se corresponden ambos con sistemas integrables de muchos cuerpos y que se reducen a sistemas de un cuerpo vía JWT.

3.4.2. La descripción FGR

Introducimos ahora los regímenes de decaimiento del LE, siguiendo la discusión del Capítulo 2 y la literatura del LE [JP01, JSB01, CLM⁺02, GJPW12]. La idea subyacente aquí es que al incluir una débil interacción $\hat{V}_{\mathcal{SE}}$, la propagación de la excitación (polarización) a lo largo de \mathcal{S} se degradará suavemente hasta alcanzar un estado estacionario (al menos en lo que refiere al observable polarización local). De esa manera, el LE decaería monótonamente, tal como la SP en la Ec. (2.23) decaía por presencia de un ambiente. Por supuesto que esta imagen pictórica requiere de cadenas largas como para disponer de un espectro suficientemente denso.

El decaimiento a tiempos cortos es, naturalmente, cuadrático:

$$\begin{aligned} M_{1,1}(t) &= 2 \langle \Psi_{neq} | \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}_{LE}(t) | \Psi_{neq} \rangle \\ &= 1 - \langle \Psi_{neq} | \left[\hat{\Sigma}^2 - 2\hat{\Sigma} \hat{S}_1^z \hat{\Sigma} \right] | \Psi_{neq} \rangle (t/\hbar)^2 + \mathcal{O}\left((t/\hbar)^3\right) \end{aligned} \quad (3.26)$$

Aquí, el prefactor $\sigma^2 = \langle \Psi_{neq} | \left[\hat{\Sigma}^2 - 2\hat{\Sigma} \hat{S}_1^z \hat{\Sigma} \right] | \Psi_{neq} \rangle$ define el segundo momento local de $\hat{\Sigma}$. Cuando $[\hat{\Sigma}, \hat{S}_1^z] = 0$, se verifica que:

$$M_{1,1}(t) = 1 - \frac{1}{16} \langle \Psi_{neq} | \left(\left[\hat{\Sigma}, \hat{H}_0 \right] \hat{S}_1^z \left[\hat{\Sigma}, \hat{H}_0 \right] - \left[\hat{\Sigma}, \hat{H}_0 \right]^2 \right) | \Psi_{neq} \rangle (t/\hbar)^4 + \mathcal{O}\left((t/\hbar)^5\right) \quad (3.27)$$

En la mayoría de los casos, el decaimiento a tiempos cortos se continúa en un régimen de tipo exponencial descrito por la FGR. Tal como en la Ec. (2.22), la predicción FGR

3. EL ECO DE LOSCHMIDT EN SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS

de la tasa característica de decaimiento viene dada por

$$\frac{1}{\tau_\phi} = \frac{2\Gamma_\phi}{\hbar} \simeq \sum_\delta \frac{2\pi}{\hbar} |V_{S\mathcal{E}}^\delta|^2 N_{1\delta}, \quad (3.28)$$

donde $|V_{S\mathcal{E}}^\delta|^2 \equiv \sigma^2$ es el segundo momento local del proceso δ (Ising o XY) que contribuye a la interacción $S\mathcal{E}$, y $N_{1\delta}$ representa alguna DDCS apropiada. Conviene mencionar aquí que la DDCS determina el tiempo de transición entre el decaimiento cuadrático (tiempos cortos) y el régimen exponencial [FI01b, RFP06b]. En efecto, tal transición se espera que ocurra en un tiempo llamado *spreading time* (“tiempo de desparramo”) $t_s \simeq (\tau_\phi \sigma^2)^{-1} = \hbar\pi N_1$. Para sistemas fuertemente interactuantes, una fórmula interpolante entre ambos regímenes ha sido propuesta [FI01b],

$$P_{11}(t) \sim \exp \left[2\frac{\Gamma^2}{\sigma^2} - 2\sqrt{\frac{\Gamma^4}{\sigma^4} - \Gamma^2 t^2 / \hbar^2} \right], \quad (3.29)$$

y que no ha sido analizada en sistemas concretos.

3.5. La evaluación numérica del LE

En esta sección presentamos el cálculo numérico de $M_{1,1}(t)$ para los modelos que se muestran en la Fig. 3.2. Si bien nuestro principal interés radica en el decaimiento exponencial y la FGR, podemos identificar también el decaimiento cuadrático inicial y un régimen de saturación a tiempos muy largos, ver Fig. 3.3. Es apreciable que el LE evidencia una dependencia temporal no trivial para un amplio rango de interacciones $S\mathcal{E}$ posibles. Esta observación contrasta con el estudio de la degradación de interferencias vía el ME [ADLP10], cuya mera observación restringe la cuantificación de decoherencia.

En la Fig. 3.4(a) la dinámica a tiempos cortos se compara con el decaimiento cuadrático esperado de la Ec. (3.26). De hecho, el gráfico de $(1 - M_{1,1})/J_{S\mathcal{E}}^2$ como función del tiempo, muestra que la Ec. (3.26) toma la forma de:

$$M_{1,1}(t) \simeq 1 - \left(\frac{J_{S\mathcal{E}}}{2\hbar} \right)^2 t^2, \quad (3.30)$$

donde el segundo momento de la interacción $S\mathcal{E}$ es $\sigma^2 = (J_{S\mathcal{E}}/2)^2$. Este comportamiento se verifica hasta el tiempo $t_s \simeq \hbar/J_{S\mathcal{E}}$, lo cual es consistente con la predicción para t_s en términos de la escala dinámica típica de \mathcal{E} . Para comparar, mostramos en la Fig. 3.4(b) la SP de una excitación en un sistema S de un único espín que interactúa

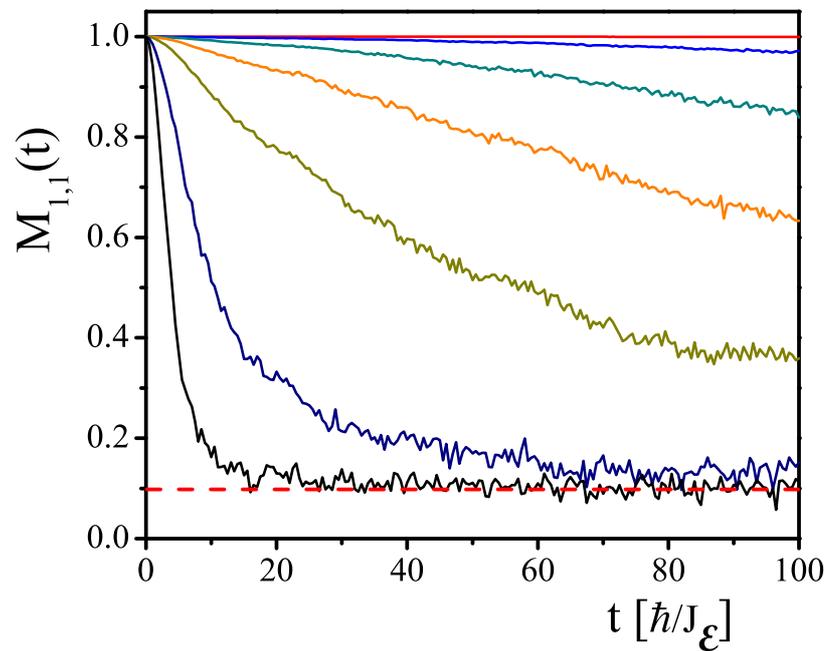


Figura 3.3: El LE local $M_{1,1}(t)$ como función del tiempo de evolución total $t = 2t_R$. Los resultados numéricos que se muestran se corresponden a un anillo de 5 espines débilmente acoplados a otro anillo idéntico vía interacciones intercadena de tipo XY ($\alpha = 0$). Mientras mayor sea la constante de acoplamiento intercadena J_{SE} , más rápido se alcanzará el régimen de saturación. De arriba a abajo, las diferentes curvas corresponden a J_{SE} : 0.001, 0.01, 0.025, 0.05, 0.1, 0.25 y 0.5, en unidades de J_E .

3. EL ECO DE LOSCHMIDT EN SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS

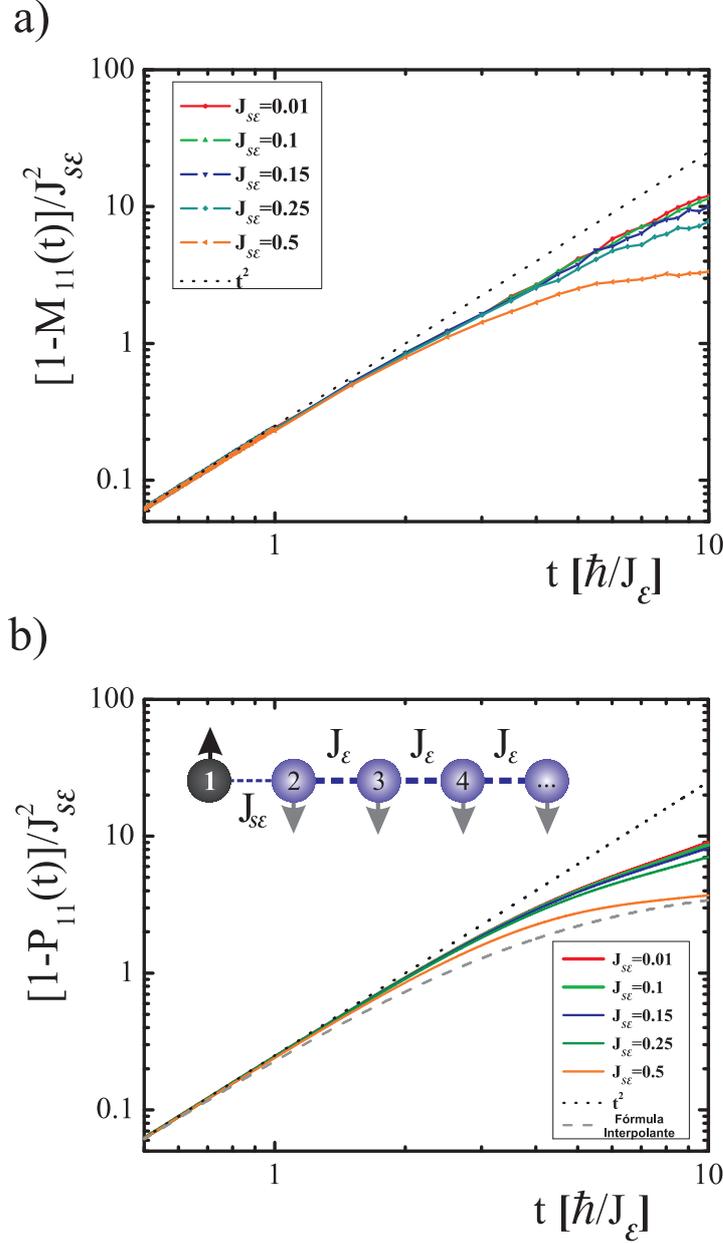


Figura 3.4: (a) Comportamiento a tiempos cortos de $M_{1,1}(t)$. La línea de puntos es el decaimiento cuadrático dado por la Ec. (3.30). (b) Dinámica a tiempos cortos de la SP $P_{1,1}(t)$ correspondiente a una cadena XY descrita con el modelo *tight-binding*: $\hat{H} = \frac{J_{SE}}{2} (\hat{c}_0^+ \hat{c}_1 + \hat{c}_1^+ \hat{c}_0) + \frac{J_\epsilon}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (\hat{c}_n^+ \hat{c}_{n+1} + \hat{c}_{n+1}^+ \hat{c}_n)$. Este modelo es un ejemplo paradigmático de la FGR [RF09, Den12]. Notar la similitud entre (a) y (b) en lo que refiere a la separación del decaimiento cuadrático, es decir, el *spreading time* t_s . La línea a trazos muestra un dibujo de la Ec. (3.29) para $J_{SE} = 0.5J_\epsilon$.

con el borde de una cadena \mathcal{E} . En ese modelo simple, que se muestra en el inset, todas las interacciones son de tipo XY . Además, este modelo constituye un ejemplo paradigmático de decaimiento tipo FGR, dado que la DDCS está muy bien definida como $N_1 = 1/J_{\mathcal{E}}$ y es independiente de $J_{\mathcal{S}\mathcal{E}}$ [RF09]. En la Fig. 3.4(b), mostramos con una línea a trazos la fórmula interpolante dada en la Ec. (3.29), para el acoplamiento más fuerte. Esta expresión se desvía más rápido del decaimiento cuadrático que la SP de la cadena *tight binding*.

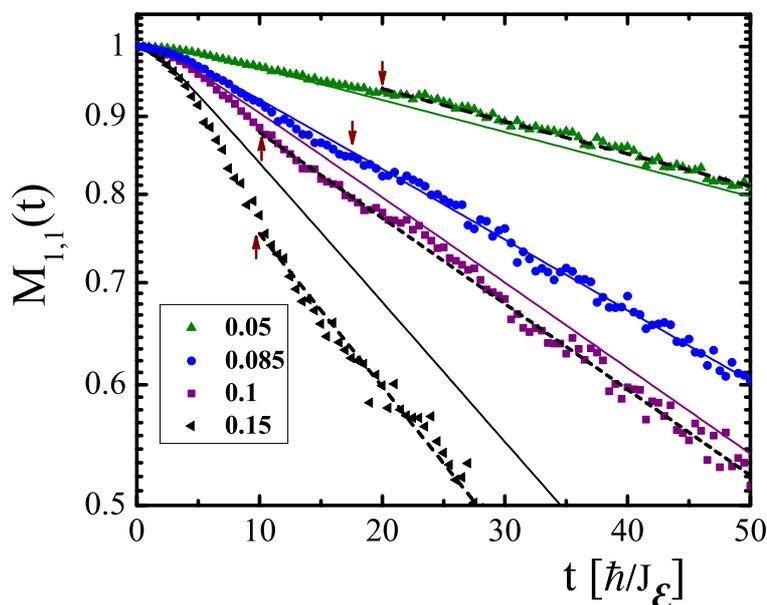


Figura 3.5: Transición del decaimiento cuadrático a tiempos cortos al inicio del régimen exponencial. Las líneas a trazos corresponden a los decaimientos exponenciales dados por los ajustes, mostrados aquí para valores representativos. La demora en la aparición del régimen exponencial se indica con flechas apuntando el primer punto utilizado en el ajuste. Las líneas continuas representan la fórmula interpolante, es decir Ec. (3.29), evaluada con σ^2 y Γ apropiados.

La entrada al régimen exponencial se muestra en la Fig. 3.5, para algunos valores de una interacción $\mathcal{S}\mathcal{E}$ del tipo XY . Como tendencia general, observamos que el decaimiento exponencial queda bien definido luego de un tiempo de evolución mayor al que se corresponde con el fin del régimen cuadrático. Indicamos con flechas los datos iniciales con los que se ajustan los decaimientos. Para comparar, la SP correspondiente a la fórmula interpolante, Ec. (3.29), se grafica para los mismos escalas de tiempo.

3. EL ECO DE LOSCHMIDT EN SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS

Se aprecia que para $J_{\mathcal{SE}}/J_{\mathcal{E}} \lesssim 0.085$ la interpolación cae por debajo de los resultados numéricos, y los tiempos requeridos para definir bien la exponencial son mayores.

Para tiempos suficientemente largos, el LE satura en un *plateau* tal como se observa en la Fig. 3.3. Esto resulta consistente con la idea que, en este arreglo finito de espines interactuantes, la polarización se comporta ergódicamente respecto a la dinámica del LE y por ello termina distribuyéndose uniformemente. De hecho, a tiempos largos cada sitio está polarizado en $1/(2N)$, siendo $2N$ el número total de espines (1/10 para el caso particular que se grafica).

Para cuantificar sistemáticamente el régimen exponencial, graficamos las escalas características de tal régimen $1/\tau_{\phi}$ en la Fig. 3.6(a), como función de $J_{\mathcal{SE}}^2$ en unidades de $J_{\mathcal{E}}/\hbar$. Esta última cantidad es la apropiada para verificar la validez de la FGR (Ec. (3.28)), ya que $J_{\mathcal{SE}}^2$ es la escala típica para el segundo momento de la interacción \mathcal{SE} y $1/J_{\mathcal{E}}$ la escala típica de N_1 (la DDCS). A pesar que consideramos varias elecciones para la anisotropía α de la interacción \mathcal{SE} , mostramos sólo los casos relevantes para los experimentos de NMR: XY ($\alpha = 0$), Heisenberg ($\alpha = -\frac{1}{2}$), y dipolar truncado ($\alpha = 1$). Observamos también que las condiciones de borde juegan un papel no trivial [DPL04]. Para el caso de condiciones de borde abiertas (Fig. 3.2(a)), aparecen oscilaciones montadas sobre el decaimiento, que dependen de la paridad de N (recordar que aquí N es el número de espines en cada cadena). Presentamos los resultados sólo para condiciones de borde periódicas (anillos), donde tales efectos son casi despreciables.

En contraste con el estudio basado en la degradación de ME [ADLP10], puede apreciarse que el LE permite un acceso “continuo” a un amplio rango de perturbaciones (incluso muy débiles), y se puede obtener con relativa facilidad el tiempo τ_{ϕ} que cuantifica la escala de tiempo de la decoherencia. Se observa en la Fig. 3.6(a) que la tasa característica (inverso del tiempo τ_{ϕ}) comienza desde cero y aumenta con la magnitud de la perturbación, $J_{\mathcal{SE}}$. Luego de cierto umbral, se observa una dependencia lineal en el segundo momento de la perturbación. Esto termina por confirmar la Ec. (3.28) para ese rango de perturbaciones. El ajuste lineal está corrido por un pequeño *offset*, $1/\tau_0$, que parece depender de la naturaleza de la interacción \mathcal{SE} , ya que aumenta para perturbaciones con mayor α (mayor componente Ising).

La Figura 3.6(b) muestra la contribución FGR a las tasas de decoherencia ($1/\tau_{\phi} - 1/\tau_0$, en unidades de $J_{\mathcal{SE}}^2/\hbar J_{\mathcal{E}}$) como función del cuadrado de la anisotropía, α^2 . También incluimos las tasas obtenidas con la atenuación de los ME [ADLP10]. De las

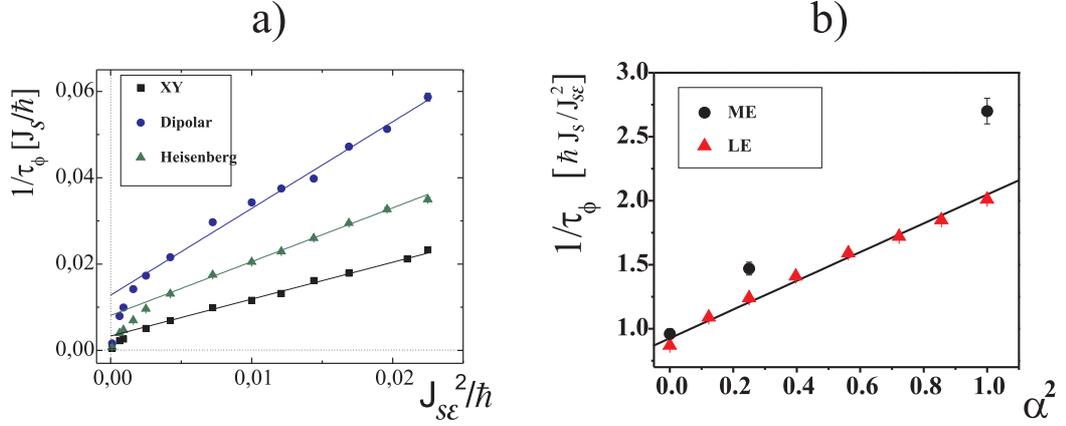


Figura 3.6: **a)** Tasas de decaimiento para acoples intercadena dados por las tres interacciones típicas en NMR, en unidades de $J_{\mathcal{E}}/\hbar$. Las pendientes y ordenadas dependen del valor de α , es decir, en el peso relativo entre la contribución Ising (desfase puro) y la XY (transferencia de polarización). **b)** La aditividad de las contribuciones Ising y XY a la tasa total FGR se verifica en el gráfico de su suma como función de α^2 , en unidades de $\hbar J_{\mathcal{E}}/J_{\mathcal{SE}}^2$, cubriendo el rango de interés físico. Con la finalidad de comparar, se muestran también las tasas características de decaimiento obtenidas por degradación de ME (Ref. [ADLP10]).

pendientes en tal gráfico derivamos las contribuciones a la tasa global $1/\tau_\phi$, correspondientes a cada proceso (XY e Ising) en la interacción \mathcal{SE} :

$$\frac{1}{\tau_\phi} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_\phi^{XY}} + \frac{1}{\tau_\phi^{ZZ}}. \quad (3.31)$$

Para el LE resulta:

$$\frac{1}{\tau_\phi^{XY}} = (0.92 \pm 0.04) \frac{J_{\mathcal{SE}}^2}{\hbar J_{\mathcal{E}}}, \quad (3.32)$$

$$\frac{1}{\tau_\phi^{ZZ}} = (1.12 \pm 0.04) \alpha^2 \frac{J_{\mathcal{SE}}^2}{\hbar J_{\mathcal{E}}}. \quad (3.33)$$

Y de acuerdo con los resultados reportados en la Ref. [ADLP10], traduciendo su notación $-a/b \equiv 2\alpha$, las tasas que contribuyen a la degradación de los ME son:

$$\frac{1}{\tau_\phi^{XY}} = (1.00 \pm 0.06) \frac{J_{\mathcal{SE}}^2}{\hbar J_{\mathcal{E}}}, \quad (3.34)$$

$$\frac{1}{\tau_\phi^{ZZ}} = (2.0 \pm 0.3) \alpha^2 \frac{J_{\mathcal{SE}}^2}{\hbar J_{\mathcal{E}}}. \quad (3.35)$$

3. EL ECO DE LOSCHMIDT EN SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS

El aspecto más relevante que se desprende de la comparación es que mientras la contribución XY es esencialmente la misma para ambas estrategias, la contribución Ising para el ME (Ec. (3.35)) es casi el doble que la obtenida para el LE. En la próxima sección intentaremos explicar el origen de tal diferencia.

3.6. Análisis del decaimiento del LE

La evaluación numérica del LE realizada nos permite verificar las expectativas discutidas en la Sección 3.4. En particular, corroboramos que el decaimiento a tiempos cortos está naturalmente regido por el segundo momento de la interacción \mathcal{SE} , es decir $\sigma^2 = [J_{\mathcal{SE}}/2]^2$. También verificamos la estimación para el *spreading time* $t_s \simeq \hbar/J_{\mathcal{E}}$, es decir la transición desde el decaimiento cuadrático al exponencial. Encontramos que tal estimación se corresponde con el final del régimen cuadrático, pues se observa que la entrada al régimen exponencial ocurre a un tiempo mayor que t_s . Esto indicaría que la DDCS no se encuentra “inmediatamente definida” y que requiere del acople intercadena $J_{\mathcal{SE}}$ para definirse. De hecho, se requiere de la existencia de $J_{\mathcal{SE}}$ para romper la fuerte degeneración presente en \mathcal{E} aislado, que es una cadena XY finita (integrable). Sólo cuando esas degeneraciones se rompen, es de esperar la presencia un espectro suficientemente denso (requisito para la FGR). En ese caso, cada cadena de N se corresponde con 2^N niveles de energía, de los cuales $\binom{N}{N/2}$ pueden acoplarse vía una interacción que conserva proyección de espín en la dirección z .

La fórmula interpolante dada por la Ec. (3.29) aproxima satisfactoriamente el decaimiento cuadrático, pero no es tan precisa para tiempos intermedios y obviamente no puede reproducir la saturación a tiempos largos. Estas desviaciones pueden atribuirse fácilmente a la falla de nuestra analogía de la dinámica LE con una dinámica SP. La física subyacente en la Ec. (3.29) está basada en la premisa de un número N suficientemente grande y una DDCS bien definida. Además, en nuestro caso tratamos un sistema finito (y relativamente pequeño), por lo que la polarización no puede equilibrar en cero. De hecho, la polarización asintótica observada, $1/(2N)$, puede identificarse con un comportamiento ergódico para la dinámica LE. Dado que tal propiedad no está presente en el sistema aislado, aparecería como consecuencia de la interacción \mathcal{SE} . Esta observación será discutida en detalle en los capítulos siguientes.

Tanto las tasas características obtenidas como el segundo momento σ^2 , no dependen explícitamente del número total de espines ni del número de espines en \mathcal{S} . La razón de tal independencia en el número de espines está vinculada a la condición inicial de no-equilibrio (Ec. (3.1)) y la posterior medición local. De hecho, la excitación inicial mantiene su carácter de “partícula” al propagarse en la cadena XY (puede asimilarse a una dinámica clásica). Esta imagen pictórica permanece válida incluso hasta la escala de tiempo en la que el LE decae exponencialmente. Asimismo, hemos verificado que la independencia en el número de espines se rompe al considerar estados iniciales que son superposiciones específicas (no locales). Estos casos están fuera del alcance de este capítulo y serán estudiados en el Capítulo 6.

Podría decirse que dividir en dos las contribuciones FGR a la tasa de decoherencia parece ser una premisa bastante fuerte. Sin embargo, esta estrategia ya fue utilizada anteriormente, por ejemplo en las Refs. [ADLP10] y [DRBM⁺12]. Cada contribución está asociada a un término diferente en el acople intercadena $\hat{V}_{\mathcal{SE}}$, y representa dos procesos físicos distintos (XY e Ising). Tal como se discutió en el capítulo anterior, cada proceso debe tener su correspondiente DDCS. En efecto, la dependencia lineal que se observa al graficar $1/\tau_\phi - 1/\tau_0$ como función de α^2 (Fig. 3.6) evidencia la validez de la separación en contribuciones.

Comparemos ahora los tiempos característicos obtenidos con aquellos que se corresponden a la degradación del ME [ADLP10]. Por un lado, las contribuciones de procesos XY para ME y LE son casi las mismas. Tal equivalencia es interpretada en términos de la asociación entre polarización y dinámica de una partícula, ya sea en \mathcal{S} o en \mathcal{E} . Aun cuando esta imagen de partícula no es válida en presencia de la interacción $\hat{V}_{\mathcal{SE}}$, la dinámica no puede ser radicalmente diferente (sobre todo porque el acoplamiento es débil). La propagación de la polarización a lo largo de una cadena se verá sólo débilmente afectada por efecto túnel a la otra. En términos de partícula, la energía cinética a lo largo de las cadenas conmuta con aquella intercadena. Por lo tanto, la tasa $1/\tau_\phi^{XY}$ debería coincidir con la tasa de transferencia polarización, independientemente de la reversión temporal realizada en \mathcal{S} .

En contraste al “simple” decaimiento asociado a los procesos XY en la interacción \mathcal{SE} , la contribución Ising produce fluctuaciones de energía que inducirían a aumentar la difusión en \mathcal{S} . En ese caso, las recurrencias dinámicas (los ME) se borrarían más fácilmente. La tasa observada para el decaimiento del LE resulta ser menor, y esto indicaría

3. EL ECO DE LOSCHMIDT EN SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS

que la reversión en \mathcal{S} es parcialmente eficaz en filtrar esas fluctuaciones. De hecho, las tasas de decaimiento (contribución Ising) para el LE son aproximadamente la mitad de las que se reportan para los ME [ADLP10]. Esto podría significar que el ME sobreestima la degradación de fase inducida por el ambiente. Podemos entender la física del proceso usando la analogía con un paquete de ondas que evoluciona en presencia de un potencial desordenado (el problema de Anderson). Para tal analogía, necesitaríamos que la segunda cadena no tenga dinámica, es decir, permanezca congelada en alguna configuración específica. Luego, el desorden inducido por la cadena \mathcal{E} provocaría difusión, que a su vez dificultaría la aparición de ME. Tal proceso se consideraría decoherencia. Ahora bien, la reversión temporal de la propagación (XY) interna en \mathcal{S} no revierte el desorden. Sin embargo, si consideramos que el ambiente ahora *sí* tiene dinámica y que su escala de tiempo es comparable a la del sistema ($J_{\mathcal{S}} \simeq J_{\mathcal{E}}$), entonces existen fluctuaciones particulares que permiten una reversión perfecta en la dinámica del sistema. Esto ocurre cuando no solamente la energía cinética de la partícula se revierte, sino también el término de potencial local. Esas fluctuaciones específicas en \mathcal{E} - son las que se requieren para deshacer los corrimientos de fase producidos durante la evolución hacia delante. Este argumento está fuertemente ligado a la imagen de partícula libre propagándose y a la conmensuración de escalas de tiempo entre \mathcal{S} y \mathcal{E} . Ver Fig. 3.7. En presencia de un ambiente fluctuante, el LE puede reconstruir fases al menos una fracción de las posibles configuraciones locales.

3.7. Conclusiones

En este capítulo introdujimos la formulación del LE, definido como una función de autocorrelación local de espín. Esta magnitud es exactamente la evaluada experimentalmente [LUP98, UPL98, PLU⁺00], es decir, la polarización local que se detecta luego de un procedimiento de reversión temporal.

Utilizamos el LE como cuantificador de decoherencia en un sistema cuántico específico. En particular, consideramos dos cadenas de espines acopladas, donde una de ellas es el sistema en cuestión, y la otra hace las veces de un ambiente estructurado. El acople sistema-ambiente incluye una interacción del tipo XY con un término Ising cuyo peso varía entre 0 y 2 (Hamiltoniano dipolar truncado). La atenuación del LE provee

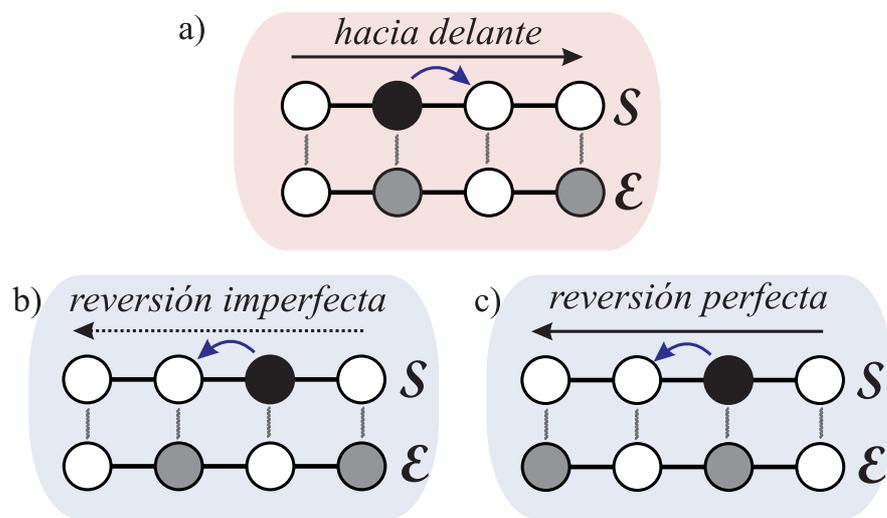


Figura 3.7: La interacción intercadena Ising en analogía con una partícula propagándose en un potencial binario desordenado. Un círculo relleno significa un espín *up* o un fermión, y un círculo vacío representa un espín *down* o hueco. Todos los procesos se consideran a una escala de tiempo muy corta, básicamente dada por un único paso Trotter. **a)** Dinámica hacia delante en \mathcal{S} , en presencia de “energías de sitio aleatorias”. **b)** La evolución hacia atrás en \mathcal{S} es imperfecta pues el ambiente \mathcal{E} permanece estático y las “energías de sitio” no se invierten. **c)** Una evolución particular en \mathcal{E} permite la reversión perfecta para la dinámica en \mathcal{S} . Aquí, todas las “energías de sitio” alrededor de la excitación están revertidas respecto a la evolución hacia delante.

3. EL ECO DE LOSCHMIDT EN SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS

una estimación directa de la tasa de decoherencia, sin la necesidad de asumir hipótesis *ad-hoc* como funciones espectrales [CL84, Wei08] u operadores de ruido estocástico [BBC+94, MNP+99].

La tasa de decoherencia obtenida se separa en dos contribuciones, siendo ambas proporcionales a $J_{\mathcal{SE}}^2$ y $1/J_{\mathcal{E}}$, tal como se espera para la FGR. No hay dependencia en el número N de espines. Este hecho se relaciona con la condición inicial y la naturaleza local del observable, algo que no sucedería para un estado inicial arbitrario. También es indicativo de una regla de suma específica entre el segundo momento local de la interacción y la DDCS, que termina por coincidir con lo esperable para un problema de una partícula.

Para el modelo estudiado, utilizamos la similitud entre el LE y la SP para probar una fórmula interpolante propuesta en el contexto de sistemas fuertemente interactuantes. Tal expresión intenta dar una descripción unificada del decaimiento cuadrático a tiempos cortos y el posterior régimen exponencial. A pesar que reproduce cualitativamente bien los resultados numéricos, el LE evidencia sutilezas y un comportamiento más complejo que esa predicción. Por ejemplo, la ruptura de las degeneraciones propias de la dinámica integrable (una partícula) debido a la interacción \mathcal{SE} y la aparición de un comportamiento ergódico que se manifiesta como una distribución uniforme o saturación asintótica, están presentes en la dinámica del LE.

El estudio numérico del LE aquí presentado indica que es un buen cuantificador de decoherencia en comparación con el análisis estándar basado en la degradación de interferencias, dado que puede recuperar información que antes no se consideraba. Además, filtrando la dinámica intrínseca del sistema vía la reversión temporal, el LE se deshace de la dinámica trivial (aquella asociada a \mathcal{S}) y da cuenta genuinamente de los efectos de la decoherencia. De esta forma, el LE proporciona un acceso *continuo* a los procesos de decoherencia inducidos por un ambiente.

Las contribuciones originales en este Capítulo se publicaron en:

“*Loschmidt echo as a robust decoherence quantifier for many-body systems*”, Pablo R. Zangara, Axel D. Dente, Patricia R. Levstein, and Horacio M. Pastawski, [Phys. Rev A](#) **86**, 012322 (2012).

Capítulo 4

Fluctuaciones temporales luego de la equilibración

En este capítulo discutiremos aspectos generales de la dinámica y equilibración de observables de pocos cuerpos en sistemas cuánticos cerrados. En particular, investigaremos las fluctuaciones alrededor de los valores estacionarios que se observan luego que los observables hayan “equilibrado”.

4.1. Equilibración en observables de pocos cuerpos

En el capítulo 3 mostramos que la función de autocorrelación $M_{1,1}(t)$ permanece muy cerca del valor $1/N$ luego de suficiente tiempo (cuando el “decaimiento” en sí mismo ha culminado). Esto evidencia que la polarización se distribuyó homogéneamente en el sistema de espines. En tal caso, la polarización constituye un ejemplo de observable que alcanza un valor estacionario, cercano a una constante (en algún sentido, asintóticamente). En general, diremos que un observable *equilibra* si su valor de expectación permanece cercano a un valor constante para *casi todo* el tiempo [LPSW09, GME11]. Aquí, el término “casi todo” significa que la equilibración en sistemas aislados ocurre en un sentido probabilístico. Más precisamente, se requiere que (i) las fluctuaciones temporales de un observable, luego que los comportamientos transitorios hayan desaparecido, sean muy pequeñas, implicando *proximidad* a un valor estático para la basta mayoría de los tiempos, y que (ii) las fluctuaciones temporales disminuyan con el tamaño del sistema, anulándose en el límite termodinámico (TL). Eventualmente, las fluctuaciones

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

temporales darán lugar a la aparición de recurrencias específicas propias de toda evolución unitaria. Sin embargo, para los sistemas interactuantes que consideraremos aquí, estos eventos excepcionales tienen asociados tiempos de Heisenberg extraordinariamente largos. En particular, tales tiempos están mucho más allá del alcance de nuestras simulaciones numéricas, dados los errores acumulativos inherentes al método empleado (ver Sec. 4.2.3 y Apéndice A).

Sobre la base de argumentos semiclásicos y sistemas completamente caóticos [FP86, Deu91, Pro94, Sre, Sre96b, Sre96a], se ha mostrado que la amplitud cuadrada media de las fluctuaciones temporales luego del decaimiento transitorio disminuye exponencialmente con el tamaño del sistema. Este resultado es independiente de los detalles del estado inicial, que se asume como un estado puro arbitrario [Sre96b, Sre96a]. Sin embargo, el uso subyacente de una teoría de matrices aleatorias estaría sobresimplificando lo que realmente ocurre con sistemas físicos concretos (experimentales). Estos sistemas, típicamente tienen interacciones de dos cuerpos y de corto alcance, mientras que las matrices aleatorias conllevan interacciones de muchos cuerpos (incluso más que dos) y de largo alcance [BFF⁺81, ZBFH96, Kot01]. En los sistemas reales, la densidad de estados (DoS) es Gaussiana [BFF⁺81], y sólo en el centro del espectro encontramos autoestados “caóticos”, donde las amplitudes de probabilidad de los vectores base son muchas, pequeñas y descorrelacionadas. Estudios recientes acerca de las cotas para las fluctuaciones temporales prescinden del uso de matrices aleatorias, y en cambio se basan en Hamiltonianos que no tengan demasiadas degeneraciones en cuanto a autovalores y *gaps* de energía. Además, se consideran estados iniciales que son superposición de un gran número de autoestados de energía [Rei08, Sho11, SF12, Rei12]. En estos últimos casos, las fluctuaciones nuevamente verifican una ley de escala exponencial con el tamaño del sistema. Por otro lado, en el caso particular de un Hamiltoniano integrable que sea cuadrático en los operadores fermiónicos canónicos (o mapeable a uno, como en el caso del Hamiltoniano XY) donde la condición de no-resonancia no se cumple (es decir, hay muchos *gaps* degenerados), se mostró analíticamente [VZ13] y numéricamente [CCR11, GR12, HSWR13] que las fluctuaciones temporales de un observable de “un cuerpo” disminuyen como $1/\sqrt{N}$, siendo N el tamaño del sistema.

Los antecedentes mencionados motivan las siguientes preguntas: ¿cómo dependen las fluctuaciones temporales en función de N cuando se rompe la integrabilidad ¹?

¹Ver Sec. 2.3.1.

4.1 Equilibración en observables de pocos cuerpos

¿qué sucede con sistemas caóticos en los que la energía del estado inicial está lejos del centro espectral? Exploraremos éstas y otras interrogantes relacionadas utilizando sistemas 1D tanto integrables (el Hamiltoniano XY) como no-integrables. Nuestros resultados aquí implican, como regla general, una ley de escala exponencial con el tamaño del sistema para todos los casos no-integrables. No obstante, la respuesta precisa a tales preguntas depende de la relación particular entre cada estado inicial y cada Hamiltoniano. Para estados iniciales cercanos al borde del espectro y, además, no muy deslocalizados en representación de energía, el coeficiente de atenuación exponencial es muy pequeño. Aún en tales casos, el ajuste exponencial se muestra ser más apropiado que una ley de potencias. Sólo en el caso de un modelo integrable (no-interactuante) como el Hamiltoniano XY , el ajuste tipo ley de potencias es mejor, siempre que el estado inicial no se comporte ya de entrada “térmicamente”.

Para evaluar el nivel de deslocalización (en energía) del estado inicial, utilizaremos la noción de *energy shell*, una idea bien establecida en la literatura de caos en sistemas de muchos cuerpos [CCGI93, CCGI96]. En este campo, comúnmente se separa el Hamiltoniano total del sistema en un parte no-perturbada, que describe partículas no interactuantes (o cuasipartículas) y una perturbación, que representa las interacciones inter-(cuasi)partículas y es capaz de llevar al sistema a un régimen caótico. La representación matricial del Hamiltoniano se escribe entonces en la base correspondiente a los vectores “no perturbados” (es decir, la base computacional Ising). En este contexto, la LDoS se define como la distribución en energía de las componentes C_α^j de los vectores base¹ $|j\rangle = \sum_\alpha C_\alpha^j |\alpha\rangle$, siendo $|\alpha\rangle$ los autoestados del Hamiltoniano total [FI00]. La llamada *energy shell* es la LDoS maximal, obtenida en el límite de interacciones muy fuertes. Tiene un forma Gaussiana y su rol es dual: por un lado determina el desparramo máximo posible de un estado no-perturbado particular, y por otro lado determina nivel máximo posible de deslocalización de los autoestados en la base computacional. Para sistemas reales, con interacciones de pocos cuerpos y alcance finito, los estados se deslocalizan cada vez más a medida que la perturbación aumenta, pero nunca alcanzan a estar completamente extendidos como en el caso de matrices aleatorias. Entonces se dice que alcanzan un régimen caótico cuando la LDoS cubre la *energy shell* ergódicamente de

¹Notese que la notación en este capítulo difiere a la del resto de la Tesis. Aquí, los vectores de la base computacional Ising se denotan con $\{|i\rangle\}$ en lugar de $\{|\beta_i\rangle\}$ tal como se introdujo en la Sec. 3.2. La notación con caracteres griegos $\{|\alpha\rangle\}$ se reserva aquí para autoestados específicos de un Hamiltoniano.

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

modo tal que las componentes del estado (en la base no perturbada) pueden verse como variables aleatorias de distribución Gaussiana [CCGI93, CCGI96, SBI12a, SBI12b].

En este capítulo consideraremos como estados iniciales a vectores específicos de la base computacional en la que escribimos el Hamiltoniano total. El ancho de la distribución en energía del estado inicial corresponde al ancho de la Gaussiana que representa a la *energy shell*. La vida media del estado dependerá de cuán grande es tal ancho y del llenado de la *energy shell*. Cuando el llenado es parcial (estados próximos al borde del espectro) y su ancho es pequeño en comparación con el ancho de la densidad total de autoestados (DoS), el decaimiento es muy lento. Este escenario se agrava aún más en presencia de Hamiltonianos con simetrías adicionales.

4.2. Los sistemas y las magnitudes estudiadas

Consideramos aquí un arreglo 1D con N espines 1/2 y condiciones de contorno abiertas. El Hamiltoniano contiene acoples a primeros (nn) y eventualmente segundos (nnn) vecinos,

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_{nn} + \lambda \hat{H}_{nnn}, \\ \hat{H}_{nn} &= \sum_{j=1}^{N-1} J \left(\hat{S}_j^x \hat{S}_{j+1}^x + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+1}^y + \Delta \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z \right), \\ \hat{H}_{nnn} &= \sum_{j=1}^{N-2} J \left(\hat{S}_j^x \hat{S}_{j+2}^x + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+2}^y + \Delta \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+2}^z \right).\end{aligned}\tag{4.1}$$

La constante de acoplamiento J determina las unidades de energía, la anisotropía está dada por Δ y λ controla el peso relativo entre nnn y nn . Tal como en los casos ya discutidos, el término de *flip-flop* $\hat{S}_j^x \hat{S}_{j+1}^x + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+1}^y$ ($\hat{S}_j^x \hat{S}_{j+2}^x + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+2}^y$) mueve las excitaciones a través de la cadena y $\hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z$ ($\hat{S}_j^z \hat{S}_{j+2}^z$) corresponde a las interacciones Ising entre espines nn (nnn). Esta familia de Hamiltonianos conserva la proyección de espín total en la dirección z , $[\hat{H}, \hat{S}_T^z] = 0$, donde $\hat{S}_T^z = \sum_{j=1}^N \hat{S}_j^z$. El número cuántico correspondiente que etiqueta cada proyección es $m_z = \frac{N}{2}, (\frac{N}{2} - 1), \dots, -\frac{N}{2}$. Otras simetrías presentes son: paridad, invariancia ante rotaciones globales en π alrededor del eje x cuando $m_z = 0$, y la conservación del espín total $(\hat{S}_T)^2 = (\sum_{j=1}^N \vec{S}_j)^2$ cuando $\Delta = 1$. El modelo es soluble por ansatz de Bethe cuando $\lambda = 0$ [Bet31], y transiciona a un régimen caótico a medida que λ aumenta [GS12, SBI12b].

4.2 Los sistemas y las magnitudes estudiadas

Las propiedades de la cadena unidimensional en la Ec. (4.1) dependen de los valores específicos de los parámetros. En particular, definimos aquí una nomenclatura para casos especiales: cuando $\lambda = 0$, el modelo no-interactuante $\Delta = 0$ recibe el nombre de Hamiltoniano XY . El caso isotrópico $\Delta = 1$ es el Hamiltoniano de Heisenberg. Cuando $|\Delta| > 1$, se abre un *gap* de energía entre las autoenergías más bajas y el estado fundamental, y el sistema se considera en una “fase con *gap*”. El caso $\Delta = 1$ es un punto crítico que separa fases con y sin *gap*. Si Δ disminuye progresivamente de 1 a 0, los estados ligados de cuasipartículas se transforman en excitaciones elementales, hasta que el límite de partículas libres se alcanza ($\Delta = 0$). En ese proceso, un cambio cuantitativo ocurre en el espectro para el punto $\Delta = 1/2$, donde el sistema adquiere simetrías no triviales adicionales [SS07, Tak05].

Investigaremos la dinámica para las siguientes elecciones de parámetros:

- Hamiltoniano no-interactuante XY , $\hat{H}_{\Delta=0,\lambda=0}$.
- Hamiltoniano de Heisenberg o isotrópico nn , $\hat{H}_{\Delta=1,\lambda=0}$.
- Hamiltoniano anisotrópico nn , $\hat{H}_{\Delta=0.5,\lambda=0}$.
- Hamiltoniano débilmente caótico isotrópico, $\hat{H}_{\Delta=1,\lambda=0.4}$.
- Hamiltoniano fuertemente caótico isotrópico, $\hat{H}_{\Delta=1,\lambda=1}$.
- Hamiltoniano fuertemente caótico anisotrópico, $\hat{H}_{\Delta=0.5,\lambda=1}$.

El Hamiltoniano nn con *gap* $\hat{H}_{\Delta=1.5,\lambda=0}$ se discutirá brevemente.

Para cada Hamiltoniano, podemos construir la distribución de autoestados como función del intervalo de energía. Esto constituye la DoS, que en todos los casos tiene una forma Gaussiana, tal como se aprecia en la Fig. 4.1. Este comportamiento es típico de sistema con interacciones de pocos cuerpos y contrasta con las DoS semi-circular que se obtienen para matrices aleatorias. [BF71, Haa91, GMGW98, Rei04]. La forma Gaussiana refleja el número reducido de niveles de energía disponibles en los bordes del espectro. Los estados deslocalizados (en energía), por lo tanto, no se encuentran demasiado lejos del centro espectral, aun cuando el sistema es caótico. Además, se aprecia que las distribuciones no son exactamente simétricas cuando $\Delta \neq 0$. La cola de la distribución tiende a ser más extendida para energías bajas cuando $\lambda = 0$ y Δ aumenta, mientras que se extiende más hacia la derecha cuando $\lambda > \Delta$.

El ancho ω y la energía media $\langle E \rangle$ obtenidos vía ajuste Gaussiano para los Hamiltonianos estudiados se muestran en la Tabla 4.1. La DoS se ensancha con la anisotropía y

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

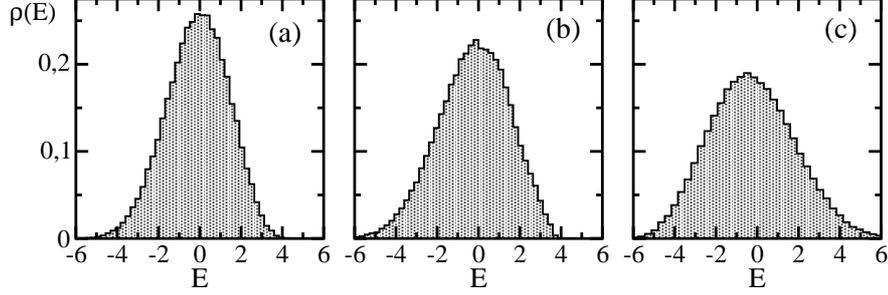


Figura 4.1: DoS, $N = 16$, $m_z = 0$. (a) $\Delta = 0.5, \lambda = 0$; (b) $\Delta = 1, \lambda = 0$; and (c) $\Delta = 0.5, \lambda = 1$.

la inclusión de acoples nnn . Su centro se desplaza del cero a medida que la interacción Ising aumenta.

Tabla 4.1: Ancho y centro del ajuste Gaussiano para las DoS; $L = 16$; $m_z = 0$.

	ω	$\langle E \rangle$
$\hat{H}_{\Delta=0, \lambda=0}$	1.444	0.000
$\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=0}$	1.532	-0.039
$\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$	1.761	-0.119
$\hat{H}_{\Delta=1.5, \lambda=0}$	2.078	-0.234
$\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0.4}$	1.868	-0.368
$\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=1}$	2.399	-0.571
$\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=1}$	2.108	-0.356

4.2.1. Estados iniciales

Tal como en la descomposición en estados puros realizada en la Sec. 3.2, usaremos aquí la base computacional Ising para escribir la matriz Hamiltoniana y los estados iniciales. En particular, el sistema se considera preparado en un estado inicial $|\Psi(0)\rangle \equiv |\text{ini}\rangle$ que se corresponde con uno de los siguientes vectores base:

- Pared de dominio, $|\text{DW}\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \downarrow\downarrow\downarrow\rangle$,
- Estado de Néel, $|\text{NS}\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$,
- Pares de espines paralelos, $|\text{PP}\rangle = |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow \dots\rangle$.

Estos estados son, en principio, accesibles a experimentos en redes ópticas [SBM⁺11]. La preparación de una pared de dominio bien definida requiere un gradiente de campo magnético tal como se reporta en [WMM⁺09], y la posibilidad de generar un estado de Néel se discute en [KDBS08, MHH12]. Además de su potencialidad experimental, estos estados se eligen debido a que manifiestan particularmente efectos por interacción Ising y acoples *nnn*. Todos ellos pertenecen al subespacio $m_z = 0$ cuya dimensión es $\mathcal{D}_{m_z=0} = \binom{N}{N/2}$.

En analogía al estado $|\Phi_{2N-1}\rangle$ definido en la Ec. (3.15), también analizaremos estados aleatorios despolarizados

- en el subespacio $m_z = 0$,

$$|\Phi_{m_z=0}\rangle = \sum_{\langle i|\hat{S}_T^z|i\rangle=0} \frac{e^{i\varphi_i}}{\sqrt{\mathcal{D}_{m_z=0}}} |i\rangle \quad (4.2)$$

donde el índice i recorre solamente el subespacio $m_z = 0$, y

- en el espacio de Hilbert completo,

$$|\Phi_{2N}\rangle = \sum_i \frac{e^{i\varphi_i}}{\sqrt{2^N}} |i\rangle, \quad (4.3)$$

donde el índice i recorre todo el espacio de Hilbert. En ambos casos φ_i es una fase aleatoria uniformemente distribuida en $[0, 2\pi)$. Tal como ya dijimos en el Capítulo 3, estos estados aleatorios manifiestan propiedades “térmicas”, en el sentido que para la evaluación de observables locales se obtienen los mismos resultados que un cálculo sobre un ensamble en el límite de altas temperaturas. Aquí, mostraremos que estos estados proveen una cota inferior de amplitud en las fluctuaciones temporales.

4.2.2. Observables de pocos cuerpos

Estudiaremos la equilibración y las fluctuaciones temporales de los siguientes observables.

- Energía cinética,

$$\widehat{\text{KE}} = \sum_{j=1}^{N-1} J \left(\hat{S}_j^x \hat{S}_{j+1}^x + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+1}^y \right) + \lambda \sum_{j=1}^{N-2} J \left(\hat{S}_j^x \hat{S}_{j+2}^x + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+2}^y \right). \quad (4.4)$$

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

- Energía de interacción,

$$\widehat{\text{IE}} = \sum_{j=1}^{N-1} J \Delta \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z + \lambda \sum_{j=1}^{N-2} J \Delta \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+2}^z. \quad (4.5)$$

Las fluctuaciones temporales para $\widehat{\text{KE}}$ y $\widehat{\text{IE}}$ son las mismas, dado que estos observables suman a una constante energía total. Por ello, mostraremos sólo resultados para $\widehat{\text{KE}}$.

- Correlaciones espín-espín en las direcciones z y x ,

$$\hat{C}_{nm}^{z(x)} = \hat{S}_n^{z(x)} \hat{S}_m^{z(x)}. \quad (4.6)$$

Presentaremos los resultados para $n = N/2$ y $m = N/2 + 1$, pero también hemos estudiado $m = N/2 + 2$ y $m = N/2 + 3$. Dado que las interacciones consideradas aquí son de corto alcance, estas correlaciones decaen con la distancia entre los espines n y m . La restricción a sitios en el medio de la cadena se debe a minimizar los efectos de borde.

- Factores de estructura en z y x ,

$$\hat{s}_f^{z(x)}(k) = \frac{1}{N} \sum_{n,m=1}^N e^{ik(n-m)} \hat{S}_n^{z(x)} \hat{S}_m^{z(x)}. \quad (4.7)$$

Estos factores son la transformada de Fourier de las correlaciones espín-espín con $k = 2\pi p/N$ y p entero, $p = 1, \dots, N$. Para sus fluctuaciones, presentaremos resultados sólo para $k = \pi$ dado que este valor de momento existe para todos los tamaños de sistema aquí considerados $10 \leq N \leq 22$. También hemos estudiado la suma sobre todo los k 's, obteniendo resultados cualitativamente similares. No obstante, la evolución temporal muestra diferencias apreciables con el valor de k . Esta cuestión se discute en la Sec. 4.5.

Resulta oportuno mencionar que algunos de los observables aquí expuestos son *locales* en sentido explícito, como por ejemplo las correlaciones $\hat{C}_{nm}^{z(x)}$ para dados n, m . Asimismo, los otros siguen siendo *locales* pero en un sentido diferente, que radica en una *localidad en el espacio de Hilbert*. Así, un observable como $\hat{s}_f^{z(x)}(k)$ involucra información de todos los espines, pero está lejos de describir *global* o totalmente al sistema.

4.2.3. Método numérico

Se utiliza diagonalización exacta para describir las propiedades estáticas de sistemas con $N = 16$ ($m_z = 0$) y $N = 18$ ($m_z = -3$). La dinámica, sin embargo, involucra

cadena de hasta $N = 24$, lo cual elimina la posibilidad de disponer de métodos exactos. Por lo tanto, aquí la evolución de los estados puros definidos anteriormente se evalúa con el algoritmo de Trotter-Suzuki de orden 4 descrito en el Apéndice A.

4.3. Espectro y *Energy Shell*

El estado inicial $|\text{ini}\rangle$ evoluciona de acuerdo con $|\Psi(t)\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{\text{ini}} e^{-iE_{\alpha}t} |\alpha\rangle$, donde $C_{\alpha}^{\text{ini}} = \langle \alpha | \text{ini} \rangle$, mientras que E_{α} y $|\alpha\rangle$ son las autoenergías y los autoestados del Hamiltoniano que dicta la evolución.

El valor de expectación de un observable \hat{O} a tiempo t está dado por

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{O} | \Psi(t) \rangle = \sum_{\alpha} |C_{\alpha}^{\text{ini}}|^2 O_{\alpha\alpha} + \sum_{\alpha \neq \beta} C_{\alpha}^{*\text{ini}} C_{\beta}^{\text{ini}} O_{\alpha\beta} e^{i(E_{\alpha} - E_{\beta})t},$$

donde $O_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \hat{O} | \beta \rangle$ son los elementos de matriz del observable. La varianza de las fluctuaciones temporales del observable alrededor de su valor “estacionario” corresponde a:

$$\begin{aligned} \sigma_O^2 &= \overline{|\langle O(t) \rangle - \overline{\langle O(t) \rangle}|^2} \\ &= \sum_{\substack{\alpha \neq \beta \\ \gamma \neq \delta}} C_{\alpha}^{*\text{ini}} C_{\beta}^{\text{ini}} C_{\gamma}^{*\text{ini}} C_{\delta}^{\text{ini}} O_{\alpha\beta} O_{\gamma\delta}^{\dagger} \overline{e^{i(E_{\alpha} - E_{\beta} + E_{\gamma} - E_{\delta})t}} \end{aligned} \quad (4.8)$$

donde $\overline{O} = T^{-1} \int_0^T O(t) dt$ es el promedio temporal en el intervalo $[0, T]$.

Bajo la condición de ausencia de *gaps* degenerados (“no resonancias”),

$$\begin{aligned} E_{\alpha} = E_{\beta} \text{ y } E_{\delta} = E_{\gamma} \\ E_{\alpha} - E_{\beta} = E_{\delta} - E_{\gamma} \Rightarrow \text{ o bien } \\ E_{\alpha} = E_{\delta} \text{ y } E_{\beta} = E_{\gamma} \end{aligned} \quad (4.9)$$

y para $T \rightarrow \infty$, se mostró que [Rei08, Sho11]

$$\sigma_O^2 \leq (O_{\max} - O_{\min})^2 \text{Tr}[\bar{\rho}^2] = \frac{(O_{\max} - O_{\min})^2}{\text{IPR}^{\text{ini}}}, \quad (4.10)$$

donde $O_{\max(\min)}$ es el máximo (mínimo) autovalor del operador \hat{O} ,

$$\bar{\rho} = \sum_{\alpha} |C_{\alpha}^{\text{ini}}|^2 |\alpha\rangle \langle \alpha| \quad (4.11)$$

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

es la matriz densidad diagonal, y

$$\text{IPR}^{\text{ini}} = \frac{1}{\sum_{\alpha} |C_{\alpha}^{\text{ini}}|^4} \quad (4.12)$$

es la tasa o razón de participación inversa (IPR *inverse participation ratio*) del estado inicial en la base de autoestados de energía. La cota dada anteriormente ha sido mejorada y la condición de ausencia de *gaps* degenerados (“no-resonancias”) fue sustituida por “no demasiados” *gaps* degenerados [SF12].

El IPR mide el nivel de deslocalización de un estado en una dada base. Para matrices aleatorias, los autoestados están completamente deslocalizados. Para matrices aleatorias obtenidas de un Ensamble Ortogonal Gaussiano [GMGW98], se puede ver que $\text{IPR} \sim \mathcal{D}/3$ [Izr90], mientras que para el Ensamble Unitario Gaussiano [GMGW98], $\text{IPR} \sim \mathcal{D}/2$. Aquí, ninguno de los vectores base seleccionados como estados iniciales alcanza valores tan grandes de IPR^{ini} , lo cual no es sorprendente, dado que no son autoestados de matrices aleatorias. Por el contrario, los estados aleatorios $|\Phi_{m_z=0}\rangle$ y $|\Phi_{2^N}\rangle$, tienen en efecto $\text{IPR}^{\text{ini}} \sim \mathcal{D}/2$. Para observables de pocos cuerpos, un estado inicial deslocalizado con $\text{IPR}^{\text{ini}} \propto \mathcal{D}$ conlleva a un decaimiento exponencial de σ_O en función del tamaño del sistema, dado que \mathcal{D} crece exponencialmente con N .

A continuación, presentaremos primero los resultados para la distribución de espaciados de niveles y el número de *gaps* degenerados. Esto fortalecerá nuestras expectativas de una atenuación exponencial con N para las fluctuaciones temporales en observables de pocos cuerpos, sobretodo para sistemas interactuantes $0 < \Delta \leq 1$ y más aun para sistemas caóticos. Luego, presentaremos los niveles de deslocalización de los estados iniciales para estos sistemas. Estos niveles establecen cotas para σ_O de acuerdo con la Ec. (4.10), y ayudan a justificar el valor del coeficiente de atenuación exponencial (tal coeficiente se calcula numéricamente en la sección siguiente). Encontramos que, aun cuando la cota también depende del rango de autovalores de \hat{O} , los distintos observables estudiados difícilmente afectan el valor del coeficiente de atenuación (ver Sec. 4.4).

4.3.1. Espectro

La ausencia de degeneraciones va de la mano con sistemas caóticos, donde los niveles de energía están correlacionados y sus cruces son evitados. En tal caso, la distribución $P(s)$ de espaciamentos s entre niveles de energía adyacentes es del tipo Wigner-Dyson

(WD) [Haa91, GMGW98, Rei04]. La forma precisa de esta distribución en realidad depende de las simetrías del sistema. En presencia de simetría de reversión temporal, se tiene $P_{WD}(s) = (\pi s/2) \exp(-\pi s^2/4)$. Por otra parte, para sistemas no-caóticos, los autovalores tienden a aglomerarse y pueden eventualmente cruzarse. Aquí, la distribución de espaciados responde a una ley tipo Poisson, $P_P(s) = \exp(-s)$. A medida que λ aumenta desde cero en la Ec. (4.1), una distribución WD se obtiene, tal como se muestra en el panel (f) de la Fig. 4.2¹. Mostraremos resultados para el subespacio $m_z = -3$ y $\Delta \neq 1$, para evitar simetrías asociadas con rotaciones globales en π alrededor de x y con $(\hat{S}_T)^2$. Solamente paridad debe tomarse en cuenta, de manera que la estadística aún es suficientemente buena: para $N = 18$ y paridad par tenemos $\sim 10^4$ niveles de energía.

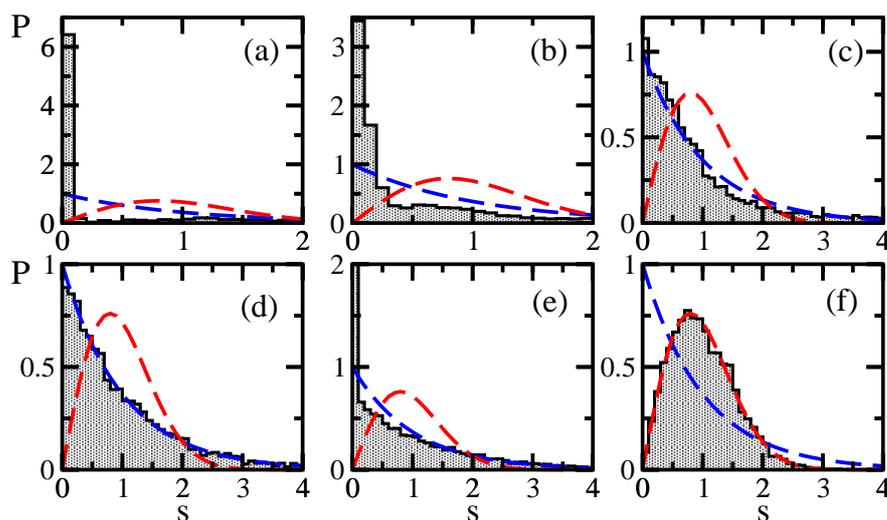


Figura 4.2: Distribución de espaciados de niveles para un único subespacio: $N = 18$, $m_z = -3$, y autoestados con paridad par. Para comparar, las distribuciones tipo Poisson y Wigner-Dyson se muestran con líneas a trazos. (a) – (e) tienen $\lambda = 0$ y $\Delta = 0.0, 10^{-3}, 10^{-2}, 0.1$, y 0.5 , respectivamente. (f) $\Delta = 0.5$ y $\lambda = 1$.

En presencia de demasiadas degeneraciones o en sistemas localizados, se observan desviaciones de $P_P(s)$ debido a la aparición del pico de Shnirelman [Shn75, CS95, FS97]. Esto puede apreciarse en el panel (a) de la Fig. 4.2, donde mostramos la distribución de espaciados para el modelo XY ($\Delta = \lambda = 0$). El número de pequeños espaciados va

¹El valor preciso para el cruce entre regímenes no-caótico y caótico disminuye con el tamaño del sistema [CRF⁺11].

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

mucho más allá que una distribución de Poisson. Sin embargo, a medida que Δ aumenta, las excesivas degeneraciones rápidamente desaparecen (comparar la distribución para $\Delta = 10^{-3}$ en panel (b) con la correspondiente a $\Delta = 10^{-2}$ en panel (c)).

Los paneles (d) y (e) muestran los resultados obtenidos para sistemas nn con $\Delta = 0.1$ y 0.5 , respectivamente. Notese aquí que para el valor específico 0.5 , la forma de la distribución también se separa de $P_P(s)$, a pesar que la distribución tipo Poisson es recuperada con un cambio pequeño, por ejemplo, usando $\Delta = 0.48$.

Además de la ausencia de degeneraciones, $\text{gap}_{\alpha\beta} = |E_\alpha - E_\beta| \neq 0$, una condición fundamental para la atenuación exponencial de fluctuaciones temporales en la Ec. (4.10) es la ausencia de *gaps* degenerados, $\delta\text{gap} = |\text{gap}_{\alpha'\beta'} - \text{gap}_{\alpha\beta}| \neq 0$. En la tabla 4.2, comparamos el número total de diferencias de energía donde $\text{gap}_{\alpha\beta} < 10^{-8}$ y el número total de diferencias de *gap* donde $\delta\text{gap} < 10^{-8}$ para sistemas con $\lambda = 1$ y $\Delta = 0, 0.01, 0.1, 0.5$, y también para sistemas caóticos $\lambda = 1, \Delta = 0.5$.

Tabla 4.2: Número total de diferencias de energía donde $\text{gap}_{\alpha\beta} < 10^{-8}$ y de diferencias de *gap* donde $\delta\text{gap} < 10^{-8}$; $N = 15$; $m_z = -3$, autoestados con paridad par.

	$\text{gap}_{\alpha\beta} < 10^{-8}$	$\delta\text{gap} < 10^{-8}$
$\hat{H}_{\Delta=0,\lambda=0}$	2088	336 508 464
$\hat{H}_{\Delta=0.01,\lambda=0}$	0	4 202
$\hat{H}_{\Delta=0.1,\lambda=0}$	0	4 020
$\hat{H}_{\Delta=0.5,\lambda=0}$	192	347 844
$\hat{H}_{\Delta=0.5,\lambda=1}$	0	2 632

Tal como se aprecia en la tabla 4.2, el número de degeneraciones de energía y de *gaps* en el modelo XY (primera fila) es enorme. Cae abruptamente con la introducción de la interacción Ising, aun para magnitudes tan bajas como $\Delta = 0.01$. Para $N = 15$, δgap es 5 órdenes de magnitud más pequeño para modelos interactuantes con anisotropía (segunda y tercera fila) que para el caso $\Delta = 0$. En estos casos, el número de degeneraciones de *gap* es comparable con el de un modelo caótico (última fila). Esto justifica la expectativa de un decaimiento exponencial de las fluctuaciones temporales en función de N para sistemas interactuantes $0 < \Delta \leq 1$.

Resulta notable el comportamiento especial del caso $\Delta = 1/2$ (cuarta fila). Este punto muestra degeneraciones de energía, también apreciables en la Fig. 4.2 (e), y un

gran número de degeneraciones de *gap*, aun cuando δ_{gap} es 3 órdenes de magnitud más pequeño que para el modelo *XY*. Nuestra elección de $\Delta = 1/2$ en los estudios numéricos de la Sec. 4.4 es, en consecuencia, en absoluto arbitraria. Si una ley de escala exponencial se observase para este caso particular, entonces sería ciertamente esperable también para otros modelos $0 < \Delta \leq 1$.

4.3.2. *Energy shell*

Dado que los sistemas analizados tienen interacciones de dos cuerpos, un estado $|\text{ini}\rangle$ máximamente deslocalizado es aquel que llena la *energy shell* ergódicamente. La *energy shell* es una Gaussiana centrada en la energía del estado inicial,

$$E_{\text{ini}} = \sum_{\alpha} |C_{\alpha}^{\text{ini}}|^2 E_{\alpha} = H_{\text{ini},\text{ini}} \quad (4.13)$$

con ancho

$$\delta E_{\text{ini}}^2 = \sum_{\alpha} |C_{\alpha}^{\text{ini}}|^2 (E_{\alpha} - E_{\text{ini}})^2 = \sum_{j \neq \text{ini}} |H_{\text{ini},j}|^2. \quad (4.14)$$

La última igualdad en las dos ecuaciones de arriba es válida cuando el estado inicial es uno de los vectores base. En tal caso, no se requiere diagonalizar el Hamiltoniano para obtener la *energy shell*, basta con los elementos de matriz $H_{i,j}$ del Hamiltoniano [FI97, SBI12b]. Los elementos diagonales, que determinan E_{ini} , sólo dependen de los términos Ising nn y nnn . Pares de espines paralelos nn y nnn en la dirección z contribuyen positivamente a la energía del estado, mientras que aquellos pares antiparalelos contribuyen negativamente.

Por ejemplo, el estado pared de dominio tiene

$$E_{\text{ini}}^{\text{DW}} = \frac{J\Delta}{4} [(N-3) + (N-6)\lambda], \quad (4.15)$$

donde las interacciones Ising, tanto nn como nnn , contribuyen con signo positivo a la energía, y

$$\delta E_{\text{ini}}^{\text{DW}} = \frac{J}{2} \sqrt{1 + 2\lambda^2}. \quad (4.16)$$

Notar aquí que el ancho de la *energy shell* para este estado no depende del tamaño del sistema.

La Fig. 4.3 muestra la distribución de $|C_{\alpha}^{\text{ini}}|^2$ entre los autovalores E_{α} para el estado de Néel y Hamiltonianos con $\lambda = 0$ ($\Delta = 1, 0.5$), $\lambda = 0.4$ ($\Delta = 1$), y $\lambda = 1$ ($\Delta = 1, 0.5$).

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

El ancho de la *energy shell* es el mismo para todos los casos, porque el acople directo entre $|\text{NS}\rangle$ y cualquier otro vector de la base es sólo debido a un término *nn flip-flop*, por lo que

$$\delta E_{\text{ini}}^{\text{NS}} = \frac{J}{2}\sqrt{N-1}. \quad (4.17)$$

Además, el número de componentes que participan en la LDoS difieren significativamente de un modelo a otro. A medida que Δ disminuye y λ aumenta,

$$E_{\text{ini}}^{\text{NS}} = \frac{J\Delta}{4}[-(N-1) + (N-2)\lambda] \quad (4.18)$$

se acerca al centro del espectro, donde la DoS es grande, y entonces la *energy shell* se llena mejor, tal como se muestra en la Fig. 4.3 (e). Más cerca de los bordes del espectro, la distribución es menos homogénea, más picuda y asimétrica, tal como se muestra en la Fig. 4.3 (a).

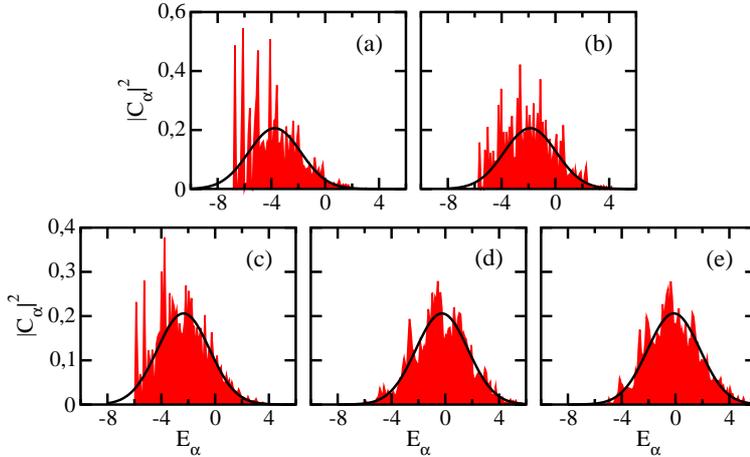


Figura 4.3: Distribución de los pesos (LDoS) para el estado inicial Néel en la representación de energía, $N = 16$, $m_z = 0$. Los Hamiltonianos y E_{ini} son: (a) $\hat{H}_{\Delta=1,\lambda=0}$ y -3.750 ; (b) $\hat{H}_{\Delta=0.5,\lambda=0}$ y -1.875 ; (c) $\hat{H}_{\Delta=1,\lambda=0.4}$ y -2.350 ; (d) $\hat{H}_{\Delta=1,\lambda=1}$ y -0.250 ; y (e) $\hat{H}_{\Delta=0.5,\lambda=1}$ y -0.125 . Las líneas continuas corresponden a la *energy shell*: una Gaussiana de ancho $\delta E_{\text{ini}} = 1.936$.

El nivel de deslocalización de un estado inicial depende la relación entre $|\text{ini}\rangle$ y \hat{H} . Podemos ganar una buena noción del rol del estado inicial en la Fig. 4.4, donde fijamos el Hamiltoniano y cambiamos $|\text{ini}\rangle$. Seleccionamos para ello el caso más restrictivo entre

los Hamiltonianos con $0 < \Delta \leq 1$, es decir, el Hamiltoniano de Heisenberg $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$. La pregunta es aquí como se distribuyen las componentes del estado inicial entre un conjunto dado de autoestados. El estado pared de dominio y el estado de Néel están ambos en los bordes del espectro, el primero de ellos a muy alta energía y el segundo a muy baja energía. La distribución para $|\text{DW}\rangle$ es angosta y picuda [Fig. 4.4 (a)] y δE_{ini} es mucho más pequeña que ω (tabla 4.1 y Fig. 4.4). La distribución de $|\text{NS}\rangle$ es ancha, de hecho $\delta E_{\text{ini}} \gtrsim \omega$, pero la *energy shell* no se encuentra bien cubierta. Esto se aprecia en los varios picos visibles en la Fig. 4.4 (b) y también en el valor bajo de IPR^{ini} en la tabla 4.3. La distribución para $|\text{PP}\rangle$, que es un estado muy cercano al centro del espectro, es relativamente ancha $\delta E_{\text{ini}} \lesssim \omega$. Aquí, la *energy shell* está relativamente bien cubierta [Fig. 4.4 (c)]. Sólo cuando el estado inicial es uno de los estados aleatorios, $|\Phi_{m_z=0}\rangle$ ó $|\Phi_{2N}\rangle$, la distribución se hace independiente del Hamiltoniano, la *energy shell* se cubre completamente cualquiera sea \hat{H} , y $\delta E_{\text{ini}} \sim \omega$. Esto se puede apreciar en la Fig. 4.4 (d) para $|\Phi_{m_z=0}\rangle$.

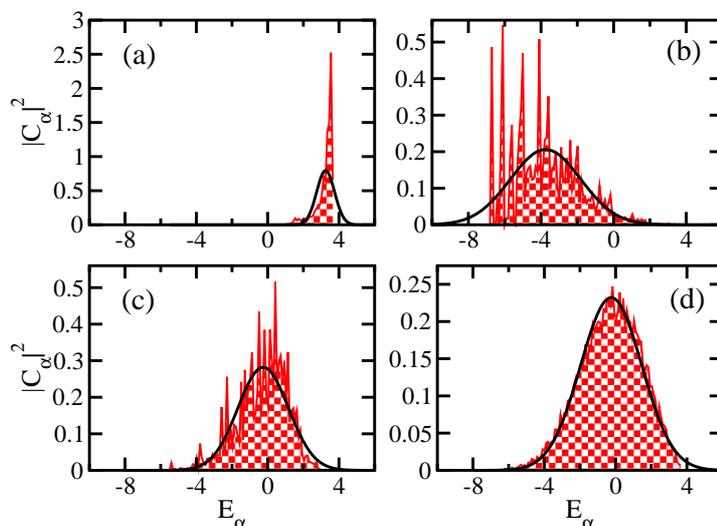


Figura 4.4: Distribución de pesos (LDoS) para diferentes estados iniciales en la representación energía, con $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$, $N = 16$, and $m_z = 0$. (a) $|\text{DW}\rangle$, $E_{\text{ini}} = 3.250$ y $\delta E_{\text{ini}} = 0.500$; (b) $|\text{NS}\rangle$, $E_{\text{ini}} = -3.750$ y $\delta E_{\text{ini}} = 1.936$; (c) $|\text{PP}\rangle$, $E_{\text{ini}} = -0.250$ y $\delta E_{\text{ini}} = 1.414$; y (d) $|\Phi_{m_z=0}\rangle$, $E_{\text{ini}} = -0.246$ y $\delta E_{\text{ini}} = 1.719$.

Tanto el ancho como llenado de la *energy shell* aumentan de (a) a (d) en la Fig. 4.4, y esto se refleja en los valores de IPR^{ini} en la tabla 4.3. La pared de dominio es el estado más localizado de todos los considerados. Para $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$, IPR^{ini} aumenta de

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

Tabla 4.3: Tasa de participación inversa (IPR) de los estados correspondientes a los vectores de la base computacional, para $N = 12, 14, 16$ y $m_z = 0$.

	$\text{IPR}_{N=12}^{\text{ini}}$	$\text{IPR}_{N=14}^{\text{ini}}$	$\text{IPR}_{N=16}^{\text{ini}}$
$\hat{H}_{\Delta=1.5, \lambda=0}$			
DW⟩	2.862	1.436	1.432
NS⟩	15.782	23.865	35.981
PP⟩	22.870	39.528	64.051
$\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$			
DW⟩	16.986	24.541	34.858
NS⟩	24.580	42.003	72.153
PP⟩	45.814	95.851	200.570
$\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=0}$			
DW⟩	37.259	63.718	104.334
NS⟩	38.575	70.555	129.782
PP⟩	50.697	109.737	241.171
$\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0.4}$			
DW⟩	15.643	22.593	31.948
NS⟩	64.316	147.957	336.776
PP⟩	73.936	218.272	592.725
$\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=1}$			
DW⟩	14.380	20.521	28.690
NS⟩	168.345	514.499	1805.249
PP⟩	31.851	68.373	129.883
$\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=1}$			
DW⟩	50.567	123.785	368.140
NS⟩	158.029	548.877	2071.923
PP⟩	77.661	228.241	586.557

|NS⟩ a |PP⟩), pero por supuesto nunca alcanza el nivel deslocalización de los autovectores de matrices aleatorias. Sólo los estados aleatorios satisfacen $\text{IPR}^{\text{ini}} \sim \mathcal{D}/2$ para cualquier Hamiltoniano considerado. En consecuencia, esperamos que la atenuación de las fluctuaciones con N sea más marcada.

4.4 Resultados numéricos para las fluctuaciones temporales

En la tabla 4.3 se observa que el nivel de deslocalización de $|\text{PP}\rangle$ es mayor que el de $|\text{NS}\rangle$ cuando λ es pequeño, lo cual cambia si $\lambda = 1$. El término Ising nnn contribuye negativamente a $|\text{PP}\rangle$, de manera que empuja al estado lejos del centro de banda hacia las energías bajas, siendo esto más acentuado cuando λ es grande. Como resultado, en el caso isotrópico, IPR^{ini} para $|\text{PP}\rangle$ es mayor para régimen débilmente caótico ($\lambda = 0.4$) que para el fuertemente caótico ($\lambda = 1$). Esta observación es en algún sentido sorprendente, porque la mayoría de los estados se deslocalizan más a medida que el nivel de “caoticidad” aumenta. En contraste, para el estado de Néel, la interacción Ising nnn contribuye a la energía y balancea los efectos del término nn , que es negativo [Eq.(4.18)]. Por ello, un valor mayor de λ implica que el estado se acerca al centro del espectro y la distribución mejora (en relación al llenado de la *energy shell*).

Dado que tenemos acceso al IPR^{ini} sólo para tres tamaños de sistema, no podemos realizar el escaleo de tamaño finito. Por esta razón buscaremos evidencia de atenuación exponencial de las fluctuaciones temporales con N estudiando numéricamente la dinámica de observables. Sin embargo, podemos hacer ciertas observaciones en este punto. De la definición de los estados aleatorios, queda claro que IPR^{ini} crece exponencialmente con N y también lo hace el recíproco de σ_O para observables de pocos cuerpos [Eq.(4.10)]. Tal como se aprecia en la tabla 4.3, el valor del cociente $\text{IPR}^{\text{ini}}/\mathcal{D}$ para el estado de Néel en el Hamiltoniano fuertemente caótico $\hat{H}_{\Delta=0.5,\lambda=1}$ también es constante ($\sim 1/6$), de manera que aquí también la atenuación exponencial de σ_O está garantizada. Para los otros estados iniciales y \hat{H} 's, IPR^{ini} crece más lento que \mathcal{D} , especialmente para $|\text{DW}\rangle$ en el caso isotrópico, pero probablemente se corresponda también con un crecimiento exponencial. La única excepción clara es la pared de dominio en la fase con *gap* ($\Delta = 1.5$), que, como se espera, se localiza aun más a medida que N aumenta. Una discusión específica sobre el proceso de relajación de este estado se presenta en la Sec. 4.5.

4.4. Resultados numéricos para las fluctuaciones temporales

Nuestros resultados numéricos efectivamente sugieren que la desviación estándar de las fluctuaciones temporales, para sistemas interactuantes $0 < \Delta \leq 1$, se atenúan exponencialmente con el tamaño del sistema $\sigma_O \propto e^{-\kappa N}$. El valor del coeficiente κ

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

de esta atenuación incrementa significativamente con el nivel de deslocalización del estado inicial y, cuando se comparan distintos observables, es usualmente mayor para $\widehat{\text{KE}}$. Para dilucidar la ley de atenuación de fluctuaciones, analizamos cada observable, estado inicial, y Hamiltoniano en escalas log-lineal y log-log. Los ajustes lineales en tales escalas permiten una comparación entre las dos posibilidades (ley de escala exponencial o ley de potencias). En última instancia, la elección de la ley está cuantificada por el coeficiente de determinación R^2 .

En la Fig. 4.5, se muestran resultados de σ_O para diferentes observables, con el estado de Néel como $|\text{ini}\rangle$. La dispersión o fluctuación se calcula en un intervalo de tiempo posterior a que los observables hayan alcanzado un valor (en apariencia) estático. La atenuación de tipo exponencial con N se evidencia por el buen ajuste lineal para una escala log-lineal. En el caso de una eventual ley de potencias, los valores de R^2 son sistemáticamente peores [algunos ejemplos se muestran en la Sec. 4.4.1]. Hay un sólo caso, para $\widehat{\text{KE}}$ y $\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=0}$, donde R^2 para la ley de potencias supera ligeramente al coeficiente R^2 respectivo a la ley exponencial. Por supuesto, descartar irrefutablemente el comportamiento tipo ley de potencias requiere alcanzar tamaños de sistemas mayores a los aquí estudiados $10 \leq N \leq 22$. Sin embargo, enfatizamos que el exponente b en un eventual ajuste tipo ley de potencias, $\sigma_O \propto N^{-b}$, siempre resulta ser mucho mayor al valor 0.5 encontrado para sistemas de partículas independientes [VZ13, CCR11, GR12, HSWR13]. Para el estado de Néel y los observables estudiados en la Fig. 4.5, el factor más pequeño observado es $b \sim 2$, que se corresponde con $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$ y $\hat{s}_f^{z(x)}(\pi)$.

El coeficiente κ en los ajustes exponenciales de la Fig. 4.5 disminuye con Δ y aumenta con λ . A medida que la anisotropía aumenta, $|\text{ini}\rangle$ se “desparrama” menos en la representación energía tal como se advierte en la Fig. 4.3 y la tabla 4.3. Las excitaciones en el sistema pierden movilidad a medida que el mismo pasa por el punto isotrópico ($\Delta = 1$), donde el espín total se conserva, y luego entra en una fase con *gap* ($\Delta > 1$), donde se forman dos bandas de energía bien separadas [JKS13]. Por otra parte, a medida que λ crece desde cero, se produce la entrada en el régimen caótico, favoreciendo la deslocalización del estado de Néel. La competencia entre las interacciones nn y nnn ubica al estado cerca del centro espectral [Eq. (4.18)]. El valor de κ refleja tanto el ancho como el llenado de la *energy shell*. Para el caso particular de $|\text{NS}\rangle$, donde el ancho de la *energy shell* es siempre el mismo (ver Fig. 4.3), será entonces el llenado lo que determine diferentes coeficientes en la Fig. 4.5. En tal figura, el menor

4.4 Resultados numéricos para las fluctuaciones temporales

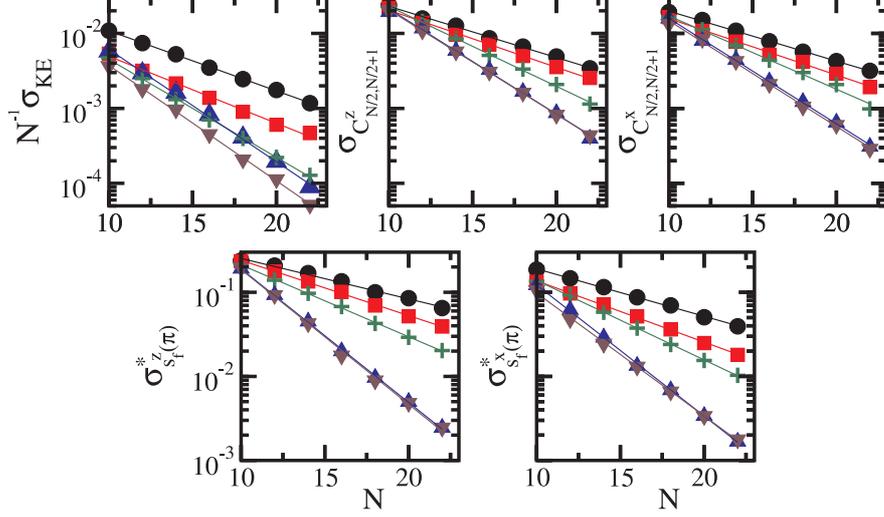


Figura 4.5: Gráfico logarítmico de la desviación estándar de las fluctuaciones temporales de diferentes observables versus N para (círculos) $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$, (cuadrados) $\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=0}$, (signo +) $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0.4}$, (triángulo hacia arriba) $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=1}$, y (triángulo hacia abajo) $\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=1}$. $|\text{ini}\rangle$ es el estado de Néel; $[100, 500]$ es el intervalo de promediación; y $\sigma_O^* = \sigma_O / \overline{O}$. Las líneas continuas corresponden a los ajustes correspondientes.

valor es $\kappa \sim 0.11$ para $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$ y $\hat{s}_f^z(\pi)$; el mayor valor es $\kappa \sim 0.37$ para $\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=1}$ y $\hat{s}_f^z(\pi)$, tal como se aprecia en la tabla 4.4.

El estado de Néel se comporta como un estado térmico (superposición aleatoria) para el Hamiltoniano caótico $\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=1}$. Tiene un buen llenado de la *energy shell* y además $\text{IPR}^{\text{ini}} \sim \mathcal{D}/6$ (ver Fig. 4.3 y tabla 4.3). Esto explica el valor $\kappa \sim 0.35$, que es el mismo obtenido para estados iniciales térmicos, $|\Phi_{m_2=0}\rangle$ y $|\Phi_{2^N}\rangle$. Tal como ya mencionamos, estos últimos estados llenan ergodicamente la *energy shell* para cualquier Hamiltoniano, y por esta razón, exhiben las mínimas fluctuaciones temporales. De acuerdo con la Ec. (4.10) y usando que para $|\Phi_{2^N}\rangle$ se tiene $\mathcal{D} = 2^N$, entonces $\sigma^2 \sim 2^{-N}$, lo cual arroja como resultado $\kappa = \frac{1}{2} \log 2 \approx 0.35$. Por lo tanto, al menos cuando el estado cubre la *energy shell*, el acuerdo entre la predicción analítica y nuestros resultados numéricos es excelente.

En contraste a $|\text{NS}\rangle$, el estado pared de dominio no tiene un gran nivel de deslocalización ya que se ubica lejos del centro espectral. Los valores de κ encontrados son significativamente más pequeños, especialmente en el punto $\Delta = 1$. Incluso para $\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=1}$, κ no alcanza su máximo 0.35. Se acerca bastante a ese valor para $\widehat{\text{KE}}$

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

Tabla 4.4: Coeficiente κ en los ajustes exponenciales $\sigma_O \propto e^{-\kappa N}$ de la Fig. 4.5 para $|\text{ini}\rangle = |\text{NS}\rangle$.

κ para $ \text{NS}\rangle$			
$\hat{O} =$	\widehat{KE}	$\hat{C}_{N/2, N/2+1}^z$	$\hat{s}_f^z(\pi)$
$\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$	0.184	0.157	0.111
$\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=0}$	0.206	0.175	0.151
$\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0.4}$	0.301	0.246	0.196
$\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=1}$	0.345	0.324	0.366
$\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=1}$	0.354	0.320	0.369

($\kappa \sim 0.33$), pero no supera el 0.28 para los otros observables.

En la Fig. 4.6, tal como en la Fig. 4.4, dejamos fijo el Hamiltoniano en lugar del estado inicial. Seleccionamos aquí el Hamiltoniano de Heisenberg $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$. El valor de κ nuevamente refleja el ancho y llenado de la *energy shell* (comparar tablas 4.3, 4.5 y Figs. 4.4, 4.6). Para los estados de la base $|\text{DW}\rangle$, $|\text{NS}\rangle$, y $|\text{PP}\rangle$, el coeficiente κ es siempre mucho más pequeño que 0.35. Ninguno de estos vectores base se comportan como un estado térmico para $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$. El valor mínimo de $\kappa \sim 0.11$ ocurre para $|\text{DW}\rangle$ y los observables \widehat{KE} y $\hat{s}_f^z(\pi)$. Incluso en estos casos, el coeficiente R^2 para el ajuste exponencial es ligeramente mayor que el análogo para ley de potencias. Más aun, el ajuste ley de potencias en este caso resulta en $b \sim 1.65$, que es mucho más grande que el valor 0.5 para sistemas de partículas libres [VZ13, CCR11, GR12, HSWR13].

Tabla 4.5: Coeficiente κ de los ajustes exponenciales $\sigma_O \propto e^{-\kappa N}$ de la Fig. 4.6 for $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$.

κ para $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$			
$\hat{O} =$	\widehat{KE}	$\hat{C}_{N/2, N/2+1}^z$	$\hat{s}_f^z(\pi)$
$ \text{DW}\rangle$	0.109	0.133	0.109
$ \text{NS}\rangle$	0.184	0.157	0.111
$ \text{PP}\rangle$	0.246	0.215	0.244
$ \Phi_{m_z=0}\rangle$	0.354	0.331	0.325
$ \Phi_{2N}\rangle$	0.370	0.343	0.345

4.4 Resultados numéricos para las fluctuaciones temporales

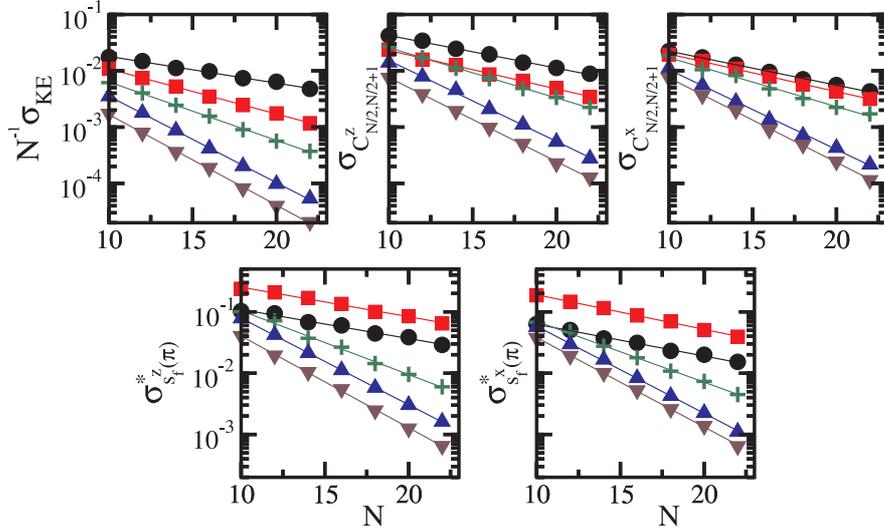


Figura 4.6: Gráfico logarítmico de la desviación estándar de las fluctuaciones temporales de diferentes observables versus N para (círculos) $|DW\rangle$, (cuadrados) $|NS\rangle$, (signo $+$) $|PP\rangle$, (triángulo hacia arriba) $|\Phi_{m_z=0}\rangle$, y (triángulo hacia abajo) $|\Phi_{2N}\rangle$. Las líneas continuas corresponden a los ajustes lineales en escala log-lineal, y $\sigma^* = \sigma_O/\overline{O}$. Para todos los paneles: $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$ y los promedios computados en el intervalo de tiempo $[100, 500]$, excepto para el estado pared de dominio, en el que usó $[5 \times 10^2, 5 \times 10^3]$.

Resulta apreciable en la Fig. 4.6 el comportamiento de los factores de estructura para $|DW\rangle$ y $|NS\rangle$: se observa que $\sigma_{s_f^{z(x)}}$ es mayor para $|DW\rangle$ que para $|NS\rangle$. No obstante, notamos que κ para el estado de Néel es mayor, por lo que las curvas eventualmente se cruzarían. Este cruce se puede apreciar ya en los tamaños de sistema analizados aquí, por ejemplo para $\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=1}$ (datos no mostrados).

4.4.1. Ley exponencial vs. ley de potencias

En la Fig. 4.7, mostramos algunos ejemplos para la comparación entre el ajuste exponencial y la ley de potencias. Los paneles de la izquierda muestran los valores $1 - R^2$ para las fluctuaciones temporales de las correlaciones espín-espín $\hat{C}_{N/2, N/2+1}^x$ y los cinco Hamiltonianos considerados. Se aprecia que $1 - R^2$ es como mínimo un orden de magnitud más pequeño para la ley exponencial que para la ley de potencias. Además, alcanza valores particularmente pequeños en el caso de estados térmicos (superposición aleatoria) [Fig. 4.7(b)].

Los paneles de la derecha muestran la atenuación de las fluctuaciones para \widehat{KE} en

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

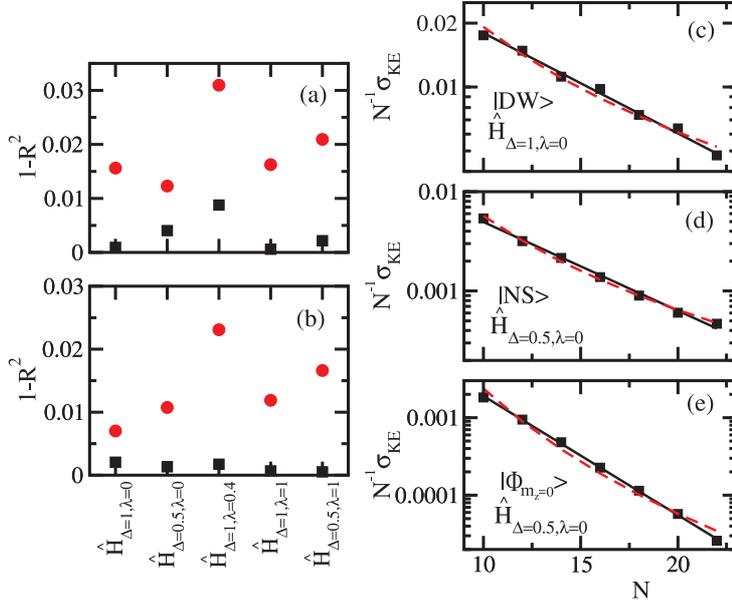


Figura 4.7: Paneles en la izquierda: valores $1 - R^2$ para los ajustes exponenciales (cuadrados) y para leyes de potencia (círculos). Se consideran las fluctuaciones de $\hat{C}_{N/2, N/2+1}^{rx}$ en función de N . Los estados iniciales son (a) $|\text{NS}\rangle$ y (b) $|\Phi_{m_z=0}\rangle$. Paneles de la derecha: gráfico logarítmico de la desviación estándar de las fluctuaciones temporales de $\widehat{\text{KE}}$ versus N para (c) $|\text{DW}\rangle$ con $\hat{H}_{\Delta=1,\lambda=0}$; (d) $|\text{NS}\rangle$ con $\hat{H}_{\Delta=0.5,\lambda=0}$; y (e) $|\Phi_{m_z=0}\rangle$ con $\hat{H}_{\Delta=0.5,\lambda=0}$. Las líneas continuas corresponden a los ajustes tipo exponencial y las líneas a trazos a las leyes de potencia. Los promedios se calculan en la ventana temporal $[100, 500]$, excepto para la pared de dominio, caso en el cual $[5 \times 10^2, 5 \times 10^3]$.

4.4 Resultados numéricos para las fluctuaciones temporales

función de N para tres diferentes combinaciones de estados iniciales y Hamiltonianos. El ajuste exponencial es visiblemente más apropiado, excepto quizás para la pared de dominio y Hamiltoniano Heisenberg. También puede observarse la disminución sustancial de σ_{KE} para N fijo, a medida que nos movemos del panel superior al inferior, es decir, a medida que el estado inicial se deslocaliza cada vez más.

4.4.2. El Hamiltoniano XY

En el caso XY, la cota en dada por la Ec. (4.10) dejaría de ser válida en virtud de la gran cantidad de degeneraciones que presenta este modelo, tal como ya mencionamos en la Sec. 4.3.1. Existen estudios analíticos y numéricos que avalan la ley de potencias para la atenuación de fluctuaciones temporales en sistemas de partículas no interactuantes (libres) [VZ13, CCR11, GR12, HSWR13]. En términos numéricos, dado que los Hamiltonianos cuadráticos son solubles trivialmente, se han estudiado sistemas muy grandes [CCR11, GR12, HSWR13]. Comparar nuestros resultados numéricos con esos antecedentes es una buena manera de contrastar y validar nuestras conclusiones.

Para $|DW\rangle$ y $|NS\rangle$, el ajuste con ley de potencias es, en efecto, la mejor elección para algunos observables, pero no para todos. El valor de b hallando es más convincente, dado que cuando $\Delta \neq 0$ se obtenían eventuales valores de b muy lejanos al 0.5. Ambos estados arrojan, para $\sum_k s_f^z(k)$, un estimado $b \sim 0.6$ para el Hamiltoniano XY, lo cual está muy cerca de la predicción analítica 0.5.

Aun en el caso del Hamiltoniano XY, los estados térmicos $|\Phi_{m_z=0}\rangle$ y $|\Phi_{2N}\rangle$ claramente implican una atenuación exponencial de las fluctuaciones temporales. Este hecho refuerza la importancia del rol del estado inicial en cualquier estudio de dinámica fuera de equilibrio, algo que ya ha sido explorado en el contexto de la termalización [BCH11, RF11, DOV11, HR12] y en el contexto del teorema de fluctuación-disipación [KPSR13] para sistemas cuánticos aislados.

Otra diferencia entre el caso no-interactuante XY y el caso interactuante $\Delta \neq 0$, que es concomitante con las diferencias en cuanto a degeneraciones, refiere a la naturaleza intrínseca de las fluctuaciones alrededor del estado estacionario. Haciendo uso de la transformada de Fourier, tenemos acceso al espectro de frecuencias de las fluctuaciones para la magnetización local en el sitio $N/2$. Se observa que el modelo XY tiene unas pocas y muy bien definidas frecuencias, tanto para $|DW\rangle$ como para $|NS\rangle$, lo cual

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

constrasta con el caso $0 < \Delta < 1$. Nuevamente, cuando el estado inicial es térmico, el espectro mencionado es ruidoso, cualquiera sea el Hamiltoniano.

4.5. Relajación

Los valores más pequeños de κ para $\Delta \neq 0$ se observan para el estado inicial pared de dominio. De hecho, el coeficiente disminuye significativamente a medida que vamos desde $\Delta = 0.5$ a $\Delta = 1$, y luego a $\Delta = 1.5$ donde el sistema se encuentra en una fase con *gap*. Tal como observamos antes, este estado se encuentra próximo al borde del espectro [Fig. 4.4 (a)] y tiene muy poca conectividad. Aquí juega un papel importante la interacción Ising: la contribución Ising nn (nnn) a la energía de un estado cualquiera aumenta con el número de espines paralelos en la dirección z . La pared de dominio tiene la mayor cantidad de pares nn , $N - 2$, y tiene $N - 4$ pares nnn [ver Ec. (4.15)]. En términos de conectividad, este estado está directamente acoplado a un único vector de la base cuando $\lambda = 0$ y está acoplado a sólo tres vectores cuando $\lambda > 0$. Por ello, de acuerdo con la Ec. (4.14), el ancho de la *energy shell* es muy pequeño y no cambia con el tamaño del sistema [ver Ec. (4.16)].

De las observaciones anteriores, resulta natural que el proceso de relajación de $|DW\rangle$ debe ser mucho más lento que para cualquier otro estado inicial, y en especial para valor de Δ grandes. De hecho, cuando $\Delta \gg 1$, la dinámica de la pared de dominio se “congela” [San08, San10, SM11]. En el estudio de fluctuaciones temporales, se requirió considerar intervalos temporales mucho más largos que para cualquier otro estado inicial, de modo se garantice que no existan transitorios propios de la relajación. Más aun, el tiempo que se requiere para alcanzar un valor estacionario aumenta con N , dado que se necesitan “romper” más pares de espines adyacentes paralelos [SM11].

Una ilustración de la dependencia en tamaño y anisotropía se observa en la Fig. 4.8. En el panel (a), se aprecia que las oscilaciones transitorias permanecen por mayor tiempo a medida que N aumenta. Aquí, una combinación particularmente patológica es el estado pared de dominio y el Hamiltoniano Heisenberg $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$. Cuando $\Delta = 1$, el número de estados que forman parte de la evolución es menor que para $\Delta \neq 0$, pues, sumada a la conservación de espín total en la dirección z , tenemos también conservación total de espín. El rol particular del punto isotrópico para $|DW\rangle$ se muestra en el panel

(b). Para los valores $\Delta = 1.5$ y $\Delta = 0.5$, el estado estacionario se alcanza luego de una decenas de Jt , mientras que en el caso $\Delta = 1$ no se observa incluso para $Jt \sim 500$.

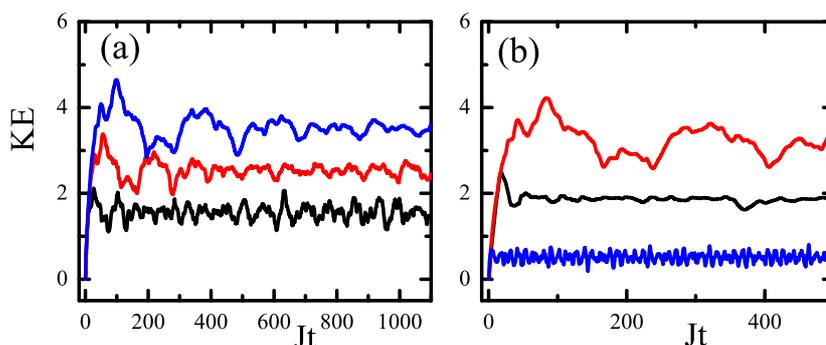


Figura 4.8: Dependencia temporal de la energía cinética para $|\text{ini}\rangle = |\text{DW}\rangle$. (a) $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$, y $N = 24, 18, 12$ de arriba hacia abajo. (b) $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$, $\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=0}$, $\hat{H}_{\Delta=1.5, \lambda=0}$ de arriba hacia abajo, $N = 22$.

En la Fig. 4.9 comparamos el proceso de relajación para $|\text{DW}\rangle$, $|\text{NS}\rangle$, y $|\Phi_{m_z=0}\rangle$. Elegimos como observable al factor de estructura pues su evolución temporal tiene una dependencia interesante en el momento k , dependiendo del estado inicial y del Hamiltoniano que rige la dinámica. En los paneles medios y superiores, mostramos la evolución de $\hat{s}_f^z(k)$ con $|\text{ini}\rangle = |\text{DW}\rangle$. En el caso de k 's pequeños y en el punto isotrópico, el proceso de relajación es muy lento y las fluctuaciones son grandes [Figs. 4.9 (a) y (c)]. Esto ocurre incluso para sistemas isotrópicos fuertemente caóticos $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=1}$ [Fig. 4.9 (c)]. Si rompemos las simetrías asociadas con el punto isotrópico, el proceso de relajación es mucho más rápido y las fluctuaciones son más pequeñas para todos los k 's [Figs. 4.9 (b)], lo cual es de hecho más marcado en el régimen caótico [Figs. 4.9 (d)]. Sin embargo, en los cuatro paneles, (a), (b), (c), y (d), los valores de saturación no son siempre los mismos para todos los valores de momento, lo cual sugiere una memoria residual del estado inicial.

Para otros estados iniciales se observa una rápida relajación y pequeñas fluctuaciones, aun en el caso de $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$, siempre que el ancho de la *energy shell* no sea demasiado angosto y $|\text{ini}\rangle$ esté deslocalizado. Esto ya se sugiere en $|\text{ini}\rangle = |\text{NS}\rangle$, a pesar que una dependencia reminiscente en k es apreciable [Fig. 4.9 (e)]. Se vuelve evidente para estados térmicos $|\Phi_{m_z=0}\rangle$ [Fig. 4.9 (f)], donde la dependencia en k se pierde completamente. Este comportamiento debe compararse con las *energy shell* de la Fig. 4.4

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

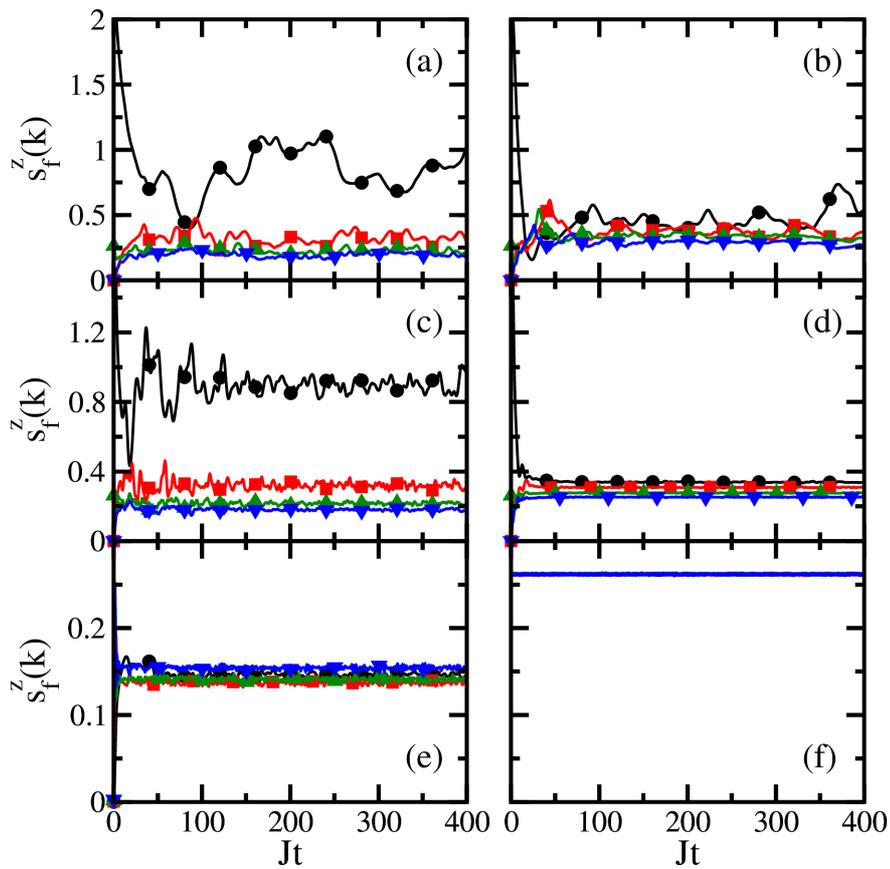


Figura 4.9: Relajación del factor de estructura en la dirección z ; $N = 22$, $m_z = 0$. Momentos: (círculos negros) $k = 2\pi/11$, (cuadrados rojos) $3\pi/11$, (triángulos hacia arriba verdes) $4\pi/11$, (triángulos hacia abajo azules) $5\pi/11$. Paneles superiores: $|\text{ini}\rangle = |\text{DW}\rangle$; (a) $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$ y (b) $\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=0}$. Paneles medios: $|\text{ini}\rangle = |\text{DW}\rangle$; (c) $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=1}$ y (d) $\hat{H}_{\Delta=0.5, \lambda=1}$. Paneles inferiores: $\hat{H}_{\Delta=1, \lambda=0}$; (e) $|\text{ini}\rangle = |\text{NS}\rangle$ y (f) $|\Phi_{m_z=0}\rangle$.

(b) y (d), respectivamente.

4.6. Conclusiones

Nuestros resultados confirman que la atenuación exponencial con N para las fluctuaciones temporales en observables de pocos cuerpos (luego de la equilibración) prevalece en sistemas sin degeneraciones excesivas. El coeficiente de esa atenuación exponencial depende del nivel de deslocalización del estado inicial con respecto al Hamiltoniano que rige la evolución. Esto se condice con antecedentes analíticos [Rei08, Sho11, SF12, Rei12]. Ni el estado inicial, ni el Hamiltoniano, pueden por sí solos determinar el tamaño de las fluctuaciones, sino su juego relativo. La cuantificación precisa de tal relación está dada por el llenado y el ancho de la *energy shell*.

Notablemente, para estados térmicos de alta temperatura (superposición aleatoria), la ley de escala exponencial es válida incluso para modelos no interactuantes como el XY .

Entre los estados iniciales considerados, la pared de dominio presenta el menor coeficiente de atenuación para las fluctuaciones y la dinámica más lenta, especialmente cerca del punto isotrópico. Esto último es una consecuencia de la presencia de simetrías adicionales y la proximidad del estado al borde del espectro, lugar donde la DoS es baja. A medida que aumenta N , la pared de dominio requiere tiempos mayores para alcanzar la equilibración de los observables estudiados. El estudio de sistemas más grandes, que es necesario para descartar inequívocamente las leyes de potencia, será particularmente difícil para este estado.

Los estados iniciales aquí considerados pueden, en principio, ser realizados en experimentos con átomos fríos. Los tamaños de sistema considerados también son relevantes desde el punto de vista experimental, ya que actualmente se pueden manipular arreglos de hasta 10 átomos.

Las contribuciones originales en este capítulo fueron publicadas en:

“*Time fluctuations in isolated quantum systems of interacting particles*”, Pablo R. Zan-
gara, Axel D. Dente, Eduardo J. Torres-Herrera, Horacio M. Pastawski, Aníbal Iucci,
Lea F. Santos, [Phys. Rev. E **88**, 032913 \(2013\)](#). Errata: [Phys. Rev. E **88**, 049904 \(2013\)](#).

4. FLUCTUACIONES TEMPORALES LUEGO DE LA EQUILIBRACIÓN

Capítulo 5

Competencia entre interacciones y desorden en un sistema de muchos cuerpos

“ LOCALIZATION WAS A DIFFERENT MATTER: VERY FEW BELIEVED IT AT THE TIME, AND EVEN FEWER SAW ITS IMPORTANCE; AMONG THOSE WHO FAILED TO FULLY UNDERSTAND IT AT FIRST WAS CERTAINLY ITS AUTHOR. IT HAS YET TO RECEIVE ADEQUATE MATHEMATICAL TREATMENT, AND ONE HAS TO RESORT TO THE INDIGNITY OF NUMERICAL SIMULATIONS TO SETTLE EVEN THE SIMPLEST QUESTIONS ABOUT IT.”

P. W. ANDERSON, [AND78]

En este Capítulo utilizamos el LE como un testigo dinámico para estudiar la “ruptura de ergodicidad”. Una evaluación numérica intensiva del LE nos provee un diagrama de fases donde pueden identificarse regiones dinámicas de acuerdo con diferentes mecanismos predominantes: decoherente, ergódica, vítrea, localización de Anderson, y localización de muchos cuerpos. Argumentos dimensionales basados en el cálculo de incertezas de energía proveen estimaciones satisfactorias para dos líneas críticas en el diagrama.

5. COMPETENCIA ENTRE INTERACCIONES Y DESORDEN EN UN SISTEMA DE MUCHOS CUERPOS

5.1. Tras los pasos de Fermi, Pasta & Ulam

Ya mencionamos en el Capítulo 1 la importancia del trabajo de Fermi-Pasta-Ulam dado que constituye el primer experimento numérico moderno [FPU55]. Sus novedosos y sorprendentes resultados dispararon un importante estudio teórico respecto a las condiciones necesarias para la existencia de propiedades ergódicas en un sistema dinámico cerrado. Esta pregunta ha encontrado respuesta en el dominio clásico [BI05], pero los análogos cuánticos continúan siendo objeto de intensa discusión [PSSV11, EFG15, HN15].

En el dominio cuántico, un candidato prometedor para estudiar la transición entre una dinámica ergódica a una no-ergódica es la localización de muchos cuerpos (*many-body localization*, MBL). Este fenómeno resulta de una transición de fase dinámica, QDPT, entre regímenes difusivos (ergódicos) y localizados (no ergódicos) [PH10, OH07]. Dado que se manifiesta en propiedades dinámicas, escapa al análisis propio de la termodinámica de equilibrio. Puede ocurrir a temperatura finita e incluso a temperatura infinita. El ingrediente crucial es la competencia entre las interacciones y el desorden de Anderson [And78].

En este Capítulo, estudiaremos precisamente el juego relativo entre las interacciones y el desorden un sistema 1D de espines. Ya se conoce que tal modelo presenta la transición MBL, al menos para ciertas elecciones de parámetros [OH07, ZPP08, PH10, BPM12, LS13]. Nuestra estrategia para estudiar el problema se basa en la evaluación del LE, que involucra aquí la inversión del signo de los términos de energía cinética en el Hamiltoniano. Esta idea tiene su origen en la analogía de una partícula introducida en la Sec. 3.4.1 y subyace el análisis de la Fig. 3.7. El LE constituye una magnitud accesible experimentalmente que nos permite identificar cuándo el comportamiento ergódico en la dinámica de una excitación se rompe por presencia de interacciones y desorden suficientemente fuertes. Si estas “perturbaciones” son, en cambio, débiles, favorecen la difusión pero provocan el decaimiento del LE dado que no se revierten (como en la idea típica de decoherencia).

Usando la dependencia temporal del LE a temperatura *infinita*, extraemos un diagrama de fases dinámico que muestra explícitamente la competencia entre interacciones y desorden. El caso correspondiente a temperaturas *cercanas a cero* está estudiado en

la literatura [GS88, DF92] y hay conjeturas respecto a la morfología global del diagrama de fases [Kim81]. En analogía con estas últimas, estudiamos dos líneas críticas que separan la fase ergódica de dos fases no ergódicas diferentes: el aislante de Mott y la fase MBL. La existencia de estas dos fases puede de hecho estimarse en términos de las escalas de energías relevantes. Luego, para evaluar una estimación de las líneas críticas, calculamos las incertezas de energía que un débil desorden o una débil interacción producen en los estados involucrados en la transición de Mott y en la transición MBL respectivamente. Estas estimaciones evidencian un buen acuerdo con el diagrama dinámico del LE. Nuestro enfoque permite la identificación de fases ergódicas y no-ergódicas cuya estructura no trivial podría guiar futuras investigaciones teóricas y experimentales.

5.2. La transición MBL

La literatura que trata el fenómeno de localización en sistemas de muchos cuerpos ha crecido abrumadoramente en los últimos años (ver Ref. [HN15]). Seguiremos aquí algunos de los trabajos pioneros [OH07, PH10, LS13]. Comenzaremos entonces presentando un modelo simple que evidencia la transición MBL.

Consideramos un Hamiltoniano 1D:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[h_i \hat{S}_i^z + \Delta \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z + J \left(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y \right) \right]. \quad (5.1)$$

Aquí, h_i son campos aleatorios uniformemente distribuidos en el rango $[-W, W]$ y Δ es la magnitud de la interacción Ising nn .

El Hamiltoniano en la Ec. (5.1) incluye una amplia variedad de comportamientos dinámicos. Por ejemplo, $\Delta = J = 0$ se corresponde con el caso simple en cual los espines no interactúan en absoluto, dado que simplemente precesan alrededor de sus campos magnéticos locales h_i . En tal caso, el transporte de energía y polarización es completamente inexistente. El sistema está trivialmente localizado y los autoestados son, básicamente, los estados de la base computacional Ising.

Otro caso no-interactuante es $\Delta = 0$ pero $J, W > 0$. Lejos de ser trivial, esta situación se corresponde con una de las versiones más simples del problema estándar de localización de Anderson (AL) [And58, And78]. De hecho, para cualquier valor finito $W > W_c = 0$ el sistema 1D está localizado. Esto significa que los autoestados son

5. COMPETENCIA ENTRE INTERACCIONES Y DESORDEN EN UN SISTEMA DE MUCHOS CUERPOS

funciones de onda cuya dependencia espacial asintótica es exponencial, es decir $\psi_k(\vec{r}) \sim \exp\{-|\vec{r} - \vec{R}_k|/\xi\}$, siendo ξ la *longitud de localización*. El estado k está localizado en un entorno de \vec{R}_k , y por lo tanto cualquier excitación permanece cerca de la posición (espacio real) donde se la introdujo inicialmente.

Al incluir interacciones, es decir $\Delta > 0$, la dificultad del problema aumenta significativamente. Tal como discutimos en el Capítulo 4, el modelo interactuante $W = 0$, $J = 1$, $\Delta > 0$, puede producir equilibración al menos para diversas elecciones de estados iniciales y valores de Δ . En efecto, tal posibilidad de equilibrar se asocia con una dinámica deslocalizada o extendida, en la cual cualquier excitación puede difundir a lo largo del sistema de espines. Consideremos específicamente el caso $J = \Delta = 1$ y aumentemos progresivamente la magnitud del desorden W desde cero. Contrario a lo que sucede en el caso no-interactuante, el sistema permanece deslocalizado aún cuando $W > 0$ (pero no muy grande). Sin embargo, si el desorden es suficientemente grande, se produce una transición a un régimen localizado similar al caso estándar de Anderson (no interactuante). Por consiguiente, la transición MBL ocurre cuando W supera un valor crítico finito $W_c > 0$.

Si los autoestados en el sistema interactuante (muchos cuerpos) son extendidos ($W < W_c$), entonces debemos esperar que el sistema es lo suficientemente ergódico como para comportarse como su propio baño térmico. En tal caso, un único autoestado de energía puede usarse para calcular valores de expectación para observables de pocos cuerpos que coinciden con las predicciones evaluadas conforme a un ensamble térmico microcanónico. Esta observación significa que el sistema satisface la “hipótesis de termalización de autoestados” [RDO08], que a su vez es una de las condiciones requeridas para la equilibración de observables [GLTZ10, RS12]. Además, en esta fase las correlaciones (entrelazamiento) se propagan balísticamente en el sistema y la estadística de niveles se corresponde con el ensamble ortogonal Gaussiano. Muy por el contrario, si los autoestados están localizados ($W > W_c$), cualquier condición inicial de no-equilibrio permanecerá casi estática, y diremos que el sistema no puede equilibrar por sí mismo. Más aún, el entrelazamiento en esta fase se propaga logarítmicamente, la estadística de niveles responde a una ley de Poisson y pueden identificarse quasi-integrales de movimiento. Por lo tanto, la transición MBL se convierte en el umbral buscado entre comportamientos ergódicos y no ergódicos.

Recientemente se han utilizado diferentes estrategias para cuantificar la transición MBL. En vista de las dificultades para evaluar la dinámica de funciones de correlación en sistemas de muchos cuerpos interactuantes [ZPP08, BPM12], mucho progreso se ha logrado analizando la transición sobre la base de propiedades espectrales [OH07, PH10, AAS10, LS13]. De acuerdo con la Ref. [PH10] para $J = \Delta = 1$,

$$W_c = (3.5 \pm 1.0)J, \quad (5.2)$$

mientras que en la Ref. [LS13] se reporta la estimación

$$W_c = (2.7 \pm 0.3)J \quad (5.3)$$

5.3. La formulación LE

Con el propósito de evaluar el LE en el sistema de espines descrito por la Ec. (5.1), es necesario separar tal Hamiltoniano en dos términos siguiendo las ideas discutidas en el Capítulo 3. Es decir, algunos grados de libertad serán controlables y por lo tanto susceptibles de ser revertidos temporalmente, mientras que otros no podrán ser revertidos. En particular, dado que nuestra finalidad radica en estudiar la competencia entre las interacciones y el desorden, la reversión debería entonces *filtrar* la contribución de la energía cinética a la Ec. (5.1). En efecto, esta idea tiene su origen en la estrategia desarrollada en el Capítulo 3: deshacerse de la dinámica de “el sistema \mathcal{S} ” para cuantificar la decoherencia inducida por “la interacción \mathcal{SE} ”. Luego, el término reversible \hat{H}_0 es aquí el Hamiltoniano (integrable) XY ,

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N J \left[\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y \right] = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} J \left[\hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+ + \hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- \right], \quad (5.4)$$

que, siendo mapeable a dinámica de un cuerpo, describe la difusión de una excitación local a lo largo de un sistema 1D. Más precisamente, dado que se imponen condiciones de borde periódicas, \hat{H}_0 mapea vía la JWT a dos fermiones independientes (no interactuantes) [DPL04].

La integrabilidad de \hat{H}_0 se rompe por presencia de interacciones Ising y desorden diagonal, siendo ambos términos incluidos en el operador $\hat{\Sigma}$,

$$\hat{\Sigma} = \sum_{i=1}^N h_i \hat{S}_i^z + \sum_{i=1}^N \Delta \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z. \quad (5.5)$$

5. COMPETENCIA ENTRE INTERACCIONES Y DESORDEN EN UN SISTEMA DE MUCHOS CUERPOS

Para procurar la comparación con la literatura estándar de AL, notamos que aquí W es la mitad de la magnitud comúnmente usada para denotar al desorden de Anderson [KM93].

En los cálculos que se exponen abajo, salvo que se indique explícitamente lo contrario, $N = 12$ y $J = 1$ representa las unidades de energía.

5.4. La dinámica LE

Consideremos primero la dinámica del LE en presencia de desorden o interacciones por separado. Evaluamos Ec. (3.13) de acuerdo con las definiciones de \hat{H}_0 y $\hat{\Sigma}$ dadas por las Ecs. (5.4) y (5.5) respectivamente. Primero trataremos los casos $\{W = 0, \Delta \neq 0\}$ y $\{W \neq 0, \Delta = 0\}$. El caso general $\{W \geq 0, \Delta \geq 0\}$ se pospone a la Sección 5.5.

La autocorrelación $M_{1,1}(t)$ para $W = 0$ (sistema ordenado) se grafica en la Fig. 5.1 (a) y (b). Allí, la magnitud Δ de las interacciones aumenta desde cero hasta $\Delta = 5.5J$. El decaimiento a tiempos cortos se corresponde con la Ec. (3.27), es decir $1 - M_{1,1}(t) \propto t^4$, lo cual puede verificarse analíticamente expandiendo los operadores evolución hasta orden cuarto. Luego del régimen de tiempos cortos, el LE decae monótonamente debido a los términos no revertidos $\hat{\Sigma}$, tal como en el paradigma estándar discutido en la Sec. 3.4.2. Dado que no tenemos una forma funcional explícita para ajustar al decaimiento, definimos la escala de tiempo característica τ mediante la condición $M_{1,1}(\tau) = 2/3$. Las tasas $1/\tau$ se grafican en la Fig. 5.2 como función de Δ , para diferentes magnitudes de desorden W .

Luego del decaimiento, como se observa en la Fig. 5.1-(a), el LE satura en $1/N$, lo cual significa que la polarización inicial se ha distribuido uniformemente sobre todo el sistema de espines. Esto puede asimilarse con las observaciones realizadas en el Capítulo 3, es decir, procesos decoherentes ocasionan un desparramo irreversible de la polarización. Pero, si Δ aumenta significativamente, el decaimiento del LE se desacelera y evidencia colas largas, ver Fig. 5.1-(b). Estas colas destruyen la saturación al menos en la ventana temporal considerada. Tal régimen se asocia con una dinámica “vítrea” de la polarización, en la que una fuerte interacción Ising domina sobre los términos XY .

Si fijamos $\Delta = 0$ y aumentamos el desorden W , el problema se reduce al caso estándar de AL. En tal caso, la longitud de localización debe compararse con el ta-

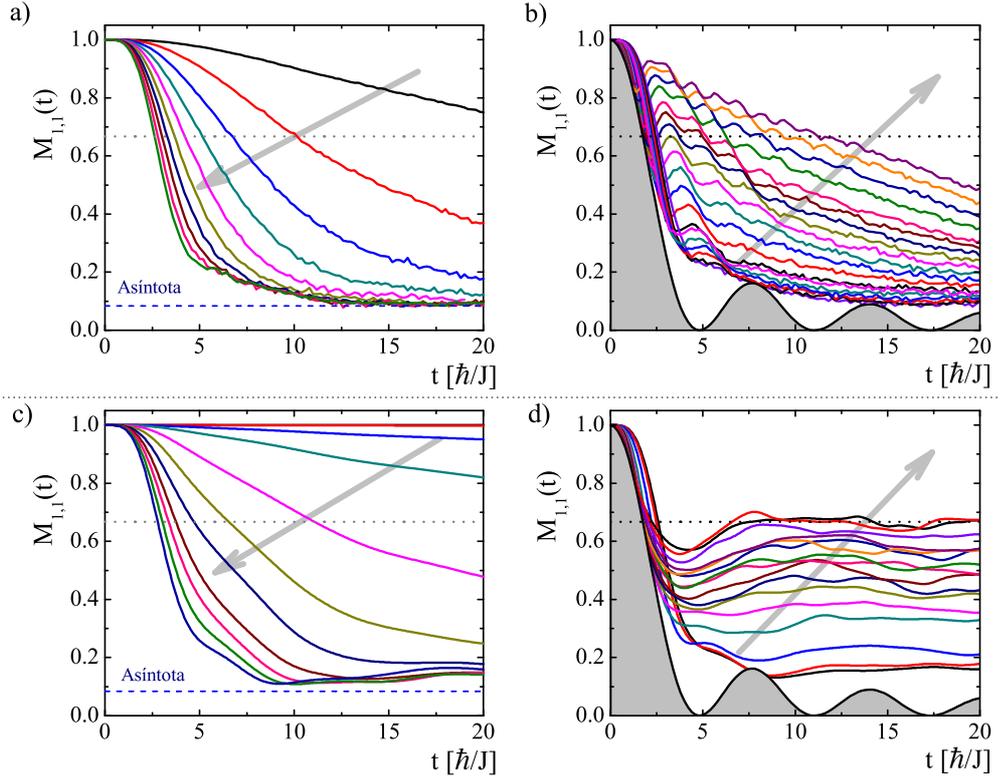


Figura 5.1: El LE en función del tiempo, para diferentes elecciones de parámetros. La escala de tiempo característica esta definida por el decaimiento de las curvas hasta $2/3$, indicándose con una línea horizontal punteada. En todos los casos, la flecha gris indica el orden creciente de la magnitud de la perturbación (ya sea Δ o W , según el caso). **(a)** $W = 0$, $0 < \Delta \lesssim 1.5J$. Decaimiento monótono, hasta alcanzar saturación (línea horizontal a trazos). **(b)** $W = 0$, $1.5J < \Delta < 4.8J$. Las colas largas en el LE destruyen la saturación. La SP dada por la Ec. (5.6) determina la escala de tiempo límite (región sombreada). **(c)** $\Delta = 0$, $0 < W \lesssim 1.0J$. La longitud de localización permanece mayor que el tamaño del sistema. **(d)** $\Delta = 0$, $1.0J < W < 5.5J$. La longitud de localización resulta menor que el tamaño del sistema, y por lo tanto la polarización permanece cerca del sitio 1.

5. COMPETENCIA ENTRE INTERACCIONES Y DESORDEN EN UN SISTEMA DE MUCHOS CUERPOS

maño finito del sistema. Luego, cuando el desorden es muy débil, el LE se degrada suavemente y eventualmente satura cerca de $1/N$ para tiempo largos. Esto se debe a que la longitud de localización ξ es mayor que el tamaño del sistema. Cuando el desorden es lo suficientemente grande, la longitud de localización es más pequeña que el tamaño del sistema, y por lo tanto la excitación inicial permanece muy cerca del sitio 1 para tiempos arbitrarios. En efecto, el cruce entre las dos situaciones físicas puede cuantificarse igualando el tamaño del sistema con la longitud de localización dada en aproximación FGR, $\xi \simeq 6J^2/W^2$ [KM93]. Esto resulta en $W = (\sqrt{2}/2)J$, lo cual concuerda razonablemente con el comportamiento que se muestra en las Figs. 5.1 (c) y (d).

Notar que en ningún caso, ya sea por interacciones Ising o por desorden de Anderson, el LE puede decaer más rápido que una escala de tiempo bien definida (ver Figs. 5.1 (b) y (d)). Esta escala está específicamente definida por la SP de una excitación local que evoluciona según \hat{H}_0 ,

$$P_{1,1}^0(2t) = 2 \langle \Psi_{neq} | \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) \hat{S}_1^z \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar) | \Psi_{neq} \rangle, \quad (5.6)$$

que es una función de autocorrelación “hacia adelante”. Enfatizamos además que la Ec. (5.6) no tiene dependencia en $\hat{\Sigma}$. Tal “límite de decaimiento” controlado por \hat{H}_0 tiene cierta semejanza con el PID experimental [LUP98] y el régimen Lyapunov en sistemas con correlato clásico caótico [JP01].

En la Fig. 5.2 mostramos el rol de la escala de tiempo dada por la Ec. (5.6), actuando como límite para las escalas de decaimiento del LE. Se obtienen resultados similares para modelos con interacciones nnn (tanto en \hat{H}_0 como en $\hat{\Sigma}$), siempre que $\hat{\Sigma}$ tenga sólo términos Ising o desorden diagonal (es decir, $[\hat{\Sigma}, \hat{S}_1^z] = 0$).

5.5. Ruptura de ergodicidad inducida por competencia de interacciones y desorden

5.5.1. Un diagrama de fases dinámico

Para cuantificar ergodicidad en la dinámica de nuestro observable, calculamos el LE promedio $\bar{M}_{1,1}$:

$$\bar{M}_{1,1}(T) = \frac{1}{T} \int_0^T M_{1,1}(t) dt. \quad (5.7)$$

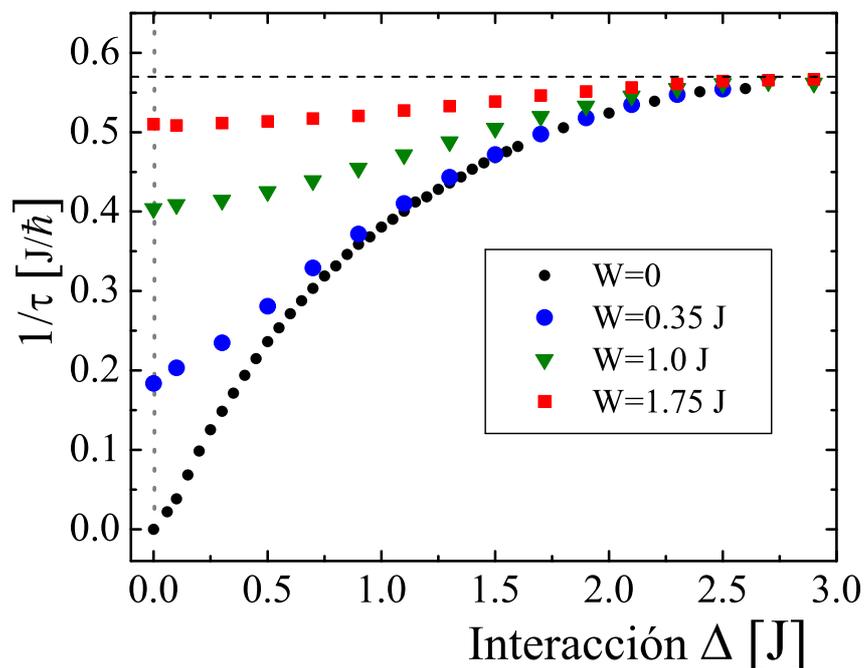


Figura 5.2: Las tasas de decaimiento del LE como función de la magnitud Δ de las interacciones Ising, para diferentes valores del desorden W . La línea horizontal a trazos representa la escala de tiempo de la SP (\hat{H}_0), es decir, Ec. (5.6). Los datos para $\Delta = 0$ fueron obtenidos para dinámicas de una partícula con 500 realizaciones de desorden, mientras que para $\Delta > 0$ se realizaron simulaciones de muchos cuerpos con 10 realizaciones de desorden. La suavidad del empalme evidencia la robustez de las simulaciones numéricas.

5. COMPETENCIA ENTRE INTERACCIONES Y DESORDEN EN UN SISTEMA DE MUCHOS CUERPOS

El análisis estándar del problema de AL implicaría el cálculo de $\lim_{T \rightarrow \infty} \bar{M}_{1,1}(T)$. Sin embargo, dado que nuestro cálculo involucra sistemas finitos, es de esperar que recurrencias dinámicas (ME) aparezcan al tiempo de Heisenberg T_H . Como tales recurrencias son ajenas a nuestro análisis del caso ideal $N \rightarrow \infty$, restringimos nuestro estudio a $T < T_H$. Las estimaciones de T_H se discutieron en la Sección 3.4.1.

Especifiquemos algunos detalles que permitan la reproducción de la simulación numérica. Evaluamos la Ec. (5.7) barriendo ambos Δ y W en el intervalo $[0, 5J]$, considerando incrementos de $0.2J$ en ambas cantidades. Las regiones paramétricas más relevantes se exploraron usando saltos de $0.1J$. Para cada juego de parámetros, se promediaron 10 realizaciones de desorden, cada una de las cuales tiene segundo momento $\langle h^2 \rangle = W^2/3$. Para el caso no interactuante $\Delta = 0$, es decir el problema AL, se promediaron 500 realizaciones de desorden. Con el propósito de mantener bajas fluctuaciones estadísticas, se realizó un promedio de extra de 10 realizaciones del estado $|\Psi_{neq}\rangle$ definido en la Ec. (3.14). Este promedio se realiza sorteando la fase φ_i en el rango $[0, 2\pi)$.

La Fig. 5.3 muestra el diagrama de fases dinámico para el LE. Está dada por un gráfico de niveles de $\bar{M}_{1,1}$ en $T = 12\hbar/J$, como función de la interacción Δ y la magnitud del desorden W . Las estimaciones de la transición MBL dadas por las Ecs. (5.2) y (5.3) también se indican en el diagrama.

5.5.2. El análisis del diagrama de fases y el rol de las incertezas de energía

En la Fig. 5.4 redibujamos el diagrama de fases dinámico con la finalidad de estudiar su estructura, indicando cada fase y algunas líneas críticas. En el diagrama, cinco regiones (fases) se identifican de acuerdo con el mecanismo predominante: *decoherente*, *ergódica*, *vítrea*, *localización de Anderson*, y *localización de muchos cuerpos*.

Para valores pequeños de ambos Δ y W , el sistema es casi reversible y la dinámica está dada por la propagación de una partícula. En tal caso, $\bar{M}_{1,1}$ permanece muy cerca de 1. Esto significa que a pesar de pequeñas perturbaciones de fase, la excitación local puede volver a su posición original vía la reversión de \hat{H}_0 . En consecuencia, la región paramétrica ubicada en la esquina inferior izquierda puede asociarse con *decoherencia*, es decir, algún tipo de onda de espín débilmente perturbada por el control imperfecto en los grados de libertad internos [MBSH⁺97, FAP15].

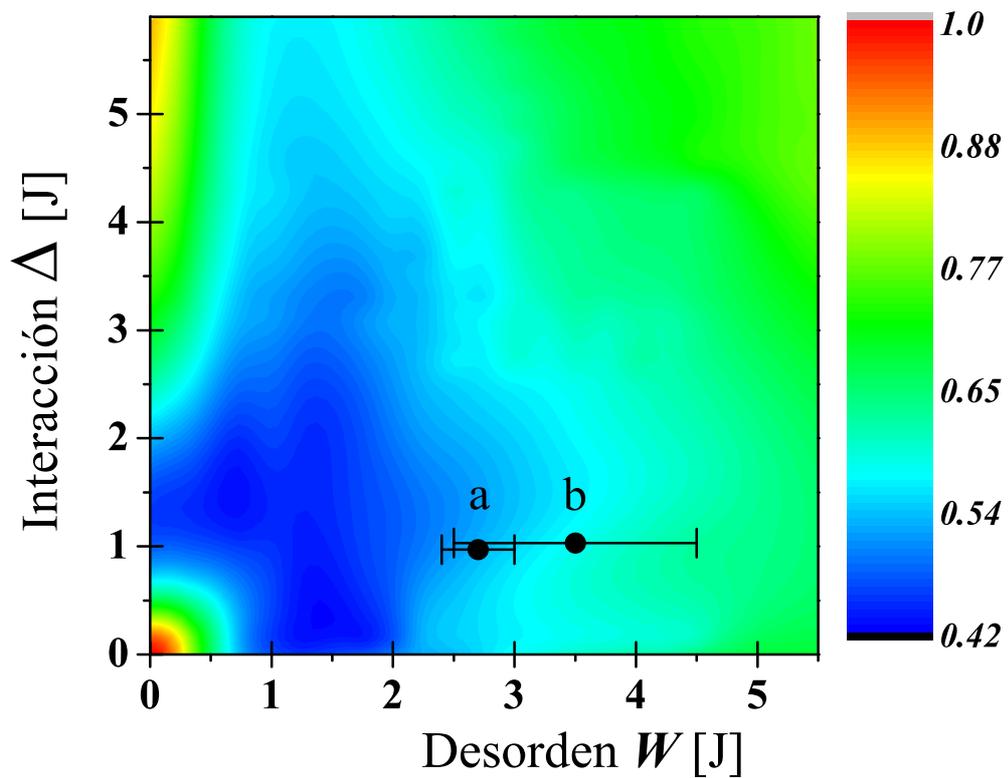


Figura 5.3: Diagrama de fases dinámico para $\bar{M}_{1,1}(T)$ en $T = 12\hbar/J$. El punto (a) está dado por la Ec. (5.3), es decir, la transición MBL que se reporta en la Ref. [LS13]. El punto (b) corresponde a la Ec. (5.2), es decir, la transición que se reporta en la Ref. [PH10]. Estos puntos están corridos ligeramente en el gráfico respecto a $\Delta = 1.0J$ para evitar su solapamiento.

5. COMPETENCIA ENTRE INTERACCIONES Y DESORDEN EN UN SISTEMA DE MUCHOS CUERPOS

Si W o Δ aumentan, la propagación de la excitación local sufre de los efectos de $\hat{\Sigma}$ bajo la forma de múltiples eventos de *scattering* con el potencial desordenado o con los otros espines, respectivamente. Entonces la excitación entra en un régimen difusivo donde rápidamente se desparrama a lo largo del sistema. Precisamente, la polarización queda distribuida uniformemente, $2\langle\hat{S}_j^z\rangle = 1/N$ para todo j . Dado que ese *scattering* no puede revertirse, el desparramo se vuelve irreversible. Consistentemente, la región azulada está asociada con un comportamiento *ergódico* de la polarización. El límite ideal $\bar{M}_{1,1}(T \rightarrow \infty) \rightarrow 1/N$ se verifica a menos de un *offset* numérico que viene de la dinámica transitoria del LE.

En el caso $W = 0$, un fuerte incremento en Δ implica la predominancia de la interacción Ising por sobre los términos XY , lo cual “congela” la dinámica de polarización. Dado que la difusión inducida por \hat{H}_0 resulta entonces drásticamente limitada, $\bar{M}_{1,1}$ permanece trivialmente alto. Este comportamiento se interpreta como una dinámica *vítrea* con tiempos de relajación muy largos. De hecho, este tipo de localización corresponde a una variante (de temperatura infinita) de la fase aislante de Mott [Mot68]. Además, el contraste de colores en proximidad de $\Delta \gtrsim 2J$ sugiere una transición vítrea-ergódica que resultaría abrupta incluso para desorden no nulo ($W \lesssim 1.0J$). En otras palabras, la inclusión de desorden provocaría una genuina transición de fase (abrupta en el TL) entre una fase vítrea (no-ergódica) y una ergódica. Sin embargo, dado que la dinámica transitoria es muy lenta, un *finite size scaling* confiable en esta región paramétrica requeriría tiempos de cálculo excesivamente largos para capturar cómo el desorden afecta a una dinámica vítrea.

Podemos esgrimir un argumento dimensional para estimar la línea crítica que separa la fase vítrea y la ergódica. En efecto, la transición de Mott típicamente ocurre cuando la magnitud de la interacción Δ es comparable con el ancho de banda $B = 2J$. Tal valor específico de interacción se señala en la Fig. 5.4 con un círculo relleno negro. Si agregamos un pequeño desorden, éste introducirá una incerteza δE en los niveles de energía que terminaría por ensanchar la banda B . Para estimar el ensanche, usamos la escala de tiempo τ asociada a esa escala de energía $\delta E = \hbar/(2\tau)$, que a su vez puede evaluarse vía la FGR. Con ese propósito, consideramos una excitación *local* que puede “escapar” ya sea a su derecha o a su izquierda, donde habría dos cadenas *tight binding*

5.5 Ruptura de ergodicidad inducida por competencia de interacciones y desorden

semi-infinitas acopladas simétricamente. Luego,

$$\frac{1}{\tau} = 2 \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{W^2}{3} \right) N_{1s}(\varepsilon). \quad (5.8)$$

Aquí, como dijimos arriba, $W^2/3$ representa el segundo momento de la distribución de desorden. El factor 2 viene de los dos decaimientos alternativos (derecha y izquierda). Además, $N_{1s}(\varepsilon)$ es la LDoS de superficie de una cadena semi-infinita con elemento de *hopping* $J/2$, tal como se define en la Ec. (2.31).

Asociamos a los niveles de energía un ensanchamiento Lorentziano, que evaluado en el centro de banda $\varepsilon = 0$, resulta:

$$\delta E = \frac{\hbar}{2\tau} = \frac{4}{3} \frac{W^2}{J} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{J} \right)^2} \Big|_{\varepsilon=0} = \frac{4}{3} \frac{W^2}{J}. \quad (5.9)$$

Dado que la mitad de los estados están en el rango $B + 2\delta E$, nuestra estimación a la línea crítica para la transición tipo Mott es:

$$\Delta_c(W) \sim B + 2\delta E \sim 2J + \frac{8}{3} \frac{W^2}{J}, \quad (5.10)$$

que se muestra en la Fig. 5.4 como línea a trazos.

Una dependencia funcional similar a la que proponemos en la transición vítreo-ergódica fue conjeturada por Kimball para el sistema electrónico en el estado fundamental [Kim81]. Además, resulta importante mencionar que una expectativa ingenua acerca de la morfología del diagrama de fases sería una estructura semi circular. De hecho, ese tipo de comportamientos es común para competencias entre dos magnitudes, por ejemplo el caso de campo magnético vs. temperatura en el diagrama de fases del superconductor tipo I. Una de las implicancias más relevantes entonces de la reentrancia de la fase ergódica para Δ grande, es descartar la expectativa de un diagrama circular.

Si $\Delta = 0$, como dijimos, el problema se reduce a AL en sentido estricto. Aquí, una estimación de la longitud de localización será razonable en tanto y en cuanto sea menor que el tamaño finito del sistema. Ese no es el caso para desorden débil, situación en la cual el LE se degrada suavemente como función del tiempo (no se puede distinguir de una dinámica difusiva). Cuando el desorden es suficientemente grande, la longitud de localización se vuelve comparable con el tamaño del sistema y por lo tanto la excitación inicial no puede desparramarse.

5. COMPETENCIA ENTRE INTERACCIONES Y DESORDEN EN UN SISTEMA DE MUCHOS CUERPOS

En sentido estricto, aun cuando los sistemas 1D están siempre localizados para cualquier desorden finito (es decir, $W_c = 0$), existen dos mecanismos diferentes que contribuyen a la localización. Uno de ellos es la llamada “localización fuerte”, es decir la convergencia, término por término, de una teoría de perturbaciones para las GF locales. El otro es la llamada “localización débil”, originada en las interferencias entre caminos de perturbación largos. Esto último mecanismo fue una idea difícil de acuñar, tanto numérica como analíticamente, hasta la teoría de *scaling* de la conductancia desarrollada por la “*gang of four*” (“pandilla de los cuatro”) [AALR79]. La localización débil es particularmente relevante en sistemas 1D y 2D. Cuando esos sistemas son de tamaño finito, la dinámica permanece difusiva y casi completamente ergódica. En efecto, tal es precisamente nuestro caso. Ni bien $\Delta \gtrsim 0$ las degeneraciones se rompen por presencia de las interacciones y la dimensionalidad efectiva del espacio de Hilbert accesible aumenta. Precisamente allí se originan las diferencias con el caso AL. Si bien desconocemos el comportamiento preciso en la proximidad de $\Delta = 0$, la competencia entre Δ y W termina por producir una transición (deslocalizado a localizado) en un valor $W_c(\Delta) > 0$, similar a lo que ocurriría en AL para una red de alta dimensionalidad. En efecto, la transición MBL se produce al aumentar W para $\Delta > 0$ fijo.

Se aprecia además que la localización por desorden se debilita para $1.0J \lesssim \Delta \lesssim 2.0J$, dado que la región ergódica se extiende para valores mayores de W . Nuevamente, dado que consideramos un sistema finito, nuestro observable evidencia un cruce suave de la fase ergódica a la localizada, en la cual la excitación no difunde. Ese cruce corresponde con la transición MBL, que resulta genuinamente abrupta en el TL [OH07, ZPP08, PH10, BPM12, LS13].

Tal como discutimos en la Sec. 5.5.1, $T \lesssim T_H \propto N$, y por lo tanto aumentar N en nuestras simulaciones (por ejemplo 10, 12 y 14) nos permitiría un tiempo de integración T más largo. En efecto, para $\Delta \sim 1.0J$, verificamos que, a ambos lados de la transición MBL, $\bar{M}_{1,1}$ se comporta de la manera esperada. En la fase ergódica, tiene el comportamiento asintótico correspondiente a la equilibración $\bar{M}_{1,1} \sim 1/N$, mientras que en la fase localizada (W grande) satura en $\bar{M}_{1,1} \sim 1/\xi$ independientemente de N . La viabilidad de un *finite size scaling* radica en que $\partial\bar{M}_{1,1}/\partial W$ aumenta con N . Sin embargo, nuestro rango de valores N accesibles no es suficiente para escalar $\bar{M}_{1,1}(T)$ y obtener así valores críticos precisos para la transición MBL.

En analogía con la transición de Mott, un argumento dimensional puede esgrimirse para estimar la línea crítica $W_c(\Delta)$. Aun cuando no hay transición de fase en el sistema 1D no interactuante $\Delta = 0$, se espera que la introducción de interacciones rompa las limitaciones 1D. Consideramos entonces como punto singular al valor de transición para dimensionalidad alta, que tal como en Mott, ocurre cuando la magnitud del desorden es comparable con el ancho de banda[Zim69]

$$W_c(\Delta)|_{\Delta=0} = (e/2)B. \quad (5.11)$$

Este valor de desorden se señala en la Fig. 5.4 como un círculo vacío, dado que no corresponde a un punto crítico genuino del problema 1D. Nuevamente, incluir interacciones introducirían incertezas de energía que ensancharían la banda consistentemente. En este caso, la incerteza δE está asociada a la vida media introducida por las interacciones Ising. La evaluación FGR de tal escala de tiempo viene dada por la Ec. (2.50) y resulta:

$$\frac{1}{\tau} = 2\frac{2\pi}{\hbar}\Delta^2\frac{4}{3\pi^2 J}. \quad (5.12)$$

Como antes, el factor 2 extra viene de las dos contribuciones de cadenas semi-infinitas (a derecha e izquierda). El factor $4/(3\pi^2 J)$ viene de la correspondiente LDoS, tal como en la Ec. (2.63), evaluada en $\varepsilon = 0$. Luego,

$$\delta E = \frac{\hbar}{2\tau} = \frac{8}{3\pi}\frac{\Delta^2}{J}. \quad (5.13)$$

Esta incerteza agranda el ancho de banda y por consiguiente nuestra estimación dimensional de la línea crítica para la transición MBL es:

$$W_c(\Delta) \sim \frac{e}{2}(B + 2\delta E) \sim \frac{2.71}{2}\left(2J + \frac{16}{3\pi}\frac{\Delta^2}{J}\right), \quad (5.14)$$

que se dibuja en la Fig. 5.4 como una línea a trazos que comienza en el círculo vacío.

5.6. Conclusiones

Hemos simulado la dinámica del LE en un sistema de espines con presencia de interacciones y desorden, para un amplio rango de competencia entre tales procesos. Esta evaluación numérica nos permitió construir un diagrama de fases que evidencia las regiones paramétricas ergódicas y no-ergódicas. Mientras que las primeras implican la

5. COMPETENCIA ENTRE INTERACCIONES Y DESORDEN EN UN SISTEMA DE MUCHOS CUERPOS

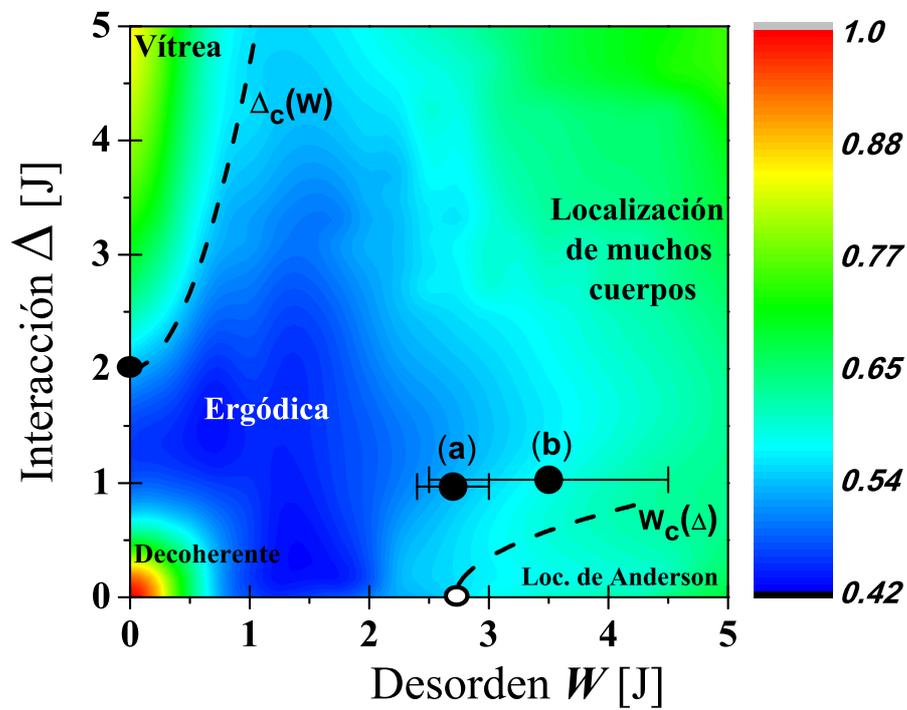


Figura 5.4: El diagrama de fases dinámico con las principales regiones indicadas: decoherente, vítrea, ergódica, localización de muchos cuerpos, y localización de Anderson. Las estimaciones de las líneas críticas $\Delta_c(W)$ y $W_c(\Delta)$ se dibujan de acuerdo con las Ecs. (5.10) y (5.14) respectivamente.

posibilidad de equilibración, las segundas implican que el sistema no puede equilibrar (al menos permaneciendo cerrado). Los comportamientos no ergódicos se clasificaron y discutieron en términos de dinámica vítrea, localización de Anderson estándar, y localización de muchos cuerpos. Basándonos en el cálculo de incertezas de energía introducidas por desorden e interacciones (débiles), pudimos estimar las líneas críticas que separan tales fases. El acuerdo entre las líneas críticas estimadas y el diagrama dinámico del LE es considerablemente bueno.

La naturaleza estrictamente local de nuestro observable constituye una limitación importante a la hora de realizar un *finite size scaling* que arroje valores críticos para las transiciones de fase. A pesar de ello, nuestra estrategia permitió identificar una posible transición vítrea-ergódica inducida por introducción de desorden. Además, resulta prometedor investigar diferentes topologías de acoplamientos y diferentes maneras de romper integrabilidad. Por último, pero no menos importante, dado el estado del arte en NMR [FL05, MOB12], resaltamos la potencialidad de las funciones de correlación de alta temperatura, como el LE, en el rol de testigos dinámicos relevantes para estudiar transiciones de fase en general [ZCC⁺09] y en particular la transición MBL [FL05, AS10, ASK15].

Las contribuciones originales de este Capítulo fueron publicadas en:

“Interaction-disorder competition in a spin system evaluated through the Loschmidt echo”, Pablo R. Zangara, Axel D. Dente, Aníbal Iucci, Patricia R. Levstein, Horacio M. Pastawski, *Phys. Rev. B* **88**, 195106 (2013).

“Role of energy uncertainties in ergodicity breaking induced by competing interactions and disorder. A dynamical assessment through the Loschmidt echo”, Pablo R. Zangara, Patricia R. Levstein, Horacio M. Pastawski, *Papers in Physics* **7**, 070012 (2015).

5. COMPETENCIA ENTRE INTERACCIONES Y DESORDEN EN UN SISTEMA DE MUCHOS CUERPOS

Capítulo 6

Del LE local al LE global

Este Capítulo constituye un paso más allá de la formulación y evaluación del LE efectuadas los Capítulos 3 y 5. Pondremos especial énfasis en el juego de escalas de tiempo con trasfondo experimental. Además, estudiaremos la relación entre la autocorrelación de un espín, es decir el LE local, y la definición estándar del LE: el módulo cuadrado del producto interno entre funciones de onda. La extensión de esta última magnitud para sistemas de muchos cuerpos define en consecuencia al LE global o “LE de muchos cuerpos”. Propondremos ideas operacionales para relacionar ambas magnitudes, incluso en un eventual experimento.

6.1. Atando cabos sueltos

Inspirados en los experimentos de NMR, definimos en el Capítulo 3 el LE como una función de autocorrelación de espín $M_{1,1}(t)$. Allí, $M_{1,1}(t)$ se empleaba como un testigo dinámico para cuantificar decoherencia. En el Capítulo 5, la misma magnitud se empleó para estudiar fenómenos de localización. Aquí, presentaremos el LE en mayor detalle, con un doble propósito. Por un lado, analizaremos la relación entre $M_{1,1}(t)$ y la versión ampliamente usada del LE, el *overlap* entre funciones de onda [JP01, JSB01, JAB02]. Por otro lado, discutiremos una imagen general del decaimiento de $M_{1,1}(t)$ compatible con las observaciones experimentales.

Dado que $M_{1,1}(t)$ representa una polarización local, será referido aquí como el LE *local*. Ya discutimos en la Sec. 3.4.1, que en el caso de una excitación en una cadena 1D con interacciones XY, $M_{1,1}(t)$ coincide precisamente con el *overlap* de dos funciones de

6. DEL LE LOCAL AL LE GLOBAL

onda de una partícula. Sin embargo, este no es el caso general. De hecho, el cuadrado del producto interno entre dos funciones de onda de muchos cuerpos define ¹ un LE *global* o *de muchos cuerpos*, $M_{MB}(t)$. Resulta importante notar que $M_{MB}(t)$ no ha sido estudiado experimentalmente, pero constituye un objeto de natural interés para la teoría (ver, por ejemplo, [Pro07, THVS14, THS14b]). En consecuencia, es necesario establecer la relación precisa entre el objeto de estudios teóricos y el de relevancia experimental, es decir $M_{MB}(t)$ y $M_{1,1}(t)$ respectivamente. Esta conexión faltante será la pregunta central en este Capítulo.

En primer lugar, derivaremos $M_{MB}(t)$ como una de las contribuciones no locales de $M_{1,1}(t)$. Más aún, evaluaremos la dependencia en N o extensividad de $M_{MB}(t)$ y cómo tal propiedad se evidencia en las escalas de tiempo involucradas. Esto nos lleva a plantear que refocalizar (luego de la reversión) el estado de muchos espines resulta como consecuencia de recuperar la configuración de cada espín individualmente, esencialmente como si se tratara de eventos estadísticamente independientes. Dado que en el estado inicial de alta temperatura hay $N/2$ espines *up*, la independencia estadística implicaría un comportamiento de la forma $M_{MB} \sim (M_{1,1})^{N/4}$. Esta relación es exacta para tiempos muy cortos. Para tiempos largos, la independencia estadística falla pero la extensividad permanece válida, tal como confirmamos mediante la evaluación numérica en un sistema específico.

Discutiremos además un panorama general del decaimiento del LE, partiendo desde el régimen a tiempos cortos. Analizaremos las expectativas de juego relativo entre la escala de tiempo que caracteriza las interacciones reversibles (T_2) y aquella que caracteriza la perturbación (τ_Σ). En última instancia, esto da origen a la escala de tiempo observada experimentalmente, T_3 . En tal sentido, el análisis que realizaremos sirve de bisagra conceptual entre los dominios teóricos y experimentales.

Finalmente, usaremos una dinámica unitaria de “preparación” para transformar la excitación local en un estado correlacionado que sirva de estado inicial para un procedimiento de reversión. Más precisamente, proponemos y analizamos un protocolo que inicia con una excitación local, luego crea correlaciones vía una evolución idealmente reversible, y a partir de allí se continúa en una reversión temporal perturbada. La

¹La definición precisa, compatible con el estado inicial definido en la Ec. (3.1), involucra un promedio. Mostraremos esto explícitamente en la Sec. 6.2.

reversión perfecta de la preparación da lugar a una medición local. Este LE dinámicamente preparado (DPLE) codifica la “sensibilidad” de estados correlacionados usando una única medición local. Esta idea constituye un vínculo operacional entre el LE local y el global. Más aún, provee una descripción sistemática de la reversibilidad del estado de un sistema de muchos cuerpos a medida que el grado de correlaciones se incrementa progresivamente en función del tiempo de preparación. Confirmamos que el DPLE decae más rápidamente a medida que el tiempo de preparación aumenta, lo cual resulta en acuerdo con la idea preliminar de “mientras más correlacionado, más frágil ante perturbaciones”. Si la dinámica de preparación es capaz de producir la equilibración de la polarización (tal como en el caso de difusión de espín), el decaimiento del DPLE coincide con el LE global de un estado de superposición aleatoria [ADLP08], en el cual no se realiza preparación. Esto significa que las fases específicas de los estados preparados son básicamente innecesarias, una idea que surgirá nuevamente en el Capítulo 7.

6.2. Las contribuciones no-locales al LE local

Retomemos la formulación del LE desde la Sec. 3.2. Primero, definimos la siguiente probabilidad promedio:

$$\Pi_{1,1}(t) = \sum_{i \in A} \sum_{j \in A} \frac{1}{2^{N-1}} \left| \langle \beta_j | \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \right|^2, \quad (6.1)$$

la cual representa la probabilidad que el 1^{er} espín permanezca *up* luego de la evolución dada por $\hat{U}_{LE}(t)$. Luego, la Ec. (3.10) puede reescribirse en la forma:

$$M_{1,1}(t) = 2 \left[\Pi_{1,1}(t) - \frac{1}{2} \right]. \quad (6.2)$$

También podemos verificar que:

$$M_{1,1}(t) = \left[\sum_{i \in A} \frac{1}{2^{N-1}} \left(\left| \langle \beta_i | \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \right|^2 + \sum_{j \in A (j \neq i)} \left| \langle \beta_j | \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \right|^2 - \sum_{j \in B} \left| \langle \beta_j | \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \right|^2 \right) \right]. \quad (6.3)$$

6. DEL LE LOCAL AL LE GLOBAL

Aquí, recordamos que el conjunto de índices \mathcal{A} etiqueta los estados de la base (computacional Ising) que tienen el 1^{er} espín *up*, es decir $j \in \mathcal{A} \Leftrightarrow \hat{S}_1^z |\beta_j\rangle = +\frac{1}{2} |\beta_j\rangle$. Además, \mathcal{B} representa el complemento de \mathcal{A} , es decir $j \in \mathcal{B} \Leftrightarrow \hat{S}_1^z |\beta_j\rangle = -\frac{1}{2} |\beta_j\rangle$. Luego, podemos identificar naturalmente los dos términos que contribuyen a $M_{1,1}(t)$. En efecto, la primera suma en la Ec. (6.3) representa la probabilidad promedio de reobtener un estado la base, que denotamos con $M_{MB}(t)$,

$$M_{MB}(t) = \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left| \langle \beta_i | \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \right|^2. \quad (6.4)$$

La segunda suma en la Ec. (6.3) representa la probabilidad promedio de cambiar la configuración de cualquier espín exceptuando al 1^{ero}. La tercera suma representa la probabilidad promedio de que el 1^{er} espín haya efectivamente cambiado a *down* (que haya “flikeado”), es decir, todos aquellos procesos que no contribuyen a $M_{1,1}(t)$. Luego, los procesos que sí contribuyen a $M_{1,1}(t)$ pero no a $M_{MB}(t)$ se denotan como:

$$M_X(t) = \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left(\sum_{j \in \mathcal{A} (j \neq i)} \left| \langle \beta_j | \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \right|^2 - \sum_{j \in \mathcal{B}} \left| \langle \beta_j | \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \right|^2 \right), \quad (6.5)$$

Este balance de probabilidades conlleva finalmente al comportamiento asintótico apropiado para $M_{1,1}(t)$ de acuerdo con las simetrías que restringen la evolución. La identificación

$$M_{1,1}(t) = M_{MB}(t) + M_X(t) \quad (6.6)$$

es un paso muy importante para las próximas discusiones.

6.3. Una descripción general del decaimiento del LE

En esta Sección introduciremos algunas de las principales ideas físicas subyacentes en la dinámica de la autocorrelación $M_{1,1}(t)$. Los argumentos aquí expuestos van más allá de cualquier evaluación del LE en un modelo particular, y contribuyen a una representación pictórica de un experimento real.

6.3.1. Expansiones a tiempos cortos

Con el propósito de analizar la dependencia en N del LE y sus escalas de tiempo, calculamos aquí la expansión a tiempos cortos de las magnitudes $M_{1,1}(t)$, $M_{MB}(t)$ y

6.3 Una descripción general del decaimiento del LE

$M_X(t)$. Tal como en la Ec. (3.26), hasta 2^{do} orden en tiempo,

$$\begin{aligned} M_{1,1}(t = 2t_R) &= 2 \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \langle \beta_i | \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \\ &= 1 - (t/\hbar)^2 \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left(\langle \beta_i | \hat{\Sigma}^2 | \beta_i \rangle - 2 \langle \beta_i | \hat{\Sigma} \hat{S}_1^z \hat{\Sigma} | \beta_i \rangle \right) + \mathcal{O} \left((t/\hbar)^3 \right). \end{aligned} \quad (6.7)$$

Análogamente, las contribuciones dominantes en $M_{MB}(t)$ y $M_X(t)$ son:

$$\begin{aligned} M_{MB}(t) &= \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left| \langle \beta_i | \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \right|^2 \\ &= 1 - (t/\hbar)^2 \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left(\langle \beta_i | \hat{\Sigma}^2 | \beta_i \rangle - \langle \beta_i | \hat{\Sigma} | \beta_i \rangle^2 \right) + \mathcal{O} \left((t/\hbar)^3 \right), \end{aligned} \quad (6.8)$$

y

$$\begin{aligned} M_X(t) &= \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left(\sum_{j \in \mathcal{A} \ (j \neq i)} \left| \langle \beta_j | \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \right|^2 - \sum_{j \in \mathcal{B}} \left| \langle \beta_j | \hat{U}_{LE}(t) | \beta_i \rangle \right|^2 \right) \\ &= (t/\hbar)^2 \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left(2 \langle \beta_i | \hat{\Sigma} \hat{S}_1^z \hat{\Sigma} | \beta_i \rangle - \langle \beta_i | \hat{\Sigma} | \beta_i \rangle^2 \right) + \mathcal{O} \left((t/\hbar)^3 \right). \end{aligned} \quad (6.9)$$

Tal como en la Ec. (3.19), consideremos una perturbación genérica $\hat{\Sigma}$ dada por un Hamiltoniano con anisotropía α ,

$$\hat{\Sigma} = \sum_{i,j}^N (J_\Sigma)_{ij} \left[2\alpha \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \left(\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y \right) \right]. \quad (6.10)$$

Entonces, las siguientes identidades pueden verificarse:

$$\sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \langle \beta_i | \hat{\Sigma}^2 | \beta_i \rangle = 2N\sigma^2 \left(\frac{\alpha^2}{4} + \frac{1}{8} \right), \quad (6.11)$$

$$\sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \langle \beta_i | \hat{\Sigma} \hat{S}_1^z \hat{\Sigma} | \beta_i \rangle = 2N\sigma^2 \left(\frac{\alpha^2}{8} + \frac{1}{16} \right) - \frac{1}{2}\sigma^2, \quad (6.12)$$

$$\sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \langle \beta_i | \hat{\Sigma} | \beta_i \rangle^2 = 2N\sigma^2 \frac{\alpha^2}{4}. \quad (6.13)$$

Aquí, σ^2 es el segundo momento local promedio de $\hat{\Sigma}$,

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\sum_{j(\neq i)}^N \left(\frac{(J_\Sigma)_{ij}}{2} \right)^2 \right]. \quad (6.14)$$

6. DEL LE LOCAL AL LE GLOBAL

Notemos que la definición de σ^2 es consistente con las Ecs. (3.26) y (3.30). Siendo una *perturbación*, σ^2 debe ser mucho menor que el segundo momento local promedio σ_0^2 del Hamiltoniano no perturbado \hat{H}_0 . En términos de escalas de tiempo,

$$T_2 \equiv \hbar/\sqrt{\sigma_0^2} \ll \hbar/\sqrt{\sigma^2} \equiv \tau_\Sigma. \quad (6.15)$$

Aquí, hemos introducido la escala de tiempo característica del Hamiltoniano no perturbado, que en los experimentos es T_2 ; y la de la perturbación, τ_Σ . De las identidades en las Ecs. (6.11), (6.12) y (6.13) se sigue que

$$M_{1,1}(t) = 1 - (t/\tau_\Sigma)^2 + \mathcal{O}\left((t/\hbar)^3\right), \quad (6.16)$$

y,

$$M_{MB}(t) = 1 - \frac{1}{4}N (t/\tau_\Sigma)^2 + \mathcal{O}\left((t/\hbar)^3\right), \quad (6.17)$$

$$M_X(t) = \left(\frac{N-4}{4}\right) (t/\tau_\Sigma)^2 + \mathcal{O}\left((t/\hbar)^3\right). \quad (6.18)$$

Estas expansiones son válidas para $t < (\tau_\Sigma/N)$ y cuando $[\hat{\Sigma}, \hat{S}_1^z] \neq 0$. Luego de este régimen de tiempos muy cortos, un término genérico en la expansión de $M_{1,1}(t)$ será de la forma

$$c_{(N,n)} t^n / \left(\tau_\Sigma^k T_2^{n-k}\right) \quad (6.19)$$

con $k \geq 2$ y el coeficiente $c_{(N,n)}$ descrito por números combinatorios de tamaño creciente que dependen de la topología de interacciones (ver, por ejemplo, [SAL⁺14, DGSZ15]). Dado que el escenario experimental se corresponde con el límite descrito por la Ec. (6.15), esta expansión estará dominada por los términos con el orden más bajo posible en la interacción débil, es decir $k = 2$:

$$(t/\tau_\Sigma)^2 \left[1 + \sum_n c_{(N,n)} (t/T_2)^{n-2} \right]. \quad (6.20)$$

La ecuación (6.20) sugiere que tras los tiempos muy cortos, es decir para $(\tau_\Sigma/N) < t < \tau_\Sigma$, la dependencia en τ_Σ se vería sustituida por términos divergentes en la escala T_2 . Esto podría llevar a una nueva escala de tiempo, T_3 , que experimentalmente se observa muy ligada a T_2 :

$$T_2 \lesssim T_3 \ll \tau_\Sigma. \quad (6.21)$$

6.3 Una descripción general del decaimiento del LE

En algún sentido, T_3 se convierte en una escala característica de la complejidad o “caos” del sistema de espines, que amplifica el efecto de cualquier pequeña perturbación. Resulta importante remarcar que, siendo una observación experimental, la Ec. (6.21) se corresponde con un sistema compuesto por un número *macroscópicamente* grande de espines. En otras palabras, la Ec. (6.21) representa una relación de escalas de tiempo válida en el TL. Por el contrario, cualquier evaluación numérica involucra un número de espines finito (y en rigor de verdad, muy pequeño). En este último caso, el tiempo característico de irreversibilidad T_3 estará irremediamente dado por τ_Σ . Esta es la razón por la cual el decaimiento del LE evaluado en un sistema finito será siempre dependiente de perturbación. Nuestra *hipótesis central de irreversibilidad* precisamente radica en postular la Ec. (6.21) como una propiedad *emergente*. En este contexto, el TL requiere tomar el límite $N \rightarrow \infty$ primero, y luego $\tau_\Sigma \rightarrow \infty$. La no-uniformidad de estos límites juega un papel crucial en las transiciones de fase cuánticas [And78, Pas07]. En el Capítulo 7 volveremos sobre estas ideas.

La descripción general expuesta se representa esquemáticamente en la Fig. 6.1. Allí, mostramos el juego esperado entre $M_{MB}(t)$ y $M_X(t)$ y la correlación resultante, $M_{1,1}(t)$. De hecho, tal como se plantea en las Ecs. (6.17) y (6.18), la dependencia a tiempos muy cortos en ambas contribuciones es extensiva en N : $M_{MB}(t)$ decrece como $1 - N\sigma^2 t^2/4$ y $M_X(t)$ crece como $(N - 4)\sigma^2 t^2/4$. Tal balance preciso determina el decaimiento a tiempos cortos de $M_{1,1}(t)$ según la Ec.(6.16), es decir $1 - \sigma^2 t^2$. A priori no hay razón para asumir que el decaimiento de $M_{MB}(t)$ permanezca determinado por τ_Σ . Luego del régimen de tiempos muy cortos, se espera que la escala de tiempo T_3 se evidencie en el decaimiento de $M_{MB}(t)$ bajo la forma T_3/N^ν con $\nu \sim 1$ (ver discusiones siguientes). Mientras que $M_{MB}(t)$ decae monótonamente a cero, $M_X(t)$ muestra un comportamiento no trivial: aumenta alimentándose de la caída de $M_{MB}(t)$ hasta que alcanza un máximo. Este crecimiento indica la aparición de correlaciones de largo alcance. A posteriori, $M_X(t)$ debe decaer por el sólo hecho que el estado del sistema permanece normalizado para todo tiempo. Esto es precisamente lo que $M_{1,1}(t)$ representa: una polarización conservada que tiempos largos se equidistribuye entre los espines del sistema. En un sistema aislado finito, esta equilibración se observa como un plateau asintótico $M_\infty \sim 1/N$. Tal como ya dijimos antes, el decaimiento de ambas cantidades, $M_{1,1}(t)$ y $M_X(t)$ ocurriría en una escala de tiempo T_3 , que acorde con la

6. DEL LE LOCAL AL LE GLOBAL

Ec. (6.20), es muy cercana (ligeramente mayor) a la escala de “difusión” T_2 . Este sería el escenario propio de un experimento.

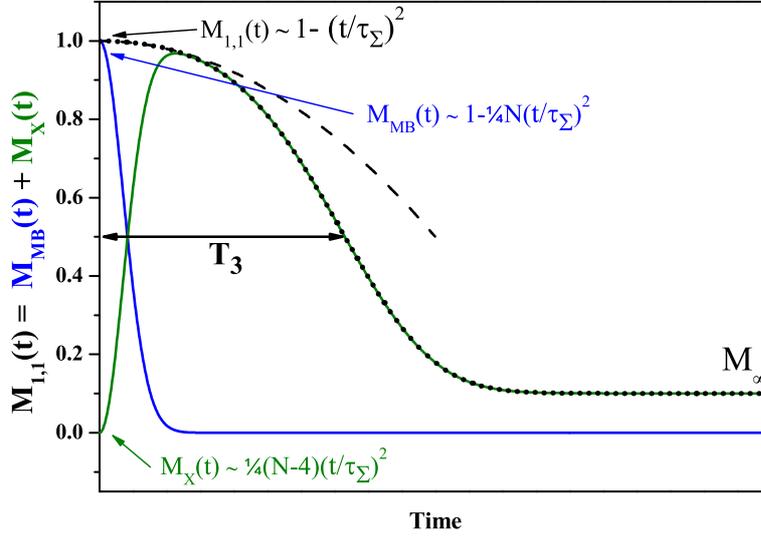


Figura 6.1: Una representación pictórica de la dependencia temporal de $M_{1,1}(t)$ (línea punteada negra), $M_{MB}(t)$ (línea continua azul) y $M_X(t)$ (línea continua verde). La dependencia a tiempos cortos, tal como se describe en las Ecs. (6.16), (6.17) y (6.18), se indican con flechas. En particular, la expansión a tiempos cortos de $M_{1,1}(t)$ se dibuja con una línea negra a trazos.

6.3.2. La hipótesis de extensividad en el decaimiento

Las anteriores expansiones a tiempos cortos sugieren una relación de escala entre el LE local, $M_{1,1}(t)$, y la versión global, $M_{MB}(t)$. En particular, comparemos primero la probabilidad de recuperar la configuración (*up* o *down*) de un sólo espín, es decir $\Pi_{1,1}(t)$, y la probabilidad de recuperar un estado completo $M_{MB}(t)$. Si la refocalización de cada espín individual pudiera tratarse como un evento independiente, entonces la relación de escala entre $\Pi_{1,1}$ y M_{MB} sería extensiva en N ,

$$(\Pi_{1,1}(t))^{N/2} \simeq M_{MB}(t). \quad (6.22)$$

Aquí, el factor $1/2$ en el exponente viene de la Ec. (3.1), es decir el estado inicial de alta temperatura, donde básicamente la mitad de los espines “están” *up* y la mitad *down*. Luego, podemos utilizar la analogía con un gas de red donde $N/2$ partículas se mueven entre N sitios de red posibles. Como en la JWT [LSM61], un fermión se

6.3 Una descripción general del decaimiento del LE

asocia a un espín *up* y una vacancia a un espín *down*. Entonces, el microestado del gas está completamente descrito por la posición de $N/2$ partículas.

En sentido estricto, el carácter de *extensivo* está reservado para magnitudes termodinámicas como la entropía del sistema. Asimismo, tal como se discute en la Ref. [UPL98], $S = -\ln(M_{1,1}(t))$ es precisamente una medida de entropía. La validez de la Ec. (6.22) implica entonces una relación de extensividad entre la entropía por espín y la entropía total del sistema.

De acuerdo con las Ecs. (6.2) y (6.16):

$$\Pi_{1,1}(t) = 1 - \frac{1}{2}(t/\tau_\Sigma)^2 + \mathcal{O}\left((t/\hbar)^3\right), \quad (6.23)$$

que a 2^{do} orden en tiempo implica $\Pi_{1,1}(t) \simeq (M_{1,1}(t))^{1/2}$. Por lo tanto, la Ec. (6.22) se traduce en

$$(M_{1,1}(t))^{N/4} \simeq M_{MB}(t). \quad (6.24)$$

que es precisamente la relación que se verifica entre las Ecs. (6.16) y (6.17).

Sería de esperar que luego del decaimiento a tiempos muy cortos, cualquier autocorrelación local se desvíe de la independencia estadística. Sin embargo, esta desviación mantendría un carácter local y por consiguiente la extensividad en N permanecería siendo válida. En efecto, proponemos

$$(M_{1,1}(t))^\eta \simeq M_{MB}(t), \quad (6.25)$$

donde el exponente η es una función adecuada $\eta = \eta(N, t)$. Nuestra “hipótesis de extensividad” en el decaimiento implica que η factoriza:

$$\eta(N, t) = N \times f(t), \quad (6.26)$$

donde $f(t)$ es una función que contiene información de las correlaciones originadas por la dinámica. Además,

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} f(t) = \frac{1}{4}. \quad (6.27)$$

es una condición necesaria para recuperar la Ec. (6.24), es decir la independencia estadística.

6.4. Un modelo 1D

Pondremos a prueba ahora las ideas físicas discutidas anteriormente usando un modelo específico. En particular, queremos estudiar la validez de las Ecs. (6.24) y (6.26). Consideramos un sistema 1D con interacción nn anisotrópica ($\alpha = -1/4$):

$$\hat{H}_{nn} = \sum_{i=1}^{N-1} J_0 \left(\frac{1}{2} \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z + \hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y \right), \quad (6.28)$$

con condiciones de borde periódicas (anillo). Se introducen además interacciones nnn :

$$\hat{H}_{nnn} = \sum_{i=1}^{N-2} J_0 \left(\frac{1}{2} \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+2}^z + \hat{S}_i^x \hat{S}_{i+2}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+2}^y \right). \quad (6.29)$$

Aquí, J_0 representa las unidades de energía para la interacción espín-espín.

Tal como en los casos discutidos en la Sec. 4.2, la proyección total de espín en la dirección z se conserva en ambos casos dado que $[\hat{H}_{nn}, \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^z] = 0$ y $[\hat{H}_{nnn}, \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^z] = 0$. Tal simetría provee una estructura de subespacios según cada una de las proyecciones en z : $m_z = \sum_{i=1}^N S_i^z = \frac{N}{2}, (\frac{N}{2} - 1), \dots, -\frac{N}{2}$. En un sistema con N espines, hay $N + 1$ subespacios con m_z definido y la dinámica estará confinada estrictamente a cada uno de ellos. Ni \hat{H}_{nn} ni \hat{H}_{nnn} pueden acoplar estados de diferentes subespacios.

El cálculo del LE está dado por la elección:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{nn}, \quad (6.30)$$

$$\hat{\Sigma} = \lambda \hat{H}_{nnn}, \quad (6.31)$$

donde λ es el parámetro que controla la perturbación, $\lambda J_0 = J_\Sigma$. Los segundos momentos locales σ_0^2 y σ^2 de \hat{H}_0 y $\hat{\Sigma}$ respectivamente pueden evaluarse como en la Ec. (6.14):

$$\sigma_0^2 = \frac{1}{2} (J_0)^2, \quad (6.32)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{2} (\lambda J_0)^2 = \lambda^2 \sigma_0^2, \quad (6.33)$$

y constituyen las escalas de energía relevantes en el modelo.

En la Fig. 6.2 graficamos $M_{1,1}(t)$, $M_{MB}(t)$ y $M_X(t)$ para la elección particular $\lambda = 0.1$. Las expansiones a tiempos cortos dadas por las Ecs. (6.16), (6.17) y (6.18) se evalúan de acuerdo con la Ec. (6.33). Se observa que $M_{MB}(t)$ se anula a tiempos muy largos. En

realidad, una observación más detallada muestra que $M_{MB}(t \rightarrow \infty) \sim \mathcal{O}(2^{-N})$ (datos no mostrados). Además, notamos que $M_X(t \rightarrow \infty) \sim 1/N$. Tal contribución asintótica es la responsable por la equidistribución de la polarización local $M_{1,1}(t \rightarrow \infty) \sim 1/N$. Esta saturación a tiempos largos corresponde a la equilibración del sistema finito.

En contraste a nuestro gráfico esquemático que se muestra en la Fig. 6.1, aquí $M_X(t)$ no llega muy cerca de 1 y $M_{MB}(t)$ no decae mucho más rápido que $M_{1,1}(t)$. Dado que $M_X(t)$ rige el comportamiento de $M_{1,1}(t)$ una vez que $M_{MB}(t)$ decayó completamente, la contribución de $M_X(t)$ es significativa sólo a tiempos largos. Estos efectos son consecuencia del tamaño relativamente pequeño del sistema considerado. De hecho, el caso en la Fig. 6.2 corresponde a $N = 14$ espines, y por lo tanto el exponente que vincula $M_{1,1}(t)$ con $M_{MB}(t)$ es relativamente pequeño $(N/4) = 3.5$. El requerimiento de sistemas grandes revela que los órdenes dominantes en la Ec. (6.20) es un desafío numérico sustancial que quizá esté fuera del alcance de las técnicas computacionales disponibles.

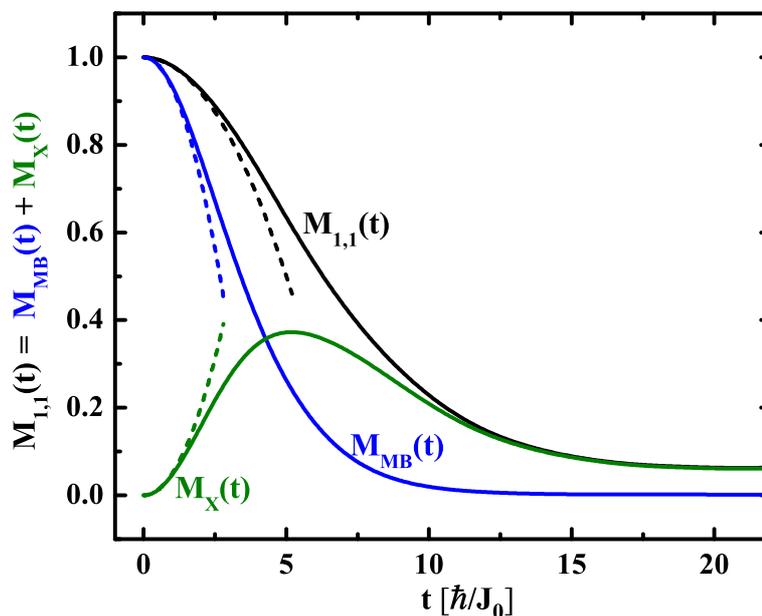


Figura 6.2: El LE local y sus contribuciones no locales. $M_{1,1}(t)$, $M_{MB}(t)$ y $M_X(t)$ corresponden a las líneas continuas negra, azul y verde respectivamente; $N = 14$, $\lambda = 0.1$. Las expansiones a tiempos cortos dadas por las Ecs. (6.16), (6.17) y (6.18) se muestran con un líneas a trazos negra, azul y verde, respectivamente.

Con el propósito de evaluar la validez de la “hipótesis de extensividad” en el deca-

6. DEL LE LOCAL AL LE GLOBAL

miento, analizamos en la Fig. 6.3 la relación de escala entre $M_{1,1}(t)$ y $M_{MB}(t)$ que discutimos en la Sec. 6.3.2. En particular, ponemos a prueba la factorización planteada en la Ec. (6.26). Graficamos como función del tiempo la cantidad $\log(M_{MB}(t))/(\log(M_{1,1}(t))N)$, y observamos una curva “unificada” que no depende de N ni de λ , pero tiene una leve dependencia en el tiempo. Tal curva es efectivamente $f(t)$ según se define en la Ec. (6.26). Esto significa que la relación de extensividad entre $M_{1,1}(t)$ y $M_{MB}(t)$ es válida. La independencia estadística, en cambio, falla progresivamente ni bien $f(t)$ se aparta del factor ideal $1/4$ que viene de las Ecs. (6.24) y (6.27). Dado que luego del régimen de tiempos cortos $f(t)$ disminuye con el tiempo, concluimos que reobtener la configuración de un espín está ligado a reobtener la configuración de sus vecinos. En otras palabras, los espines están correlacionados positivamente, lo cual facilita la refocalización de un estado completo de N espines. Este argumento es particularmente aplicable en sistemas 1D.

Luego de la saturación, donde $M_{1,1} \sim 1/N$ y $M_{MB} \sim \mathcal{O}(2^{-N})$, el escaleo universal naturalmente se vuelve ruidoso y las curvas para diferentes N y λ se separan unas de otras. Dado que el decaimiento es más rápido para perturbaciones mayores, la aparición de tal comportamiento espurio ocurre primero para el mayor valor de λ considerado ($\lambda = 0.3$, líneas punteadas).

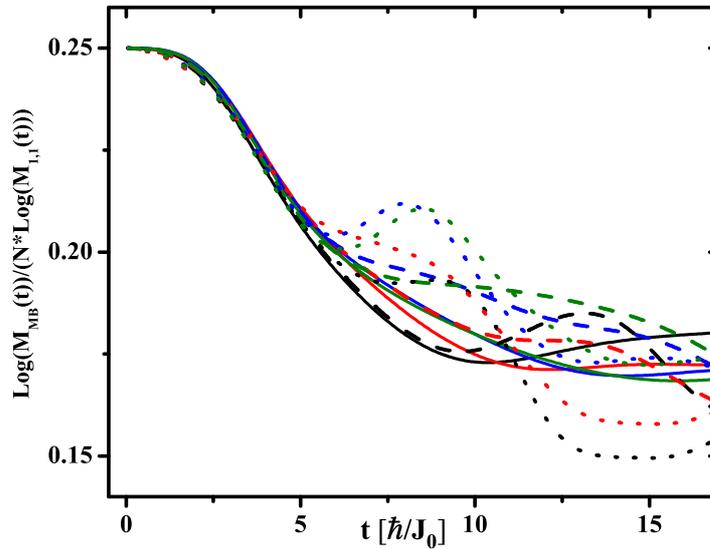


Figura 6.3: La relación $\log(M_{MB}(t))/(N \log(M_{1,1}(t)))$ como función del tiempo para: $N = 10$ (negro), 12 (rojo), 14 (azul) y 16 (verde). La magnitud de la perturbación está dada por $\lambda = 0.1$ (líneas continuas), $\lambda = 0.2$ (líneas a trazos), y $\lambda = 0.3$ (líneas punteadas).

6.5. Estados preparados dinámicamente

6.5.1. Ideas operacionales

Discutiremos ahora cómo convertir la medición local $M_{1,1}(t)$ en una medida global de reversibilidad en un sistema de muchos cuerpos. La idea se basa en una preparación dinámica, que permite incrementar la complejidad del estado inicial en una manera controlada. Esencialmente, el procedimiento consisten en una secuencia, esquematizada en la Fig. 6.4, que viene dada por: preparación, LE estándar, reversión perfecta de la preparación y finalmente medición local. La preparación resulta de una evolución regida por un Hamiltoniano \hat{H}_p durante un tiempo t_p . Luego, un procedimiento tipo LE se realiza tal como ya hemos analizado, es decir, una evolución *hacia delante*, *hacia atrás* imperfecta. A tal reversión temporal se le sigue una evolución simétrica *hacia atrás* regida por $-\hat{H}_p$ que tiene por finalidad “desandar” la preparación, terminando en una observación local. Este DPLE se denota con $M_{1,1}(t, t_p)$. La idea aquí es que el DPLE, es decir la medición en la Fig. 6.4(e), termina en un ultima instancia siendo equivalente al *overlap* entre dos funciones de onda “térmicas” que describen el estado del sistema luego de la preparación (es decir, el *overlap* entre los estados correspondientes a la Fig. Fig. 6.4(b) y Fig. 6.4(d)).

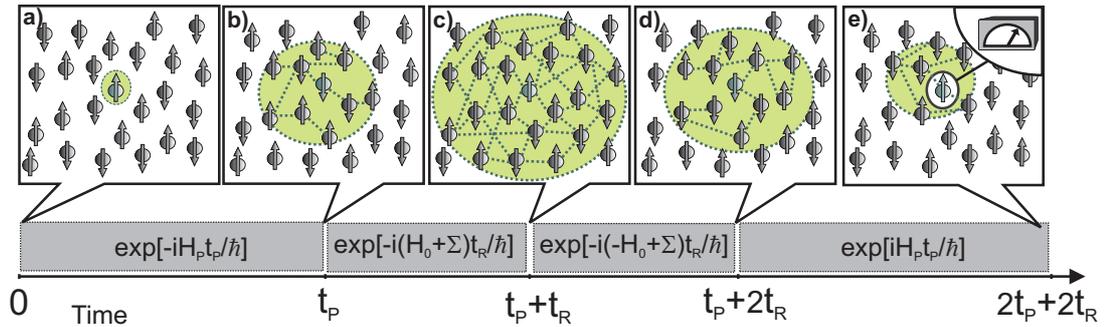


Figura 6.4: El esquema de preparación como modificación del procedimiento ilustrado en la Fig. 3.1. (a) El estado inicial dado por la Ec. (3.1) evoluciona y crea un estado correlacionado dinámicamente $\hat{U}_p(t_p)|\Psi_{neq}\rangle$ representado en (b). A posteriori, se realiza el procedimiento de reversión temporal (c)-(d). La reversión “perfecta” de la preparación finalmente conduce a una observación local en (e).

Sería de esperar que el esquema de preparación codifique la excitación local en un estado extendido. Dado que el procedimiento del LE se ejecuta luego de tal preparación,

6. DEL LE LOCAL AL LE GLOBAL

el DPLE termina por representar la sensibilidad ante perturbaciones de estados inicialmente correlacionados. Para cuantificar esta idea, asumimos primero que $[\hat{H}_p, \hat{S}_T^z] = 0$ y consideramos un único estado de la base $|\beta_i\rangle$, $i \in \mathcal{A}$, que pertenece a un subespacio de proyección etiquetado por $m_z(i) = \langle \beta_i | \hat{S}_T^z | \beta_i \rangle$. Este estado se “prepara” de acuerdo con $\hat{U}_p(t_p) = \exp[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_p t_p]$:

$$\hat{U}_p(t_p) |\beta_i\rangle = \sum_{\substack{j \\ m_z(j)=m_z(i)}} c_j^i(t_p) |\beta_j\rangle = \left| \Psi_{m_z(i)}^{[i]} \right\rangle. \quad (6.34)$$

Aquí, $\left| \Psi_{m_z(i)}^{[i]} \right\rangle$ denota una superposición coherente en el subespacio etiquetado por $m_z(i)$. Es importante notar que dos estados base diferentes, $|\beta_k\rangle$ y $|\beta_l\rangle$, que pertenecen al mismo subespacio corresponderían a superposiciones completamente diferentes $\left| \Psi_{m_z(k)}^{[k]} \right\rangle$ y $\left| \Psi_{m_z(l)}^{[l]} \right\rangle$ respectivamente, aun cuando $m_z(k) = m_z(l)$. Por esta razón indicamos, con un superíndice entre corchetes, el vector de la base específico que “originó” tal superposición.

Si reemplazamos $\hat{U}_{LE}(t)$ por $\hat{U}_p^\dagger(t_p) \hat{U}_{LE}(t) \hat{U}_p(t_p)$ en la Ec. (6.4),

$$\begin{aligned} M_{MB}(t, t_p) &= \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left| \langle \beta_i | \hat{U}_p^\dagger(t_p) \hat{U}_{LE}(t) \hat{U}_p(t_p) | \beta_i \rangle \right|^2 \\ &= \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left| \langle \Psi_{m_z(i)}^{[i]} | \hat{U}_{LE}(t) | \Psi_{m_z(i)}^{[i]} \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (6.35)$$

Siendo la probabilidad de supervivencia de un estado específico, esperamos que la Ec. (6.35) *no difiera* de la Ec. (6.4), es decir $M_{MB}(t, t_p) \sim M_{MB}(t, 0)$. Esta constituye nuestra primera expectativa a ser analizada con un modelo específico. Por otro lado, en el caso de $M_X(t, t_p)$,

$$\begin{aligned} M_X(t, t_p) &= \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left(\sum_{j \in \mathcal{A} (j \neq i)} \left| \langle \beta_j | \hat{U}_p^\dagger(t_p) \hat{U}_{LE}(t) \hat{U}_p(t_p) | \beta_i \rangle \right|^2 + \right. \\ &\quad \left. - \sum_{j \in \mathcal{B}} \left| \langle \beta_j | \hat{U}_p^\dagger(t_p) \hat{U}_{LE}(t) \hat{U}_p(t_p) | \beta_i \rangle \right|^2 \right) \\ &= \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left(\sum_{j \in \mathcal{A} (j \neq i)} \left| \langle \Psi_{m_z(j)}^{[j]} | \hat{U}_{LE}(t) | \Psi_{m_z(i)}^{[i]} \rangle \right|^2 + \right. \\ &\quad \left. - \sum_{j \in \mathcal{B}} \left| \langle \Psi_{m_z(j)}^{[j]} | \hat{U}_{LE}(t) | \Psi_{m_z(i)}^{[i]} \rangle \right|^2 \right). \end{aligned} \quad (6.36)$$

6.5 Estados preparados dinámicamente

A pesar que el balance asintótico entre los dos términos de la Ec. (6.36) permanezca en el mismo balance que la Ec. (6.5), la relación transitoria entre esos términos debería ser diferente. En particular, esperamos que el crecimiento a tiempos cortos de $M_X(t)$ sea *mucho más lento*. Tal como ya mencionamos, cuando $t_p = 0$, el decaimiento a tiempos muy cortos de $M_{1,1}(t)$ resulta del juego relativo entre el decaimiento de $M_{MB}(t)$, dado en una escala de tiempo $\sim \tau_\Sigma/N$, y el aumento de $M_X(t)$, también en una escala $\sim \tau_\Sigma/N$. Si esta última cantidad creciera en una escala $\sim \tau_\Sigma$ (o incluso más lento), luego el decaimiento a tiempos cortos de $M_{1,1}(t)$ estaría caracterizado por la escala de tiempo $\sim \tau_\Sigma/N$. En otras palabras, $M_{1,1}(t, t_p) \sim M_{MB}(t, t_p) \sim M_{MB}(t, 0)$. Esto significa que la observación local es esencialmente un overlap global entre estados de muchos cuerpos. Esta constituye la segunda expectativa a poner a prueba.

Podemos proponer también una idea operacional. Consideremos entonces un estado de la base $|\beta_i\rangle$ que pertenece a un dado subespacio $m_z(i)$. Además, asumimos que \hat{H}_p puede producir la equilibración, es decir, la polarización local alcanza un valor estacionario, que consiste en la distribución homogénea entre los espines del sistema. Si t_p fuera mayor que la escala típica de equilibración, luego uno diría que $|\Psi_{m_z(i)}^{[i]}\rangle$ formalmente representa una función de onda *equilibrada* del sistema, definida en un subespacio específico. Entonces, proponemos aquí reemplazar una superposición coherente $|\Psi_{m_z(i)}^{[i]}\rangle$ por un estado aleatorio $|\Phi_{m_z(i)}\rangle$,

$$|\Phi_{m_z(i)}\rangle = \sum_{m_z(k)=m_z(i)} \frac{e^{i\varphi_k}}{\sqrt{\mathcal{D}_{m_z(i)}}} |\beta_k\rangle, \quad (6.37)$$

donde φ_k es una fase aleatoria uniformemente distribuida en $[0, 2\pi)$. Tal como en la Ec. (4.2), $\mathcal{D}_{m_z(i)}$ representa la dimensión del subespacio de proyección etiquetado según $m_z(i)$. Notamos que $|\Phi_{m_z(i)}\rangle$ no depende del índice específico i (se elimina el superíndice entre corchetes), pero sí depende del número cuántico $m_z(i)$. Usando tal *ansatz*, la Ec. (6.35) se reemplaza por:

$$M_{MB}(t, t_p) \sim \sum_{m_z} D_{m_z} \left\langle \left\langle \left| \langle \Phi_{m_z} | \hat{U}_{LE}(t) | \Phi_{m_z} \rangle \right|^2 \right\rangle \right\rangle, \quad (6.38)$$

donde D_{m_z} representa el peso estadístico de cada subespacio m_z :

$$D_{m_z} = \frac{1}{2^{N-1}} \mathcal{D}_{m_z - \frac{1}{2}}^{(N-1)} = \frac{1}{2^{N-1}} \binom{N-1}{m_z + \frac{N}{2} - 1}. \quad (6.39)$$

6. DEL LE LOCAL AL LE GLOBAL

Aquí, $\mathcal{D}_{m_z - \frac{1}{2}}^{(N-1)}$ es la dimensión del subespacio con proyección $m_z - \frac{1}{2}$, en un sistema de $N - 1$ espines.

La promediación sobre estados aleatorios $\langle\langle \cdot \rangle\rangle$ se realiza en la Ec. (6.38), que en la práctica involucra ~ 10 realizaciones del conjunto $\{\varphi_k\}$. Es importante notar la diferencia en el número de operaciones necesarias para computar las Ecs. (6.35) y (6.38): mientras que la primera involucra la evolución de 2^{N-1} estados base, la segunda involucra algunos pocos estados superposición en cada subespacio.

El LE local se reduciría a:

$$M_{1,1}(t, t_p) \sim M_{g1}(t) = (1 - M_\infty) \left[\sum_{m_z} D_{m_z} \left\langle \left\langle \left| \langle \Phi_{m_z} | \hat{U}_{LE}(t) | \Phi_{m_z} \rangle \right|^2 \right\rangle \right\rangle \right] + M_\infty \quad (6.40)$$

donde imponemos el plateau asintótico $M_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} M_{1,1}(t)$. La Ec. (6.40) representa la tercera expectativa que pondremos a prueba.

Podemos dar un paso más y preguntarnos si es posible utilizar un único estado superposición para calcular simultáneamente todos los subespacios. En tal caso, el candidato sería

$$|\Phi_{2N}^*\rangle = \sum_k \sqrt{\frac{(2m_z(k) + N)}{N2^N}} e^{i\varphi_k} |\beta_k\rangle. \quad (6.41)$$

Aquí, φ_k es, como antes, una fase aleatoria. El índice de suma k en la Ec.(6.41) corre sobre todo el espacio de Hilbert. El estado $|\Phi_{2N}^*\rangle$ difiere de las superposiciones aleatorias no polarizadas $|\Phi_{2N}\rangle$ introducidas en la Sec. 4.2.1. De hecho, se puede verificar fácilmente que $\langle \Phi_{2N} | \hat{S}_i^z | \Phi_{2N} \rangle = 0 \forall i$. Por otra parte, podemos verificar también que $|\Phi_{2N}^*\rangle$ implica una polarización homogénea en el sistema de espines,

$$2 \langle \Phi_{2N}^* | \hat{S}_i^z | \Phi_{2N}^* \rangle = N^{-1} \quad \forall i. \quad (6.42)$$

El estado aleatorio definido en la Ec. (6.41) provee de una alternativa para el cálculo de subespacios individuales. En particular, tal como en las Ecs. (6.38) y (6.40), proponemos

$$M_{MB}(t, t_p) \sim \left\langle \left\langle \left| \langle \Phi_{2N}^* | \hat{U}_{LE}(t) | \Phi_{2N}^* \rangle \right|^2 \right\rangle \right\rangle, \quad (6.43)$$

y

$$M_{1,1}(t, t_p) \sim M_{g2}(t) = (1 - M_\infty) \left\langle \left\langle \left| \langle \Phi_{2N}^* | \hat{U}_{LE}(t) | \Phi_{2N}^* \rangle \right|^2 \right\rangle \right\rangle + M_\infty \quad (6.44)$$

respectivamente. Esta constituye nuestra última expectativa a probar.

6.5.2. Resultados numéricos para el modelo 1D

Discutiremos ahora las expectativas puntualizadas en la Sec. 6.5.1 en el contexto específico del modelo introducido en la Sec. 6.4. En particular, consideraremos dos preparaciones dinámicas diferentes. En términos de los Hamiltonianos de espín definidos en las Ecs. (6.28) y (6.29), las dos alternativas son: $\hat{H}_p = \hat{H}_{nn}$ y $\hat{H}_p = \hat{H}_{nn} + (1/3)\hat{H}_{nnn}$. Cada uno de estos Hamiltonianos define su correspondiente función de autocorrelación “hacia delante”

$$P_{1,1}(t_p) = 2 \langle \Psi_{neq} | \hat{U}_p^\dagger(t_p) \hat{S}_1^z \hat{U}_p(t_p) | \Psi_{neq} \rangle, \quad (6.45)$$

que se evalúa explícitamente en la Fig. 6.5 para los dos \hat{H}_p considerados. La polarización se considera equilibrada al alcanzar el plateau asintótico N^{-1} . Esto se observa que ocurre en una escala de tiempo¹ bien definida, $\tau_{eq} \sim 2\hbar/J_0$ para ambos casos. Tal escala provee de una referencia para estimar la ventana de tiempo donde tomamos t_p . En particular, consideramos $t_p \lesssim \tau_{eq}$ y $t_p \gg \tau_{eq}$. Las elecciones de t_p se muestran explícitamente en la Fig. 6.5. Consistentemente, el DPLE $M_{1,1}(t, t_p)$ se evalúa en la Fig. 6.6 para estos tiempos de preparación. Fijamos la magnitud de la perturbación en $\lambda = 0.7$.

En todos los casos con $t_p \neq 0$, $M_{1,1}(t, t_p)$ decae más velozmente que $M_{1,1}(t, 0)$. Esto confirma la expectativa más sencilla según la cual, mientras más correlacionado sea el estado, más frágil será frente a perturbaciones. Cuando $t_p \gg \tau_{eq}$, observamos que $M_{1,1}(t, t_p)$ satura en única curva de decaimiento. En particular, para $\hat{H}_p = \hat{H}_{nn} + (1/3)\hat{H}_{nnn}$ (es decir Fig. 6.6(b)), tal decaimiento se corresponde con $M_{MB}(t, 0)$. Esta observación anticipa nuestra idea principal: una medición local termina por transformarse en una global, $M_{1,1}(t, t_p) \sim M_{MB}(t, 0)$.

Veamos cada contribución en la Ec. (6.6) por separado. Por un lado, graficamos en la Fig. 6.7 $M_{MB}(t, 0)$ y $M_{MB}(t, 10\hbar/J_0)$ para dos elecciones de \hat{H}_p . Verificamos nuestra primer expectativa en la Sec. 6.5.1, es decir $M_{MB}(t)$ no cambia significativamente al realizar la preparación dinámica: $M_{MB}(t, t_p) \sim M_{MB}(t, 0) \forall t_p$. Por otro lado, mostramos en la Fig. 6.8 $M_X(t, 0)$ y $M_X(t, 10\hbar/J_0)$ para dos elecciones de \hat{H}_p . Se evidencian diferencias considerables para tiempos cortos e intermedios, mientras que el

¹Aquí, τ_{eq} juega el papel de la escala de tiempo experimental T_2 , es decir, relativa a una interacción espín-espín “controlada”.

6. DEL LE LOCAL AL LE GLOBAL

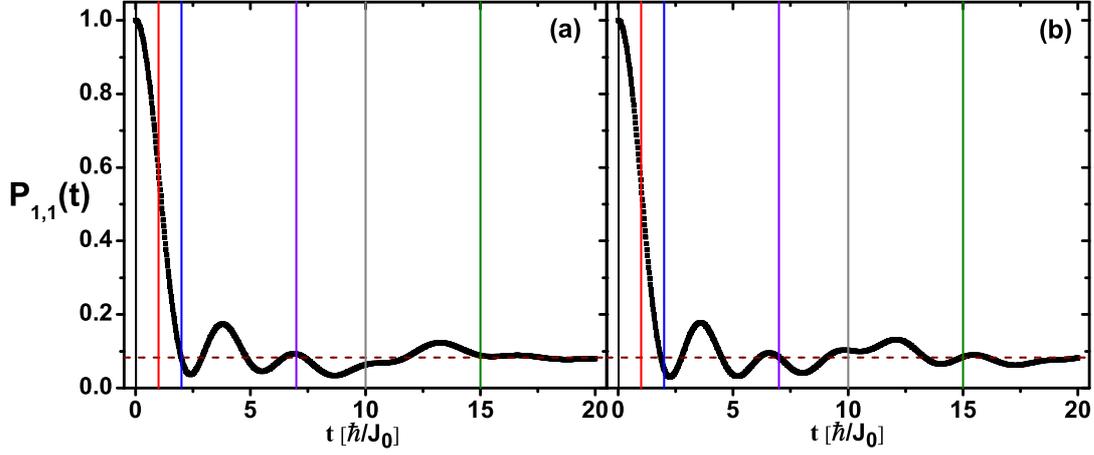


Figura 6.5: Función de autocorrelación definida en la Ec. (6.45), $N = 12$. (a) y (b) corresponden a $\hat{H}_p = \hat{H}_{nn}$ y $\hat{H}_p = \hat{H}_{nn} + (1/3)\hat{H}_{nnn}$ respectivamente. Las líneas sólidas verticales indican los tiempos de preparación seleccionados: $t_p = 0.0\hbar/J_0$ negro, $t_p = 1.0\hbar/J_0$ rojo, $t_p = 2.0\hbar/J_0$ azul, $t_p = 7.0\hbar/J_0$ violeta, $t_p = 10.0\hbar/J_0$ gris, y $t_p = 15.0\hbar/J_0$ verde.

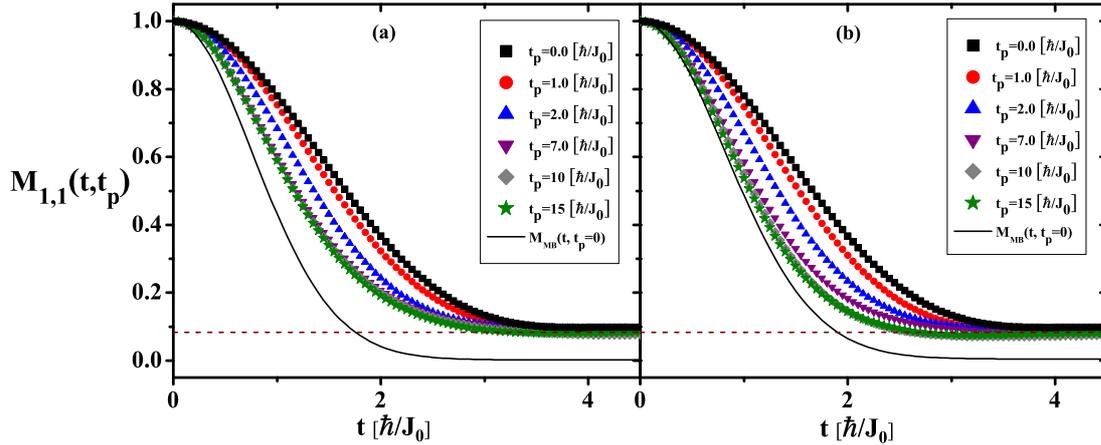


Figura 6.6: $M_{1,1}(t, t_p)$ como función del tiempo t para diferentes tiempos de preparación t_p , $N = 12$. La línea horizontal a trazos corresponde a la asíntota de equidistribución $1/N$. Como referencia, el eco global $M_{MB}(t, t_p = 0)$ se dibuja en línea continua negra.

plateau asintótico permanece igual. De acuerdo con el inset a tiempos cortos, mientras que $M_X(t, 0)$ crece en un escala de tiempo τ_Σ/N , el crecimiento de $M_X(t, 10\hbar/J_0)$ resulta en una escala incluso más lenta a la local τ_Σ . Esto automáticamente implica que el decaimiento a tiempos cortos de $M_{1,1}(t, t_p)$ ocurre en una escala τ_Σ/N , como planteábamos en nuestra segunda expectativa.

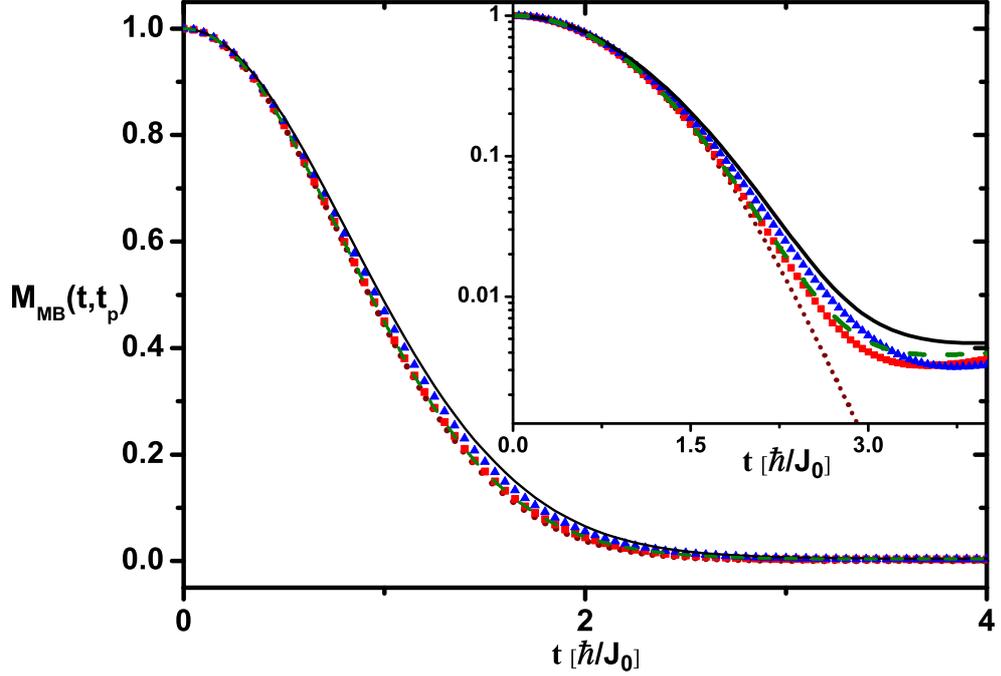


Figura 6.7: El LE global o de muchos cuerpos. $M_{MB}(t, t_p = 0)$ corresponde a la línea continua negra. Los triángulos azules representan $M_{MB}(t, 10\hbar/J_0)$ y $\hat{H}_p = \hat{H}_{nn}$. Los cuadrados rojos a $M_{MB}(t, 10\hbar/J_0)$ y $\hat{H}_p = \hat{H}_{nn} + (1/3)\hat{H}_{nnn}$. La línea verde a trazos corresponde a la Ec. (6.38). La línea a puntos marrón corresponde a la Ec. (6.43). Inset: escala log-lineal.

Finalmente, en la Fig. 6.9 comparamos $M_{1,1}(t, 15\hbar/J_0)$ con los dos LE globales definidos en las Ecs. (6.40) y (6.44). Puede apreciarse un acuerdo considerable. Esto constituye un resultado relevante, dado que provee un criterio para la existencia de equilibración, al menos en lo que concierne al observable polarización local. En efecto, si consideramos dos tiempos de preparación diferentes, digamos t_{p1} y t_{p2} , éstos originarían dos estados preparados prácticamente ortogonales,

$$\langle \Psi_{neq} | \hat{U}_p^\dagger(t_{p1}) \hat{U}_p(t_{p2}) | \Psi_{neq} \rangle \sim O(2^{-N}). \quad (6.46)$$

La Ec. (6.46) es una consecuencia de las correlaciones (fases) contenidas en los estados

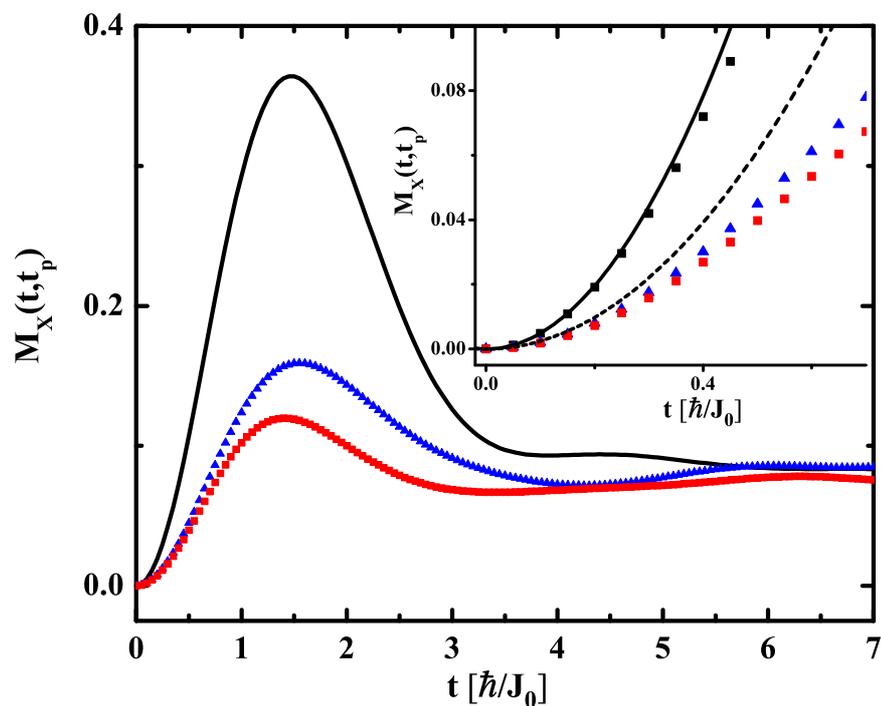


Figura 6.8: $M_X(t, t_p)$ como función del tiempo t para diferentes preparaciones dinámicas. La línea sólida negra corresponde a $t_p = 0$, los triángulos azules a $t_p = 10\hbar/J_0$ y $\hat{H}_p = \hat{H}_{nn}$, y los cuadrados rojos a $t_p = 10\hbar/J_0$ y $\hat{H}_p = \hat{H}_{nn} + (1/3)\hat{H}_{nnn}$. Inset: dependencia a tiempos cortos. Aquí, $M_X(t, t_p = 0)$ se grafica con cuadrados negros. La línea negra sólida corresponde al crecimiento cuadrático $\sim N\sigma^2t^2$ (específicamente, la Ec. (6.18)), mientras que la línea negra a trazos corresponde al aumento cuadrático $\sim \sigma^2t^2$.

$\hat{U}_p(t_{p1})|\Psi_{neq}\rangle$ y $\hat{U}_p(t_{p2})|\Psi_{neq}\rangle$. Luego, podríamos afirmar que estos estados son drásticamente diferentes. Sin embargo, si ambos t_{p1} y t_{p2} son mucho más grandes que τ_{eq} , la observación local no depende de las fases específicas codificadas en $\hat{U}_p(t_p)|\Psi_{neq}\rangle$. En otras palabras, $M_{1,1}(t, t_p)$ pierde su dependencia en t_p . En tal caso, las correlaciones son inútiles, y uno puede usar en su reemplazo estados aleatorios para calcular el DPLE, tal como en la Ec. (6.40).

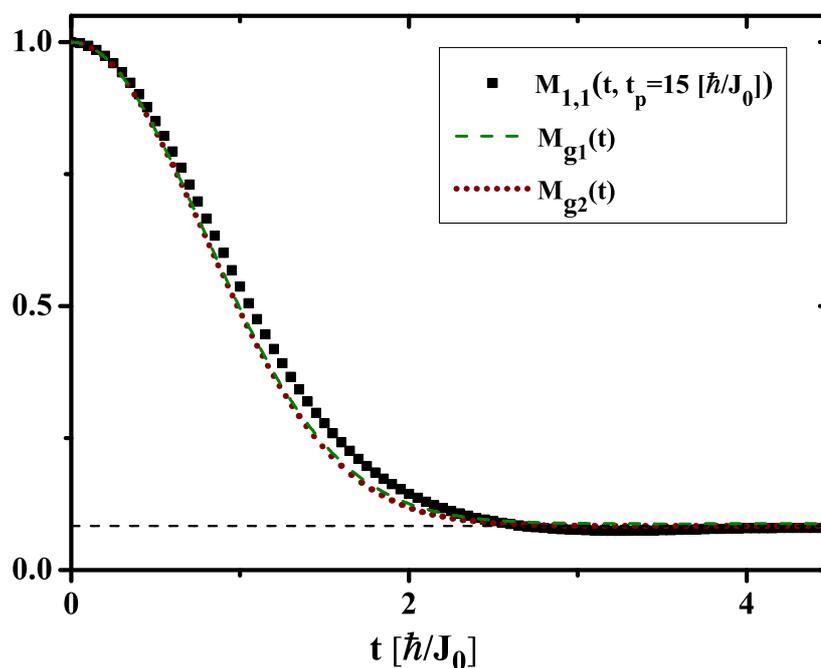


Figura 6.9: El DPLE $M_{1,1}(t, 15\hbar/J_0)$ evaluado para $\hat{H}_p = \hat{H}_{nn} + (1/3)\hat{H}_{nnn}$ es comparado con el LE global $M_{g1}(t)$ y $M_{g2}(t)$ (es decir, Ecs. (6.40) y (6.44) respectivamente). La línea a trazos horizontal corresponde con la equidistribución asintótica $M_\infty = 1/N$.

6.6. Conclusiones

El análisis del LE aquí realizado complementa la formulación introducida en el Capítulo 3. Por una lado, consideramos la versión local del LE, $M_{1,1}$, que está definida como una función de autocorrelación de un espín. Por otro lado, definimos una versión global del LE, M_{MB} , como el promedio del cuadrado de *overlap* entre funciones de onda que evolucionan de acuerdo a diferentes Hamiltonianos (perturbado y sin perturbar). Mientras que la primer cantidad constituye un observable experimental específico, la

6. DEL LE LOCAL AL LE GLOBAL

segunda sólo ha sido considerada a nivel teórico. Aquí, mostramos la relación formal entre ambas cantidades, particularmente en cuanto a escalas de tiempo características y la dependencia en N .

Analizando la expansión a tiempos cortos de $M_{1,1}$ y M_{MB} derivamos una relación precisa entre sus escalas de tiempo. En tal régimen, el decaimiento de $M_{1,1}$ está dado por el segundo momento local promedio de la perturbación ($\hbar/\tau_\Sigma = \sqrt{\sigma^2}$), y el decaimiento de M_{MB} por N veces dicha tasa local ($N\hbar/\tau_\Sigma$). Esta relación induce una ley de escala $M_{MB} \sim (M_{1,1})^{N/4}$ que representa la extensividad de M_{MB} . En tal caso, la refocalización de un estado de muchos espines resulta de la refocalización de cada configuración individual de espines, como si se tratara de eventos independientes. La evaluación numérica en un modelo específico muestra que el exponente disminuye levemente con el tiempo, comenzando con el valor inicial $N/4$. Esta disminución significa que la refocalización de un configuración local está positivamente correlacionada con la probabilidad de recuperar la configuración de los espines vecinos.

Por otra parte, discutimos un panorama general de la dinámica del LE luego del régimen de tiempos muy cortos. En general, la dependencia temporal de $M_{1,1}$ resulta de un juego entre la escala de tiempo que caracteriza las interacciones reversibles (T_2) y la de la perturbación (τ_Σ). Esto conlleva en última instancia a la escala observada experimentalmente T_3 , que resulta ser aproximadamente independiente de τ_Σ pero fuertemente ligada a T_2 . La búsqueda teórica de la escala de tiempo emergente T_3 permanece abierta y un intento numérico para detectarla se discutirá en el Capítulo 7. Como se indica en la Ec. (6.20), evaluar una estimación analítica requeriría una suma detallada de los órdenes altos que *visten* el término cuadrático de la expansión perturbativa.

Finalmente, discutimos una serie de ideas operacionales para transformar el LE local en un LE global. Esto significaría que el LE local pueda utilizarse para medir el *overlap* global entre estados de muchos cuerpos. Aquí, el procedimiento de LE se modifica para introducir una preparación dinámica del estado inicial, que crea correlaciones vía una evolución idealmente reversible. En la práctica, confirmamos que un estado es más frágil a medida que sea más correlacionado. Más aún, el decaimiento satura en una escala de tiempo bien definida, que se corresponde con LE global de estados superposición aleatoria. Cabe mencionar que el esquema de preparación dinámica aquí propuesto

puede implementarse en un experimento de NMR, tal como se reporta para simular el fenómeno de localización [AS11, ASK15].

Las contribuciones originales en este Capítulo están actualmente en proceso de publicación:

“Loschmidt echo in many-spin systems: contrasting time-scales of local and global measurements.”, Pablo R. Zangara, Denise Bendersky, Patricia R. Levstein, and Horacio M. Pastawski, submitted to Phil. Trans. R. Soc. A. Preprint available at [arXiv:1508.07284](https://arxiv.org/abs/1508.07284) [quant-ph].

6. DEL LE LOCAL AL LE GLOBAL

Capítulo 7

Proliferación de interacciones efectivas: equilibración inducida por decoherencia en un sistema cuántico cerrado

En este Capítulo evaluaremos el LE en una serie de sistemas interactuantes cerrados. Tanto las interacciones reversibles como la perturbación corresponden a una situación experimental real. Describiremos los mecanismos emergentes responsables del decaimiento del LE y de la equilibración del sistema. Además, describiremos cómo una equilibración, consecuencia de una dinámica unitaria, se convierte en irreversible en el TL.

7.1. Introducción

Disponiendo de la formulación LE introducida en el Capítulo 3 y elaborada en más detalle en el Capítulo 6, estamos en condiciones de simular (de manera simplificada) la esencia de un experimento real. En realidad, nuestro propósito va más allá de la reproducción precisa de las condiciones experimentales. En cambio, buscaremos identificar, como prueba de principio, los mecanismos responsables de una equilibración irreversible en el TL.

Un experimento estándar en NMR involucra una muestra cristalina con un núme-

7. PROLIFERACIÓN DE INTERACCIONES EFECTIVAS: EQUILIBRACIÓN INDUCIDA POR DECOHERENCIA EN UN SISTEMA CUÁNTICO CERRADO

ro infinitamente grande de espines interactuantes. En contraste, cualquier evaluación numérica de la dinámica de espines debe restringirse a sistemas finitos. Esto puede parecer una limitación sustancial, pero permite un enfoque no posible en un experimento: moverse progresivamente desde tamaños pequeños a grandes con valores de perturbación controlados. La expectativa entonces es que los mecanismos de decaimiento del LE y equilibración del sistema eventualmente *emergen* del aumento progresivo del tamaño del sistema hacia el TL. Nos centraremos en tal pregunta considerando sistemas cerrados de hasta 20 espines interactuantes, cuya dinámica involucra por completo un espacio de Hilbert de dimensión 2^N . Adoptaremos un modelo con interacciones dipolares “todos contra todos”, el cual permite suavizar fluctuaciones estadísticas y por lo tanto facilitar la extrapolación al TL. Complementaremos el estudio con un modelo 2D con condiciones de borde periódicas.

Mostraremos que, en presencia de una pequeña perturbación Hamiltoniana, el decaimiento del LE sigue una FGR tal como sucede en los sistemas abiertos tratados en los Capítulos 2 y 3. Dado que el sistema aquí considerado es cerrado (la perturbación está dada por interacciones internas no controladas), la FGR indicaría que el sistema actúa como su propio ambiente. Además, observamos que luego de suficiente tiempo, la excitación inicial permanecerá equilibrada (homogéneamente distribuida) en el sistema a pesar de la reversión. En otras palabras, la equilibración originada por el Hamiltoniano no perturbado se vuelve completamente irreversible en presencia de una pequeña perturbación. El mecanismo responsable de la mencionada FGR corresponde a la *proliferación* de interacciones efectivas de dos y cuatro cuerpos mediadas por procesos virtuales. Mostraremos explícitamente cómo el dominio de validez de esta descripción se ensancha a medida que N aumenta. Tal observación sugiere que, en el TL, la proliferación de interacciones efectivas es el mecanismo buscado que rige la irreversibilidad.

7.2. Hacia la simulación numérica de un experimento LE real

Comenzaremos rephraseando el procedimiento LE introducido en la Sec. 3.2 y discutido en las Secs. 6.2 y 6.3. El objetivo es, como dijimos, realizar la simulación de un

7.2 Hacia la simulación numérica de un experimento LE real

experimento real con varias simplificaciones. Seguiremos entonces el protocolo experimental que se reporta en la Ref. [UPL98]. El estado inicial del sistema, definido en la Ec. (3.1), corresponde a N espines-1/2 a temperatura infinita más una polarización localmente inyectada. Esta polarización inicial está orientada en la dirección z del sistema de referencia (terna) laboratorio, dirección en la cual un enorme campo Zeeman separa energéticamente los estados de acuerdo a su proyección total de espín. Luego, a pesar que los espines estarían sujetos a la interacción dipolo-dipolo completa, la evolución está dada en cambio por Hamiltoniano dipolar truncado[Sli80],

$$\hat{H}_{dip} = \sum_{i,j}^N J_{ij}^{dip}(N) \left[2\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \left(\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y \right) \right] \quad (7.1)$$

$$= \sum_{i,j}^N J_{ij}^{dip}(N) \left[2\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{1}{2} \left(\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+ \right) \right], \quad (7.2)$$

que corresponde con una anisotropía $\alpha = 1$. Esta interacción conserva proyección total de espín y recibe el nombre de *secular*. La simetría $[\hat{H}_{dip}, \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^z] = 0$ provee de la estructura de subespacios etiquetados por el número cuántico m_z .

Elegimos la constante de acoplamiento $J_{ij}^{dip}(N)$ correspondiente a un modelo de alcance “infinito” o “todos contra todos”,

$$J_{ij}^{dip}(N) = J_{ji}^{dip}(N) = (1 + \chi) \times (-1)^k \times \frac{J_0}{\sqrt{N}}. \quad (7.3)$$

Aquí, χ es un número aleatorio tomado de una distribución uniforme en $[-0.1, 0.1]$ que remueve degeneraciones al mismo tiempo que mantiene pequeñas las fluctuaciones del segundo momento local promedio. Dado que el signo de la interacción dipolar en un cristal depende de la orientación espacial del vector inter-espín, tomamos el número k de una distribución binaria aleatoria en $\{0, 1\}$. El precio a pagar por la red todos contra todos es la ausencia de una estructura dinámica jerárquica propia de los sistemas experimentales.

El factor $1/\sqrt{N}$ asegura que el segundo momento local de la interacción dipolar σ_{dip}^2 permanece constante a medida que N cambia:

$$\sigma_{dip}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\sum_{j(\neq i)}^N \left(\frac{J_{ij}^{dip}(N)}{2} \right)^2 \right] \simeq \frac{J_0^2}{4}. \quad (7.4)$$

7. PROLIFERACIÓN DE INTERACCIONES EFECTIVAS: EQUILIBRACIÓN INDUCIDA POR DECOHERENCIA EN UN SISTEMA CUÁNTICO CERRADO

Por lo tanto, independientemente del tamaño de los sistemas involucrados, $\hbar/\sqrt{\sigma_{dip}^2}$ recupera el tiempo característico espín-espín T_2 y consecuentemente J_0 representa las unidades de energía inherentes al problema. Además, σ_{dip}^2 es el análogo de σ_0^2 introducido en la Ec. (6.15).

Una evolución “hacia delante” regida por \hat{H}_{dip} puede revertirse experimentalmente vía una secuencia de pulsos apropiada [UPL98]. Con el propósito de realizar la inversión de signo $\hat{H}_{dip} \rightarrow -\hat{H}_{dip}$, el estado del sistema se rota en la dirección de un campo de radiofrecuencia (rf) que se enciende inmediatamente después. Este campo de rf se encuentra perpendicular al campo Zeeman original, y define un sistema de referencia (terna) rotante. Redefiniendo la dirección z en tal terna, el campo de rf provee un Hamiltoniano Zeeman:

$$\hat{H}_Z = \sum_{i=1}^N \hbar\omega_1 \hat{S}_i^z. \quad (7.5)$$

Notemos aquí que \hat{H}_Z crea *gaps* de energía finitos, de magnitud $\hbar\omega_1$, separando los subespacios. Estas diferencias de energía no son tan grandes en comparación con las diferencias “infinitas” generadas por el campo Zeeman de la terna laboratorio. En consecuencia, los términos del Hamiltoniano dipolo-dipolo que no conservan polarización, llamados *no-seculares*, se vuelven relevantes en la terna rotante. El signo de la contribución no-secular no puede invertirse experimentalmente. Luego, esos términos constituyen la perturbación $\hat{\Sigma}$, aquí representados por el Hamiltoniano *double quantum* (DQ):

$$\hat{\Sigma} = \hat{H}_{dq} = \sum_{i,j}^N J_{ij}^{dq}(N) [\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x - \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y] = \sum_{i,j}^N \frac{1}{2} J_{ij}^{dq}(N) [\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^+ + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^-]. \quad (7.6)$$

La constante de acoplamiento $J_{ij}^{dq}(N)$ satisface una definición análoga a la Ec. (7.3). Notar que $[\hat{H}_{dq}, \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^z] \neq 0$ dado que \hat{H}_{dq} mezcla subespacios cuyas proyecciones asociadas difieren en $\delta m_z = \pm 2$ [BMGP85, MPM87]. Experimentalmente, estas transiciones inter-subespacio se suprimen parcialmente incrementando la magnitud de la rf, es decir $\hbar\omega_1$ [Usa99, PLU+00].

Con el propósito de simular el procedimiento de LE, asumimos que la evolución *hacia delante* ocurre según el Hamiltoniano no perturbado $\hat{H}_0 = \hat{H}_{dip} + \hat{H}_Z$. Aún cuando esta evolución correspondería al sistema de referencia laboratorio, la inclusión del término \hat{H}_Z responde a una reversión simétrica. Además, dado que $[\hat{H}_{dip}, \hat{H}_Z] = 0$,

7.3 Ideas físicas subyacentes respecto a la dinámica del sistema

no se introduce dinámica no-trivial al procedimiento. A tiempo t_R , una secuencia de pulsos cambia el signo de \hat{H}_{dip} , y origina una evolución *hacia atrás* en presencia de la perturbación. Entonces, la evolución revertida está descrita por $-\hat{H}_0 + \hat{\Sigma} = -\hat{H}_{dip} - \hat{H}_Z + \hat{H}_{dq}$, la cual en el experimento se correspondería genuinamente con la terna rotante. Los operadores evolución para cada período de tiempo t_R son

$$\hat{U}_+(t_R) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_R\right] \quad (7.7)$$

y

$$\hat{U}_-(t_R) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(-\hat{H}_0 + \hat{\Sigma})t_R\right] \quad (7.8)$$

respectivamente. Estas definiciones son diferentes a las Ecs. (3.2) y (3.3). Aquí, la perturbación $\hat{\Sigma}$ actúa sólo durante la evolución “hacia atrás”, dado que ocurre en la terna rotante. Aún así, el operador LE se define como en la Ec. (3.4),

$$\hat{U}_{LE}(2t_R) = \hat{U}_-(t_R)\hat{U}_+(t_R), \quad (7.9)$$

y produce una refocalización imperfecta a tiempo $2t_R$, que formalmente se define según la Ec. (3.5) pero en la práctica se evalúa conforme a la Ec. (3.13).

7.3. Ideas físicas subyacentes respecto a la dinámica del sistema

7.3.1. La estructura espectral

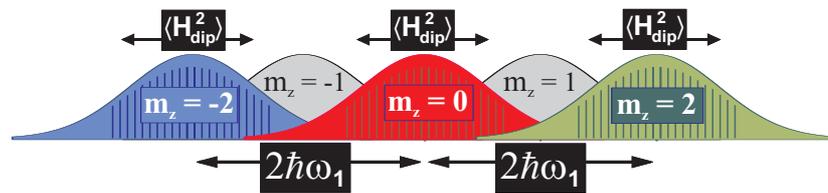


Figura 7.1: Esquema de la LDoS correspondiente a la distribución del estado inicial (Ec. (3.1)) sobre la base de autoestados del Hamiltoniano sin perturbar $\hat{H}_{dip} + \hat{H}_Z$.

La información contenida en el dominio temporal, esencialmente dada por la escala de tiempo experimental T_2 , puede complementarse con la imagen espectral provista por la LDoS. Tal como ya discutimos en los Capítulos 2 y 4, la LDoS exhibe cómo un estado particular se distribuye entre los autoestados de un dado Hamiltoniano. Aún

7. PROLIFERACIÓN DE INTERACCIONES EFECTIVAS: EQUILIBRACIÓN INDUCIDA POR DECOHERENCIA EN UN SISTEMA CUÁNTICO CERRADO

cuando nuestra evaluación de la dinámica no involucra diagonalización (ver Apéndice A), podemos inferir la estructura de la LDoS no perturbada ($\hat{H}_{dip} + \hat{H}_Z$) respecto al estado inicial definido en la Ec. (3.1). Para $\hbar\omega_1 = 0$, los subespacios de proyección están básicamente degenerados, y la LDoS es una única Gaussiana de ancho $\langle H_{dip}^2 \rangle = \sum_i \sigma_i^2/4 \simeq N\sigma_{dip}^2/4$, es decir el segundo momento *global* de \hat{H}_{dip} . Si $\hbar\omega_1 \gtrsim \sqrt{\langle H_{dip}^2 \rangle}$, la LDoS evidencia la separación de energía entre subespacios. Un subespacio de proyección m_z tiene energía media $E_{m_z} \simeq m_z\hbar\omega_1$, y por lo tanto la LDoS sin perturbar en cada subespacio es:

$$P_{m_z}(\varepsilon) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle H_{dip}^2 \rangle}} \exp\left[-\frac{(\varepsilon - E_{m_z})^2}{2\langle H_{dip}^2 \rangle}\right]. \quad (7.10)$$

La estructura de la LDoS aquí descrita se muestra en la Fig. (7.1). El dominio temporal puede reobtenerse usando la transformada de Fourier de $P_{m_z}(\varepsilon)$ [THVS14, THS14b, THS14a].

7.3.2. La probabilidad de supervivencia y equilibración

Análogamente a discusiones previas, como por ejemplo en las Ecs. (5.6) y (6.45), evaluamos las funciones de correlación “hacia adelante” $P_{1,1}(t)$ definidas para los Hamiltonianos introducidos en la Sección (7.2). En particular, definimos

$$P_{1,1}^{dip}(t) = 2 \langle \Psi_{neq} | \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{dip} t\right\} \hat{S}_1^z \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{dip} t\right\} | \Psi_{neq} \rangle, \quad (7.11)$$

$$P_{1,1}^{dq}(t) = 2 \langle \Psi_{neq} | \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{dq} t\right\} \hat{S}_1^z \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{dq} t\right\} | \Psi_{neq} \rangle, \quad (7.12)$$

y

$$P_{1,1}^{total}(t) = 2 \langle \Psi_{neq} | \exp\left\{\frac{i}{\hbar} (\hat{H}_{dip} + \hat{H}_{dq} + \hat{H}_Z) t\right\} \hat{S}_1^z \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} (\hat{H}_{dip} + \hat{H}_{dq} + \hat{H}_Z) t\right\} | \Psi_{neq} \rangle. \quad (7.13)$$

La Fig. 7.2 muestra la dependencia temporal explícita de estas funciones de correlación. Por un lado, observamos que \hat{H}_{dip} produce equilibración de la polarización en el sistema,

$$P_{1,1}^{dip}(t \gg \tau_{eq}) \simeq N^{-1}, \quad (7.14)$$

que esencialmente es el mismo comportamiento analizado para la Ec. (6.45). De hecho, aquí $\tau_{eq} \sim \hbar/\sqrt{\sigma_{dip}^2} \sim T_2$. Por otro lado, \hat{H}_{dq} destruye la polarización ya que

7.3 Ideas físicas subyacentes respecto a la dinámica del sistema

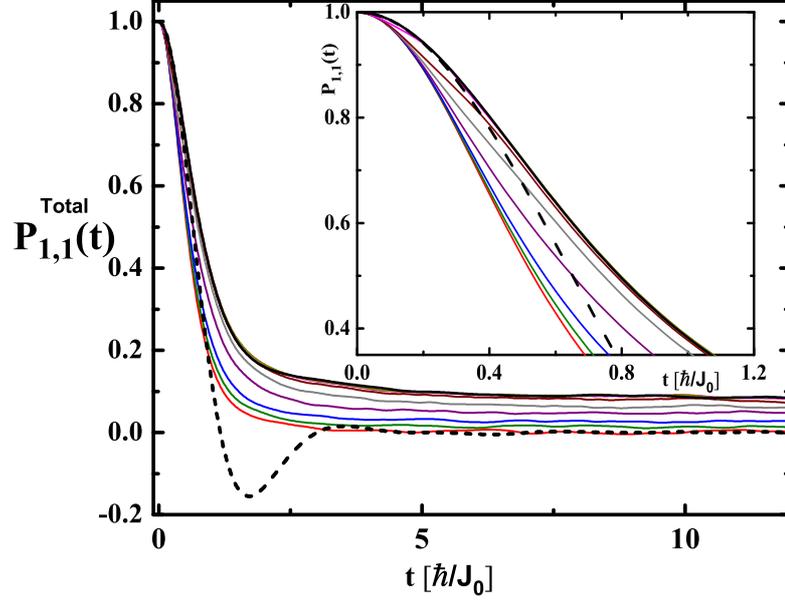


Figura 7.2: Funciones de autocorrelación o SP definidas en las Ecs. (7.11), (7.12) y (7.13). $P_{1,1}^{dip}(t)$ corresponde a la línea negra continua, $P_{1,1}^{dq}(t)$ a la línea negra a trazos, y $P_{1,1}^{total}(t)$ a las líneas en colores continuas (de abajo hasta arriba, aumentando $\hbar\omega_1$). Inset: dependencia a tiempos cortos.

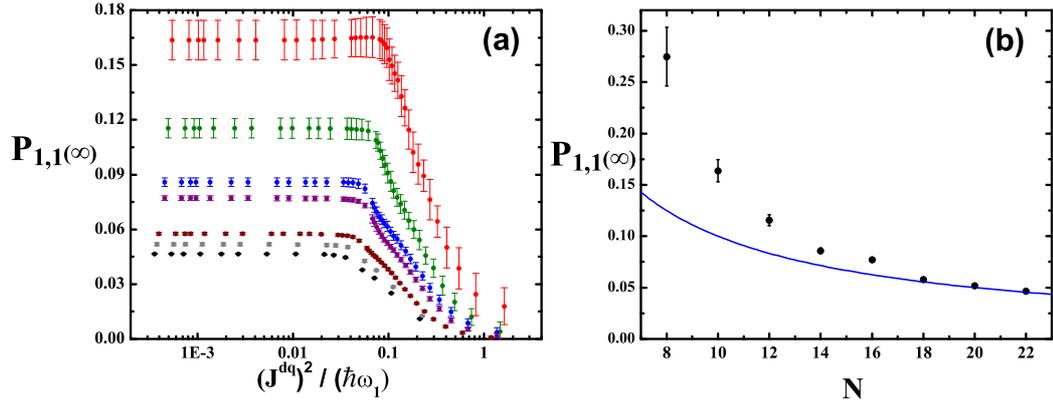


Figura 7.3: Asíntotas de la autocorrelación en la Ec. (7.13). (a) $P_{1,1}^{total}(t \gg \tau_{eq})$ como función de la perturbación. De arriba a abajo, $N = 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22$. (b) $P_{1,1}^{total}(t \gg \tau_{eq})$ para $(J^{dq})^2 / (\hbar\omega_1) \rightarrow 0$ como función de N . Esta cantidad corresponde a los plateaus en (a). La línea azul continua es $f(N) = N^{-1}$.

7. PROLIFERACIÓN DE INTERACCIONES EFECTIVAS: EQUILIBRACIÓN INDUCIDA POR DECOHERENCIA EN UN SISTEMA CUÁNTICO CERRADO

$$[\hat{H}_{dq}, \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^z] \neq 0,$$

$$P_{1,1}^{dq}(t \gg \tau_{eq}) \simeq \mathcal{O}(2^{-N}), \quad (7.15)$$

donde $\tau_{eq} \sim \hbar / \sqrt{\sigma_{dq}^2} \sim \hbar / \sqrt{\sigma_{dip}^2}$.

Resulta natural entonces preguntar por el comportamiento asintótico de $P_{1,1}^{total}(t)$. Éste se correspondería con el juego relativo entre la mezcla intersubespacio inducida por \hat{H}_{dq} y la efectividad de \hat{H}_Z en el truncamiento de tal mezcla. Luego, si $\hbar\omega_1$ es pequeño en comparación a un elemento de matriz típico J_{ij}^{dq} , entonces el comportamiento asintótico se correspondería con la Ec. (7.15). Por el contrario, si $\hbar\omega_1$ es lo suficientemente grande, la dinámica quedaría restringida dentro de los subespacios (*intra*-subespacio), y la asíntota sería como en la Ec. (7.14). De hecho, esto es lo que efectivamente observamos en la Fig. 7.2, y resumimos sistemáticamente en la Fig. 7.3. En particular, en la Fig. 7.3(a) mostramos $P_{1,1}^{total}(t \gg \tau_{eq})$ como función de $(J^{dq})^2 / (\hbar\omega_1)$. Tal parámetro cuantifica el grado de truncamiento de las transiciones DQ debido a la potencia de la rf $\hbar\omega_1$. El significado físico de esta magnitud se analiza explícitamente en la Sec. 7.3.3.

Para sistemas pequeños, la equilibración para $\hbar\omega_1$ grande corresponde a un valor levemente por encima del ideal $1/N$. Este efecto artificial y se originaría en algún tipo de frustración en el modelo específico utilizado. La Fig. 7.3(b) muestra que la asíntota $1/N$ se vuelve muy precisa para $N \gtrsim 18$.

7.3.3. De las interacciones virtuales a una FGR efectiva

Antes de evaluar explícitamente la dinámica LE, haremos un breve paréntesis para discutir un mecanismo físico crucial. Ya mencionamos en la Sec. 7.2 que la perturbación no secular $\hat{\Sigma}$ mezcla solamente estados de diferentes subespacios Zeeman ($\delta m_z = \pm 2$). En principio, esta condición impide la aplicación directa de la FGR en la manera que se presentó en la Sec. 2.4.2, pues se requiere la mezcla de infinitamente muchos estados cuasidegenerados. Sin embargo, ya desde una idea sugerida por los experimentos [PLU⁺00], la interacción DQ puede producir términos seculares efectivos que resultarían importantes en el TL. Formalizaremos ahora estas ideas mostrando cómo una pequeña perturbación no secular puede acoplar estados cuasidegenerados (mismo subespacio) a través de procesos virtuales que involucran estados excitados.

Un dado subespacio con proyección total m_z está acoplado vía la interacción DQ a los subespacios correspondientes con $m_z + 2$ y $m_z - 2$. En otras palabras, la perturbación

7.3 Ideas físicas subyacentes respecto a la dinámica del sistema

$\hat{\Sigma}$ produce transiciones con $\delta m_z = \pm 2$ que involucran una diferencia de energía de $2\hbar\omega_1$. Sin embargo, hay transiciones de orden más alto que evitan tal diferencia de energía. Por ejemplo, cuando el estado $|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ transiciona a $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ y luego a $|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$ (de regreso al subespacio inicial), obtenemos un *flip-flop* efectivo entre los espines 1 y 3. Esto constituye un acoplamiento efectivo intra-subespacio de orden $(J^{dq})^2/(\hbar\omega_1)$. Un proceso más sofisticado ocurre cuando $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ transiciona a $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ y luego de regreso a $|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$. En tal caso, tenemos una interacción efectiva de cuatro cuerpos. Luego, si los *gaps* de energía $\hbar\omega_1$ son muy grandes, las transiciones *inter*-subespacio quedan truncas, pero cobran relevancia aquellas *intra*-subespacio mediadas por subespacios satélite. El correspondiente Hamiltoniano efectivo que representa esta física es,

$$\hat{V}_{eff} \simeq \sum_{k,l}^N \sum_{i,j}^N \frac{J_{lk}^{dq} J_{ij}^{dq}}{8\hbar\omega_1} \left(\hat{S}_l^+ \hat{S}_k^+ \hat{S}_i^- \hat{S}_j^- + \hat{S}_l^- \hat{S}_k^- \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^+ \right). \quad (7.16)$$

La derivación de este Hamiltoniano efectivo se justifica ya sea usando GF [PTM02] o bien la teoría de Hamiltonianos promedio (AHT) [HW68]. Ambos procedimientos se discuten en el Apéndice B. Es importante notar que \hat{V}_{eff} puede de hecho mezclar estados cuasidegenerados con el mismo número cuántico m_z . Más aún, puede acoplar estados en el mismo subespacio que no estaban originalmente acoplados vía \hat{H}_{dip} . En la práctica, esto significa que aparecen elementos de matriz efectivos en lugares donde el \hat{H}_{dip} tenía entradas nulas. Esto constituye una considerable *proliferación* de interacciones.

En principio, pueden ocurrir interferencias destructivas. Por ejemplo, la transición del estado $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ a $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ y luego de regreso a $|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$ cancelaría la transición de $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ a $|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$ y luego de regreso a $|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$. Muchas de estas interferencias destructivas se originan en el modelo “todos contra todos”, es decir $J_{lk}^{dq} = J_{ij}^{dq}$ para cualesquiera índices l, k, i, j . En nuestro caso, removemos tales interferencias *randomizando* los parámetros k y χ . Otros modelos realistas, en los cuales la intensidad y el signo de las interacciones espín-espín depende de su posición espacial relativa, no exhibirían tales interferencias. Por el mismo argumento, las correcciones de *hopping* representadas en la Ec. (7.16) terminan por generar entradas casi aleatorias en el Hamiltoniano efectivo de cada subespacio. Esta proliferación justificaría el modelado de la dinámica usando Teoría de Matrices Aleatorias en sentido estándar en vez del uso del Ensamble Aleatorio de Dos Cuerpos [BF71, FGI96].

7. PROLIFERACIÓN DE INTERACCIONES EFECTIVAS: EQUILIBRACIÓN INDUCIDA POR DECOHERENCIA EN UN SISTEMA CUÁNTICO CERRADO

El paso natural consiste ahora en formular una descripción FGR efectiva inspirada en el procedimiento estándar de la Sec. 2.4.2. Consistentemente, definimos el segundo momento global de las interacciones efectivas:

$$\langle V_{eff}^2 \rangle = \left\langle \sum_{\beta} \left| \langle \beta | \hat{V}_{eff} | \alpha \rangle \right|^2 \right\rangle_{\alpha} = \left| a \frac{(J^{dq})^2}{2\hbar\omega_1} \right|^2, \quad (7.17)$$

donde a es un coeficiente geométrico que representa el número medio de estados acoplados a un dado estado α . Además, $\langle \cdot \rangle_{\alpha}$ denota el promedio sobre autoestados no perturbados α . En analogía a la Ec. (2.22),

$$\Gamma_{eff} \sim \pi \langle V_{eff}^2 \rangle d_{eff}^{-1} = \pi \left| a \frac{(J^{dq})^2}{2\hbar\omega_1} \right|^2 d_{eff}^{-1}, \quad (7.18)$$

donde d_{eff}^{-1} es la DDCS por la interacción efectiva. Puede estimarse como $d_{eff} \sim bJ^{dip}$, con algún coeficiente geométrico $b \ll 1$. Tanto a como b representan un juego sutil entre N , el número de coordinación de la red, las reglas de selección, etc.

En lo que sigue, presentaremos el estudio numérico de la dinámica LE para mostrar su dependencia en la magnitud de la perturbación efectiva $\Sigma_{eff} = (J^{dq})^2 / (\hbar\omega_1)$. Uno de los propósitos será verificar la validez de la FGR efectiva.

7.4. La dinámica LE

La Fig. 7.4 muestra dinámicas LE representativas para diferentes intensidades de perturbación Σ_{eff} . En particular, Figs. 7.4 (I) y (II) muestran una transición Gaussiana a exponencial a medida que Σ_{eff} disminuye. Una transición similar ya ha sido discutida para la SP de estados específicos [FI01b, SBI12a, SBI12b].

Las Figs. 7.4 (III) y (IV) muestran un plateau asintótico finito para $M_{1,1}(t \rightarrow \infty)$ que aparece cuando la perturbación es lo suficientemente pequeña (es decir, $\hbar\omega_1$ grande). Para cuantificar esta observación, graficamos en la Fig. 7.5 las asíntotas del LE como función de Σ_{eff} . Por debajo de un umbral de perturbación, alrededor de $\Sigma_{eff} \lesssim 0.05J_0$ en la Fig. 7.5, el LE se equilibra en un valor ligeramente superior a $1/N$. La equilibración asintótica $1/N$ se vuelve muy precisa para N mayor a 18, similar a lo que se muestra en la Fig. 7.3(b). Es importante remarcar que esta equilibración va más allá de la equilibración “hacia delante” de la Ec. (7.14). De hecho, la reversión perfecta la evolución dipolar desharía la equilibración “hacia delante”. Sin embargo, el hecho

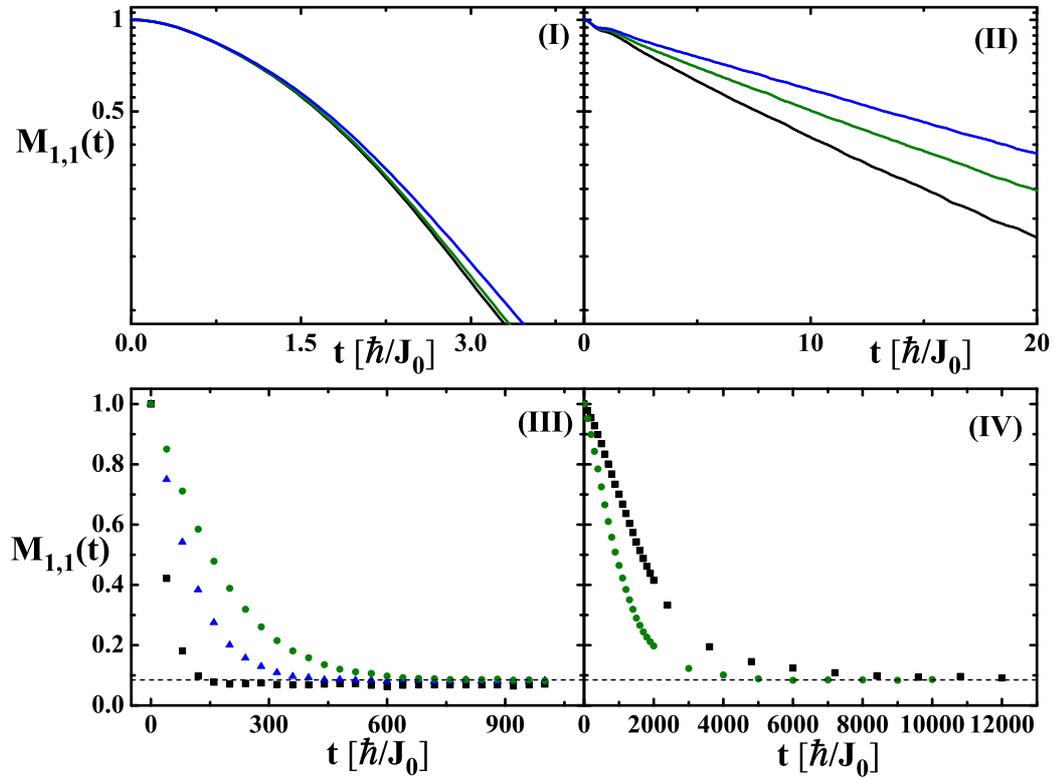


Figura 7.4: La dependencia explícita del LE, $N = 14$. Las magnitudes de $(J^{dq})^2/(\hbar\omega_1)$ en unidades de J_0 son, de arriba a abajo, (I): 0.67, 1.35, ∞ ; (II): 0.19, 0.21, 0.23; (III): 0.071, 0.048, 0.038; (IV): 0.013, 0.009. Los gráficos (I) y (II) están en escala log-lineal, mientras que los gráficos (III) y (IV) están en escala lineal.

7. PROLIFERACIÓN DE INTERACCIONES EFECTIVAS: EQUILIBRACIÓN INDUCIDA POR DECOHERENCIA EN UN SISTEMA CUÁNTICO CERRADO

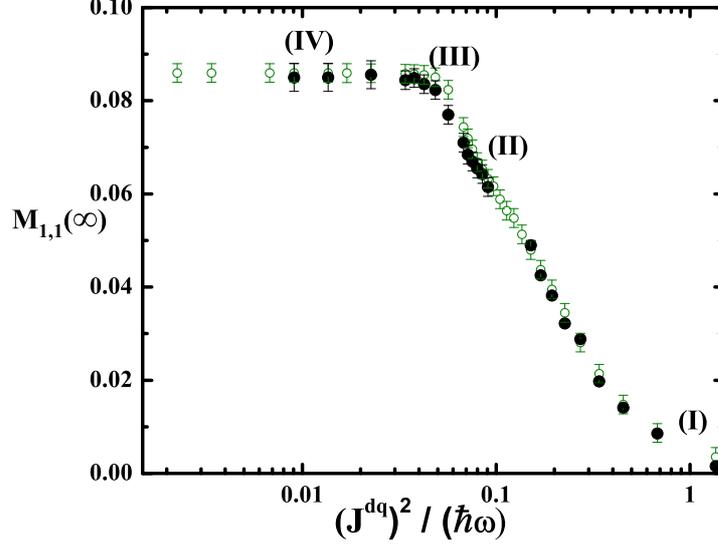


Figura 7.5: La asíntota del LE $M_{1,1}(t \rightarrow \infty)$ (puntos negros) como función de $(J^{dq})^2/(\hbar\omega_1)$ en unidades de J_0 . Las etiquetas I, II, III y IV corresponden a los casos representativos que se muestran en la Fig. 7.4. Los puntos verdes corresponden a $P_{1,1}^{total}(t \rightarrow \infty)$, tomado de la Fig. (7.3). $N = 14$.

que $M_{1,1}(t \rightarrow \infty)$ aun así permanezca $\sim 1/N$ significa que la perturbación estabiliza el desparramo de la polarización, convirtiéndolo en irreversible. Además, es notable que el estado final es consistente con la conservación de proyección total a pesar del carácter no-secular de la perturbación DQ. Esto indica la relevancia de las interacciones efectivas discutidas en la Sec. 7.3.3, ya que provee de un mecanismo específico de decaimiento del LE respetando la conservación de espín.

Para cuantificar el decaimiento del LE, definimos su tiempo característico de decaimiento τ_ϕ según $M_{1,1}(\tau_\phi) = 2/3$. Graficamos las tasas (inverso del tiempo) $1/\tau_\phi$ en la Fig. 7.6 como función de Σ_{eff} para $N = 12, 14, 16$. Para cada tamaño de sistema, identificamos el régimen donde la tasa de decaimiento es proporcional a Σ_{eff} y donde aumenta con el cuadrado de tal magnitud. El primer caso puede entenderse como estrictamente perturbativo, como en el decaimiento cuadrático descrito en las Ecs. (3.26) y (6.16). El segundo está asociado con la FGR efectiva, es decir Ec. (7.18), dado que $1/\tau_\phi - 1/\tau_{\phi,N}^0 \propto \Sigma_{eff}^2$ y $1/\tau_{\phi,N}^0 \rightarrow 0$ cuando $N \rightarrow \infty$. La observación numérica de que la entrada en el régimen FGR se mueve sistemáticamente hacia perturbaciones más débiles a medida que N aumenta constituye uno de los principales resultados de este

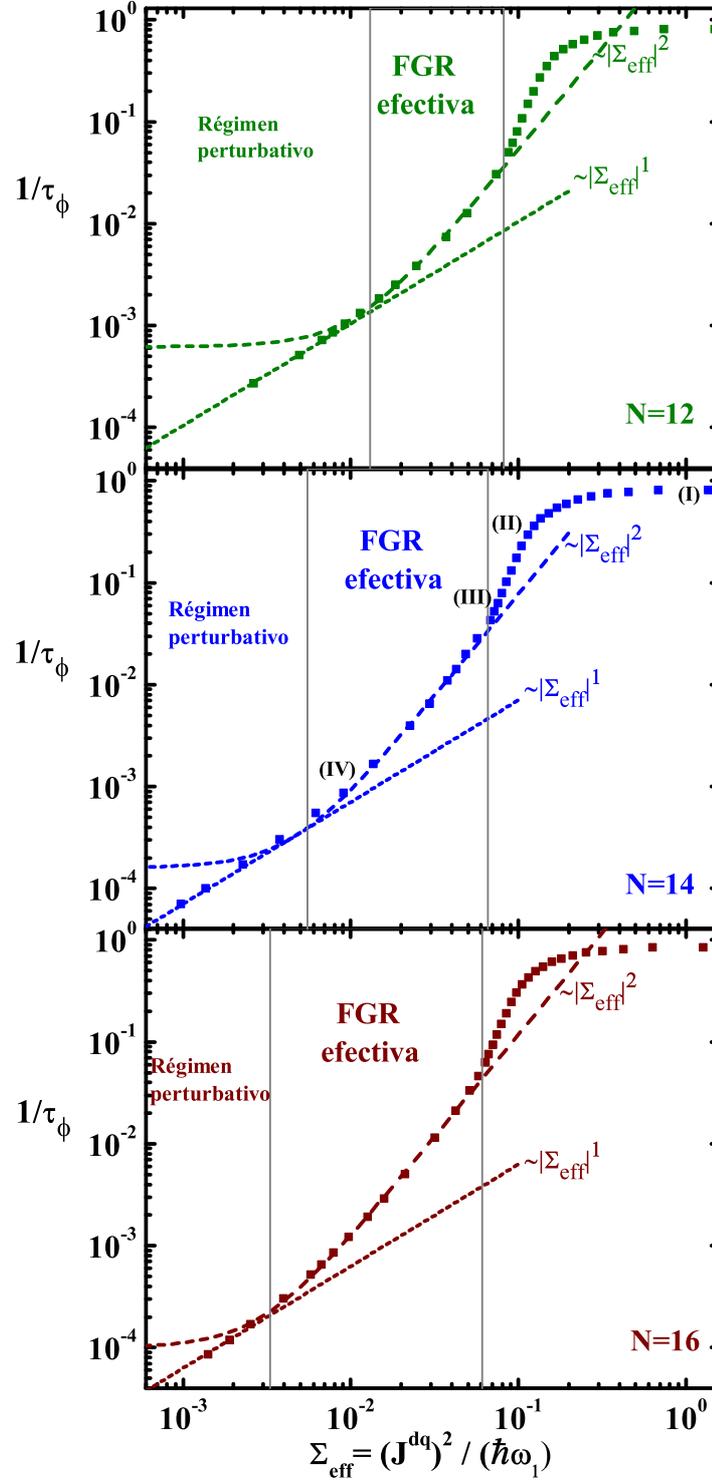


Figura 7.6: Las tasas de decaimiento del LE, $1/\tau_\phi$ (escala log, en unidades de J_0/\hbar) como función de la perturbación efectiva $\Sigma_{\text{eff}} = (J^{dq})^2 / (\hbar\omega_1)$ (escala log, unidades de J_0), para $N = 12, 14, 16$. Las etiquetas I, II, III y IV de las Figs. 7.4 y 7.5 están incluidas en el caso $N = 14$.

7. PROLIFERACIÓN DE INTERACCIONES EFECTIVAS: EQUILIBRACIÓN INDUCIDA POR DECOHERENCIA EN UN SISTEMA CUÁNTICO CERRADO

Capítulo.

La comparación entre las Figs. 7.5 y 7.6 para el caso $N = 14$ evidencia que el régimen donde la FGR efectiva es válida coincide con la equilibración $\sim 1/N$ de la polarización. Esto contrasta con el comportamiento no-ergódico esperado para el régimen perturbativo.

Reescribamos ahora nuestras observaciones explícitamente en términos de escalas de tiempo. Un avezado físico experimental podría tener a su disposición una rf $\hbar\omega_1$ extremadamente grande, pero en cualquier caso tal magnitud será siempre inevitablemente finita. Esto significa que hay una perturbación arbitrariamente pequeña (pero nunca nula) que tiene asociada un tiempo característico (finito) de la FGR efectiva τ_ϕ . Entonces, supongamos además que la evolución dipolar $\hat{U}_{dip}(t)$ lleva al sistema a equilibrar como en la Fig. (7.2). Más aún, asumamos que el sistema permanece equilibrado durante un tiempo $t > \tau_\phi$. Entonces tal equilibración *unitaria* se convierte en irreversible para cualquier propósito práctico.

7.5. La red 2D

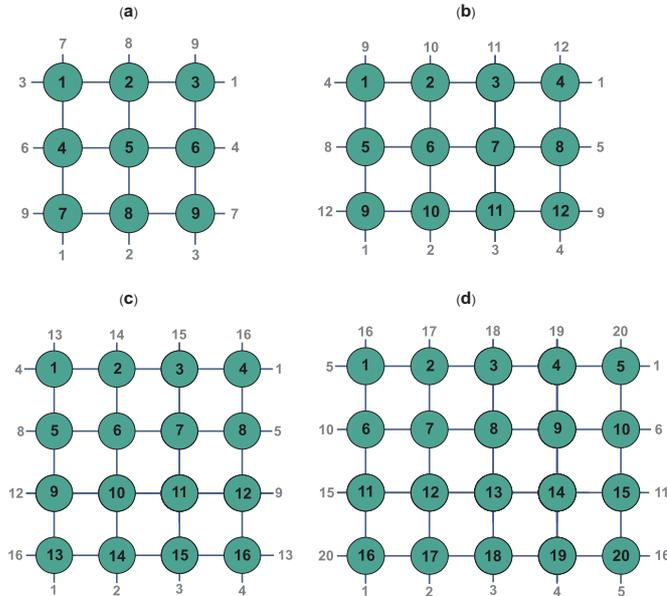


Figura 7.7: Las redes 2D con condiciones de borde periódicas. (a) $N = 9$, (b) $N = 12$, (c) $N = 16$, y (d) $N = 20$.

Los resultados numéricos discutidos anteriormente pueden reproducirse en una red jerárquica, en la cual el número de coordinación no dependen de N . En particular, consideramos una serie de redes 2D con condiciones de borde periódicas tal como se muestra en la Fig. 7.7. La emergencia de la FGR efectiva puede verificarse en la Fig. (7.8) donde las tasas $1/\tau_\phi$ se grafican como función de Σ_{eff} .

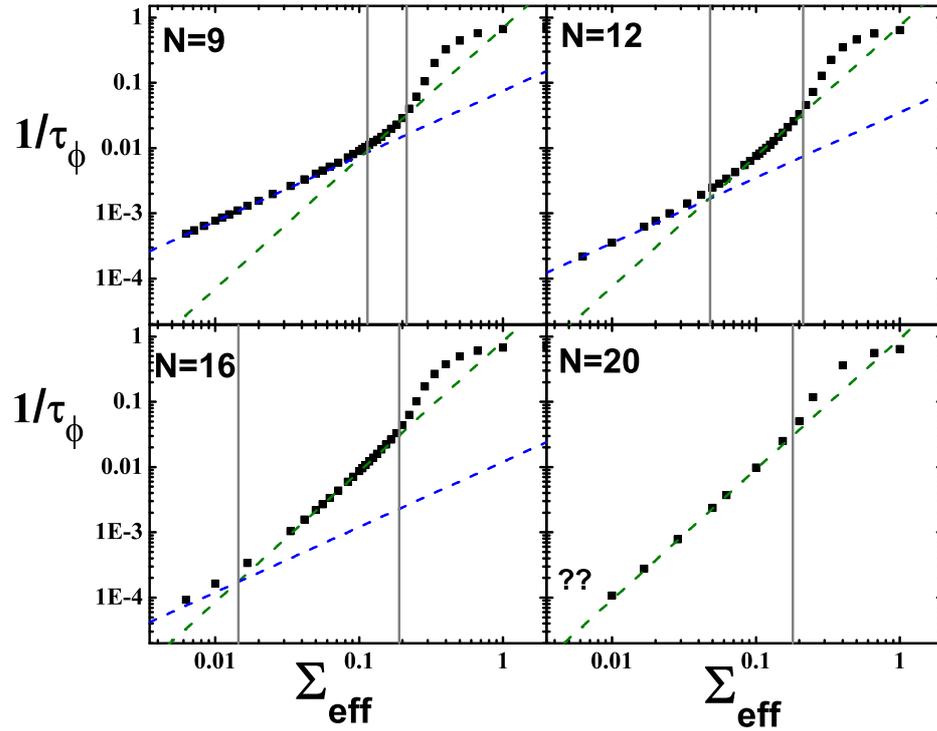


Figura 7.8: Las tasas de decaimiento del LE $1/\tau_\phi$ (escala log, en unidades de J_0/\hbar) como función de la perturbación efectiva $\Sigma_{eff} = (J^{dq})^2/(\hbar\omega_1)$ (unidades de J_0). Cada caso corresponde a una de las redes que se muestran en la Fig. 7.7. La línea azul a trazos representa la ley de potencias $(\Sigma_{eff})^1$, mientras que la línea verde a trazos representa $(\Sigma_{eff})^2$.

7.6. Conclusiones

Hemos evaluado el LE en una serie de sistemas finitos interactuantes cuya dinámica involucra el espacio de Hilbert completo. Con el propósito de analizar la emergencia del TL a medida que N aumenta, adoptamos primero un modelo con interacciones “todos contra todos” y luego un modelo 2D con condiciones de borde periódicas. La dinámica

7. PROLIFERACIÓN DE INTERACCIONES EFECTIVAS: EQUILIBRACIÓN INDUCIDA POR DECOHERENCIA EN UN SISTEMA CUÁNTICO CERRADO

dipolar “hacia delante” está dada por un Hamiltoniano dipolar truncado \hat{H}_0 que provee una descomposición natural del espacio de Hilbert en subespacios con proyección definida. Tal como en los experimentos originales, una perturbación no revertida $\hat{\Sigma}$ acopla los subespacios, que a su vez están separados por *gaps* de energía controlables.

Analizamos un régimen en el cual la perturbación induce interacciones efectivas de dos y cuatro cuerpos, que pueden mezclar estados cuasidegenerados. Estos estados no estaban acoplados originalmente por la interacción dipolar truncada. Además, dado que las interacciones efectivas tienen menos restricciones en cuanto a sus reglas de selección, terminan proliferando en cada subespacio. En tal régimen, el decaimiento del LE está caracterizado por una FGR efectiva cuyo dominio de validez se ensancha hacia perturbaciones cada vez más débiles a medida que N aumenta. El análisis de este umbral sigue una secuencia específica en los límites: primero $N \rightarrow \infty$ y luego $\|\hat{\Sigma}\| \rightarrow 0^+$. Concluimos que, en el TL, cualquier pequeña perturbación produce un decaimiento del LE regido por una FGR efectiva que lleva a la equilibración de la polarización en el sistema.

En sentido estricto, la dinámica “hacia delante” puede equilibrar asintóticamente la polarización local en el sistema. La observación más importante, radica en que si el sistema permanece equilibrado por un tiempo mayor al de la FGR efectiva, entonces permanecerá *irreversiblemente* en ese estado. En otras palabras, la excitación permanece homogéneamente distribuida a pesar de la reversión. Por lo tanto, aún cuando el estado equilibrado contenga correlaciones que codifican el estado inicial, tales correlaciones son inútiles en presencia de una perturbación arbitrariamente pequeña. Cualquier intento de revertir la dinámica resultaría infructuoso.

Las contribuciones originales en este Capítulo fueron publicadas en:

“*Proliferation of effective interactions: Decoherence-induced equilibration in a closed many-body system*”, Pablo R. Zangara, Denise Bendersky, and Horacio M. Pastawski, [Phys. Rev. A **91**, 042112 \(2015\)](#).

Capítulo 8

Conclusiones finales

En esta Tesis evaluamos sistemáticamente la dinámica cuántica de sistemas de muchos cuerpos con el fin de estudiar varios fenómenos interrelacionados: decoherencia, equilibración, localización e irreversibilidad. Los métodos involucrados incluyen tanto técnicas analíticas como numéricas. Por un lado, la herramienta analítica más relevante empleada fue el formalismo de funciones de Green (GF), ya sea en la representación energía o como propagadores temporales. Por otro lado, la evaluación numérica de la dinámica de los sistemas de espines se realizó mediante un algoritmo de Trotter-Suzuki altamente optimizado implementado en procesadores gráficos (GPU).

En primer lugar, consideramos un sistema de dos estados cuya dinámica coherente se degrada progresivamente debido a la presencia de un ambiente 1D de espines débilmente acoplado. Evaluamos la evolución temporal (“hacia delante” en el tiempo) y la dinámica de *decoherencia* se obtuvo a partir del decaimiento de una probabilidad de supervivencia. Allí, nuestro principal objetivo era cuantificar las escalas de tiempo involucradas en el proceso de decoherencia, utilizando la regla de oro de Fermi (FGR) como nuestro paradigma fundamental. Las tasas de decaimiento FGR analíticas fueron evaluadas de acuerdo con aproximaciones Markovianas y no Markovianas. En el primer caso, la tasa FGR se evalúa en el centro espectral y en consecuencia se pierde la dependencia en energía. Por lo tanto, no hay efectos de memoria ni “juego coherente” entre el sistema y el ambiente. En el segundo caso, la tasa FGR surge de un cálculo exacto auto-consistente que requiere el conocimiento preciso de los polos de la GF. En ambos casos, la tasa FGR resulta ser el producto entre una apropiada densidad de estados directamente conectados (DDCS) y el segundo momento de la interacción sistema-ambiente.

8. CONCLUSIONES FINALES

Además, la forma funcional de la DDCS depende no sólo de la estructura espectral particular del ambiente sino también de cómo interactúan específicamente sistema y el ambiente. Por ejemplo, se demostró que una interacción Ising con un ambiente 1D de espines produce una correspondiente DDCS que puede ser identificada como una densidad 2D de estados de una partícula.

El siguiente paso consiste en abordar el problema anterior en un escenario de muchos cuerpos interactuantes. Entonces, consideramos la dinámica de un exceso de polarización local que evoluciona en un sistema de muchos espines. Como antes, la evolución coherente de tal excitación se degrada por el acoplamiento débil a un ambiente de espines. Con el fin de cuantificar la decoherencia, introdujimos un procedimiento de reversión temporal que nos llevó a definir el eco de Loschmidt (LE) como una función de autocorrelación de espín $M_{1,1}$. Luego, evaluamos numéricamente el LE en una configuración tipo escalera de espines, es decir, dos cadenas XY (integrables) acopladas lateralmente. Una de ellas hace las veces de sistema y la otra de ambiente, con lo cual la dinámica en la primera es reversible, mientras que en la segunda no lo es. La integrabilidad se pierde completamente debido al acoplamiento inter-cadena. Mostramos que las tasas de decaimiento del LE escalan con la magnitud del acoplamiento según la FGR. Por otra parte, estas tasas pueden separarse en dos contribuciones asociadas a dos procesos específicos en la interacción sistema-ambiente. Estos son los términos XY e Ising presentes en el Hamiltoniano inter-cadena. Siempre que haya una contribución Ising finita, se observa un *offset* en la dependencia de la tasa FGR como función del acoplamiento (precisamente en el límite de acoplamiento cero). Esto sugiere que tal interacción impone una ruptura abrupta de integrabilidad. Además, es muy sugerente de un posible mecanismo hacia una *decoherencia independiente de perturbación* (PID). En general, el enfoque LE demostró ser particularmente útil en un problema de muchos cuerpos, ya que filtra la parte irrelevante de la dinámica (en este caso, la integrable y sus interferencias específicas) y permite enfocarse precisamente sobre cómo una dinámica coherente se destruye por la perturbación. Además, dado que el LE proporciona un acceso continuo a la dinámica de la decoherencia, compara favorablemente con respecto al análisis estándar basado en la degradación de interferencias *hacia delante* en el tiempo.

Luego pasamos a considerar sistemas cerrados de N espines. Allí, presentamos la idea de *equilibración*. En el caso de nuestra excitación local, equilibración significa que

debido a las interacciones espín-espín, la polarización se desparrama en todos los espines del sistema, lo que conduce a una distribución uniforme de tal observable. A partir de entonces, el valor esperado de la polarización se mantiene cercano a $1/N$ durante la mayor parte del tiempo, incluso cuando la dinámica es totalmente unitaria. Generalizamos esta idea para varios observables de pocos cuerpos, y analizamos las fluctuaciones temporales alrededor de los valores asintóticos estacionarios (equilibrados). Mostramos que la amplitud de las fluctuaciones temporales disminuyen con N según $\sim \exp(-\kappa N)$, anulándose en el límite termodinámico (TL). Este comportamiento se cumple para una amplia variedad de estados iniciales, Hamiltonianos y observables. En particular, el coeficiente κ guarda relación con cómo se distribuye el estado inicial respecto a la base de autoestados del Hamiltoniano (densidad local de estados). Más precisamente, κ depende de cuán cercana o similar es dicha distribución respecto a la máxima distribución posible (“distribución caótica”) o *energy shell*. El máximo valor de κ se observó para estados iniciales dados por estados de superposición aleatoria.

La llamada “ruptura de ergodicidad” impide que se produzca la equilibración de observables. Esta situación particular ocurre cuando los sistemas son extremadamente interactuantes o bien por presencia de un potencial desordenado. Más precisamente, un sistemas de espines limpio (sin desorden) pero con fuertes interacciones Ising evidencia un comportamiento vítreo, asociado a la fase aislante de Mott. Paralelamente, un sistema no interactuante, pero totalmente desordenado sufre una transición de Anderson a un régimen localizado, en el que una excitación local no puede difundir. Si tanto las interacciones como el desorden están presentes, se produce un juego no trivial entre tales procesos. Esto conduce a un diagrama de fases dinámicas que muestra las regiones ergódicas y no ergódicas. Allí, una transición específica “de extendido a localizado” (es decir, de ergódico a no ergódico) ha generado recientemente intenso debate: la *localización de muchos cuerpos*. Esta última indica la aparición de una fase localizada cuando el desorden aumenta para un valor fijo de interacciones.

Nuestro enfoque para estudiar el diagrama mencionado, basado en la evaluación del LE para un sistema finito dado, reveló una sorprendente topografía en la que las fases ergódicas y no ergódicas se interponen mutuamente. Además, proporcionamos una estimación de las líneas críticas que separan la fase ergódica de las fases no ergódicas alrededor de las transiciones Mott y Anderson. Las incertidumbres de energía introducidas por, respectivamente, el desorden y las interacciones, promueven esos umbrales a

8. CONCLUSIONES FINALES

líneas críticas que se doblan hacia perturbaciones más fuertes. Cabe destacar que las estimaciones de las líneas críticas se encuentran en buen acuerdo con el diagrama de fases derivado de la dinámica LE. Adicionalmente, nuestros resultados indican que la transición vítrea-ergódico, que se observa al aumentar el desorden desde cero en un sistema con fuertes interacciones, es un buen candidato para una abrupta QDPT.

Posteriormente, realizamos un análisis más detallado del LE, definido como la autocorrelación local $M_{1,1}$, en el que identificamos sus dos contribuciones no locales. Esto nos llevó a definir un LE *global* o *de muchos cuerpos*, M_{MB} , que resulta ser el análogo a la definición del LE de un cuerpo [JP01]. Mostramos también la relación formal entre $M_{1,1}$ y M_{MB} , en lo que concierne a escalas de tiempo características y dependencia en N . En particular, mediante el análisis de una expansión a tiempos cortos, derivamos una ley de escala $M_{MB} \sim (M_{1,1})^{N/4}$ que da cuenta de la extensividad de M_{MB} . Esto significa que la refocalización de un estado de muchos espines resulta de la refocalización de la configuración de cada espín individual, como si fueran eventos estadísticamente independientes. La evaluación numérica en un modelo de espines particular mostró que el exponente disminuye ligeramente con el tiempo, a partir del valor inicial $N/4$. Esto implica que la refocalización del estado de un espín individual está positivamente correlacionada con la probabilidad de recuperar la configuración de sus vecinos.

Discutimos una serie de ideas operacionales para transformar un LE local en uno global, por medio de una preparación dinámica (LE preparado dinámicamente, DPLE). El DPLE se basa en una evolución unitaria, una “preparación”, que crea un estado con N_t espines correlacionados. Tal número crece con el tiempo de preparación, que a su vez es representativo de la escala de tiempo espín-espín típica, es decir T_2 . A posteriori, el estado correlacionado de N_t espines juega el papel de estado inicial para un procedimiento de LE. En la práctica confirmamos que cuanto más correlacionado el estado es, más frágil se vuelve frente a perturbaciones. Por otra parte, mientras que para un sistema finito el decaimiento satura en una escala de tiempo específica, que se corresponde a la del LE global de una superposición aleatoria, en un sistema infinito la tasa de decaimiento aumentaría indefinidamente. Esto parece consistente con la idea de una irreversibilidad emergente o *hipótesis central de irreversibilidad*, dado que ese crecimiento de la contribución a la tasa de decaimiento que depende del tiempo de preparación, podría finalmente provocar que dicha contribución controle todo el

decaimiento. Además, es importante hacer hincapié en que la preparación dinámica propuesta puede ser, en principio, implementada experimentalmente.

Por último, pero no menos importante, nos focalizamos en la pregunta sobre cómo perturbaciones débiles, que son bastante ineficaces en sistemas pequeños, pueden producir decoherencia y por lo tanto irreversibilidad cuando proliferan a medida que el sistema aumenta su tamaño. Esta pregunta está en el corazón de la NMR. Ciertamente, los experimentos mostraron que el decaimiento del LE resulta de un juego sutil entre la escala de tiempo que caracteriza las interacciones reversibles (T_2) y las de la perturbación (τ_Σ). Esa competencia terminaría generando la escala observada experimentalmente, T_3 . Sorprendentemente, se encontró que T_3 resulta ser mucho más pequeña que τ_Σ y fuertemente dependiente de T_2 , resultado que se conoce como el régimen PID experimental. Tal PID disparó la idea que en sistema de espines interactuantes infinitamente grande, la dinámica reversible (T_2) podría favorecer la acción de cualquier pequeña interacción no invertida que perturba al procedimiento de reversión. Así, las interacciones reversibles se volverían determinantes para la tasa de irreversibilidad.

Con el fin de poner a prueba la expectativa anterior, evaluamos el LE en una serie de sistemas de espines cuyo tamaño se incrementa progresivamente. Tanto las interacciones controladas (reversibles) como las perturbaciones (no reversibles) son compatibles con un experimento real. Cuantificamos numéricamente las escalas de tiempo del decaimiento del LE en función de la magnitud de la perturbación. Mostramos que si tal perturbación excede cierto límite inferior, que se identifica para cada tamaño del sistema, entonces el decaimiento está gobernado por una FGR efectiva. Precisamente, tal decaimiento está originado por interacciones efectivas inducidas por la perturbación que proliferan con el tamaño del sistema, y que conducen a una equilibración completa y uniforme de la polarización. Cabe destacar que el límite inferior de este régimen disminuye cuando N aumenta (a expensas de la desaparición del régimen perturbativo), convirtiéndose en el mecanismo dominante para el decaimiento del LE en el TL. Así, en el TL y para una perturbación arbitrariamente pequeña, una vez que el polarización quedó “equilibrada” por un tiempo mayor al de la FGR, permanecerá equilibrada aún cuando se aplique un procedimiento de reversión. Se trata entonces de un *mecanismo emergente* por el cual la equilibración unitaria de un observable se convierte, en última instancia, en irreversible.

8. CONCLUSIONES FINALES

8.1. De cara al futuro: algunas ideas *emergentes*

¿Es posible ir más allá y explicar, numéricamente o analíticamente, el régimen PID observado experimentalmente? Esta pregunta fundamental aún permanece abierta.

Uno de nuestro resultados importantes radica en que, más allá del régimen de tiempos cortos, el decaimiento del LE debe estar completamente regido por la función de correlación $M_X \equiv M_{1,1} - M_{MB}$. Si bien el régimen de tiempos muy cortos está enteramente gobernado por el segundo momento de la perturbación, inmediatamente después M_X amplía el efecto de las perturbaciones locales en la escala dinámica T_2 construyendo correlaciones de largo alcance. Sin embargo, en una simulación de $N = 14$ espines mostramos que $M_X \simeq M_{1,1}$ sólo para tiempos muy largos. Esta observación indica que la excitación local inicial explora todo el espacio de Hilbert demasiado rápido. Entonces, si quisiéramos describir tal exploración en un espacio casi ilimitado como el correspondiente a un cristal real, tendríamos que disponer de tamaños de sistema considerablemente mayores. Además, el sistema ideal debería ser una red verdaderamente jerárquica, en la cual el espacio de Hilbert se “habilite” progresivamente a medida que la dinámica reversible conduzca a la excitación a explorar el sistema. Por lo tanto, desde el punto de vista numérico, los tamaños de sistema considerados en esta Tesis no son suficientemente grandes para evidenciar la existencia de un régimen PID y en última instancia, capturar la emergencia de la escala de tiempo T_3 .

El enfoque analítico parece haber abierto nuevos horizontes, que siguen siendo un desafío. Por ejemplo, se podría intentar evaluar la expansión en serie que se presentó en la Ec. (6.20). En concreto, sería necesario calcular o quizás sólo estimar la suma de los procesos de orden superior (en la escala T_2) que visten al término perturbativo.

En paralelo al enfoque LE, se podría también trabajar en la derivación de una ecuación cinética usando la técnica de Keldysh. Allí, el ingrediente crucial a emplear sería básicamente una condición de *autoconsistencia* como la que discutimos en el Capítulo 2. Esto nos permitiría sumar un expansión a orden infinito en procesos seleccionados o diagramas de Feynman. En este contexto, un ejemplo paradigmático viene dado por la derivación de las ecuaciones de Bloch realizada por Langreth y Wilkins [LW72, SLW76]. Por supuesto, la pregunta crucial a responder es cuál sería la ecuación de Dyson apropiada que debe plantearse, ya que la irreversibilidad en sí misma es automática al imponer la condición de autoconsistencia.

Apéndice A

El algoritmo de Trotter-Suzuki

A.1. Resolviendo la ecuación de Schrödinger eficientemente

La evolución temporal de un sistema de espines cuánticos está descrita por la ecuación de Schrödinger, en la cual un operador Hamiltoniano \hat{H} contiene toda la información acerca de la dinámica, incluyendo campos externos e interacciones espín-espín. La estrategia “académica” para resolver tal ecuación se basa en encontrar los autovectores de \hat{H} y expandir el estado del sistema $|\psi\rangle$ en términos de dichos autovectores[Mer98]. Esta tarea puede convertirse en un desafío computacional importante, dado que la dimensionalidad del espacio de Hilbert subyacente aumenta exponencialmente con el número de espines N en el sistema. En muchas aplicaciones prácticas, este escenario obliga a tratar problemas con pocos espines o bien invocar simetrías específicas para acotar el espacio de Hilbert adecuadamente.

En la actualidad, existen muchas estrategias alternativas que pueden utilizarse para obtener evolución *aproximada* en lugar de la exacta (obtenida por diagonalización de \hat{H}). Cualquier método confiable tiene que proveer una evolución unitaria, es decir, debe conservar la probabilidad durante la evolución. Por ejemplo, la integración numérica del tipo Runge-Kutta no cumple tal condición. En cambio, el algoritmo de Trotter-Suzuki (TS) [DRDR83, DRM06] sí preserva unitariedad, dado que aproxima el operador evolución exacto mediante una secuencia de operadores de evolución parciales adecuadamente elegidos. Estos operadores parciales se corresponden con pequeños pasos temporales, que deben ser lo suficientemente cortos en función de la precisión

A. EL ALGORITMO DE TROTTER-SUZUKI

deseada. Además, conviene señalar que el método TS no implica ningún truncamiento del espacio de Hilbert. Esta observación es importante pues el truncamiento del espacio de Hilbert conlleva a una reducción de las escalas de tiempo accesibles (dentro del rango de confiabilidad del método). De hecho, muchos métodos aproximados basados en el truncamiento del espacio de Hilbert, tales como el grupo de renormalización de la matriz densidad (dependiente del tiempo) [PZ07] o las técnicas tipo redes tensoriales [MHCBn12], no proveen acceso a la dinámica asintótica.

En los últimos años, las unidades de procesamiento gráfico (GPU) se han empleado exitosamente para acelerar algoritmos numéricos que resuelven la ecuación de Schrödinger [BD11, WC13, BK11]. La mayoría de estas implementaciones involucran dinámicas de un cuerpo en presencia de un potencial externo. Sin embargo, la arquitectura de la GPU tiene un potencial enorme en un amplio rango de problemas de muchos cuerpos interactuantes, tales como los sistemas de espines considerados en esta Tesis. En particular, las interacciones espín-espín proveen una complejización sustancial que se convierte en un desafío no sólo para la implementación de métodos numéricos, sino también para la física de no-equilibrio.

En este apéndice introduciremos la implementación de un algoritmo TS de orden 4^{to} que constituye el corazón de nuestra evaluación numérica de la dinámica de espines. Más precisamente, utilizaremos la llamada descomposición XYZ [DRHMDR00]. Al combinarse con la arquitectura de la GPU, tal descomposición termina por proveer un cálculo masivamente paralelizado. Los detalles técnicos específicos acerca de la programación GPU se discuten en las Refs. [DBZP13] y [Den12].

A.2. Dinámica de espines 1/2: la descomposición XYZ

Resumimos aquí el algoritmo TS para sistemas de espines tal como se presenta en la Ref. [DRM06]. Consideramos un Hamiltoniano de espín independiente del tiempo:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} h_j^\alpha \hat{S}_j^\alpha + \sum_{j,k=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} J_{j,k}^\alpha \hat{S}_j^\alpha \hat{S}_k^\alpha, \quad (\text{A.1})$$

donde \hat{S}_j^α es el operador de espín en el sitio j y $\alpha = x, y, z$. Los parámetros h_j^α definen los campos locales o “corrimientos químicos”, con la condición $\langle h_j^\alpha \rangle \equiv 0$, mientras que $J_{j,k}^\alpha$ son las constantes de acoplamiento entre espines.

A.2 Dinámica de espines 1/2: la descomposición XYZ

Asumimos que el sistema de N espines está inicialmente descrito por un vector de estado $|\Psi_0\rangle$, que es expandido en la base computacional Ising:

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{2^N} c_i |\beta_i\rangle. \quad (\text{A.2})$$

Aquí, c_i son coeficientes complejos y $|\beta_i\rangle$ son productos tensoriales de los autovectores de cada \hat{S}_j^z , comúnmente referidos como la base *Ising*. El estado del sistema a un tiempo arbitrario t está dado formalmente por $|\Psi_t\rangle = \hat{\mathbf{U}}(t) |\Psi_0\rangle = e^{-it\hat{H}/\hbar} |\Psi_0\rangle$. Por simplicidad, fijaremos aquí $\hbar = 1$.

La idea central del método TS se basa en encontrar un “descomposición” adecuada de \hat{H} que provea un conjunto de evoluciones parciales *simples* que aproximen la evolución exacta $\hat{\mathbf{U}}(t)$. Si consideramos la Ec. (A.1) como una suma particular de términos $\hat{H} = \hat{H}_1 + \dots + \hat{H}_K$, luego:

$$\hat{\mathbf{U}}(t) = e^{-it\hat{H}} = e^{-it(\hat{H}_1 + \dots + \hat{H}_K)} = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(\prod_k e^{-\frac{it\hat{H}_k}{m}} \right)^m.$$

La aproximación a $\hat{\mathbf{U}}(t)$ a primer orden es

$$\hat{\mathbf{U}}(t) \simeq \tilde{\mathbf{U}}_1(t) = e^{-it\hat{H}_1} \dots e^{-it\hat{H}_K}, \quad (\text{A.3})$$

mientras que las aproximaciones de segundo y cuarto orden pueden escribirse como:

$$\tilde{\mathbf{U}}_2(t) = \tilde{\mathbf{U}}_1^\dagger(-t/2) \tilde{\mathbf{U}}_1(t/2),$$

$$\tilde{\mathbf{U}}_4(t) = \tilde{\mathbf{U}}_2(at) \tilde{\mathbf{U}}_2(at) \tilde{\mathbf{U}}_2((1-4a)t) \tilde{\mathbf{U}}_2(at) \tilde{\mathbf{U}}_2(at),$$

donde $a = 1/(4 - 4^{1/3})$. Estas son *buenas* aproximaciones de $\hat{\mathbf{U}}(t)$ bajo la condición que t sea suficientemente pequeño en comparación con la escala de tiempo más rápida determinada por \hat{H} . Ese rol lo juega el segundo momento local de las interacciones. Esto significa que las evoluciones parciales deben realizarse en sucesivos pasos temporales t tal que:

$$t \ll \left[\max_{j,k} \|H_{j,k}\| \right]^{-1} \simeq \left[\max_{j,k} \left[\sum_{\alpha=x,y,z} \left(\frac{h_j^\alpha}{2} \right)^2 + \sum_{\alpha=x,y,z} \left(\frac{J_{j,k}^\alpha}{4} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right]^{-1} \quad (\text{A.4})$$

Veamos ahora cómo construir explícitamente un operador $\tilde{\mathbf{U}}_1(t)$ dado por la Ec. (A.3) usando el Hamiltoniano total de la Ec. (A.1). La elección “natural” para la

A. EL ALGORITMO DE TROTTER-SUZUKI

descomposición viene dada por los términos un espín y los términos espín-espín. Cada uno de ellos, deberá rotarse adecuadamente para obtener su representación diagonal. Con tal propósito, consideramos los operadores que rotan los ejes X e Y al eje Z :

$$R_{\pi/2}^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, R_{-\pi/2}^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

y satisfacen:

$$\begin{aligned} (R_{\pi/2}^y)^\dagger \hat{S}^x R_{\pi/2}^y &= \hat{S}^z, \\ (R_{-\pi/2}^x)^\dagger \hat{S}^y R_{-\pi/2}^x &= \hat{S}^z. \end{aligned}$$

Estos operadores rotan, respectivamente, \hat{S}^x y \hat{S}^y a \hat{S}^z . El objetivo es aplicar sólo correcciones de fase “diagonales” en la base computacional Ising. La evolución parcial $\exp[-it h_j^\alpha \hat{S}_j^\alpha]$ produce una fase trivial (desde el punto de vista de la implementación) para $\alpha = z$, mientras que para $\alpha = x, y$ se requiere la aplicación de las rotaciones $R_{\pi/2,j}^y$ y $R_{-\pi/2,j}^x$ respectivamente. El índice j etiqueta cada espín, y las correspondientes rotaciones globales se definen según $Y = \bigotimes_j R_{\pi/2,j}^y$ y $X = \bigotimes_j R_{-\pi/2,j}^x$.

Consideremos primero las operaciones de un espín,

$$\exp\left(-it \left[\sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} h_j^\alpha \hat{S}_j^\alpha \right]\right) \simeq \prod_{\alpha=x,y,z} \exp\left[-it \sum_{j=1}^N h_j^\alpha \hat{S}_j^\alpha\right]. \quad (\text{A.6})$$

Aquí, notamos que la igualdad aproximada se justifica en la validez de la Ec. (A.4). Como mencionamos más arriba, las exponenciales no triviales se rotan:

$$\begin{aligned} \exp\left[-it \sum_{j=1}^N h_j^x \hat{S}_j^x\right] &= Y \exp\left(-it \sum_{j=1}^N h_j^x \hat{S}_j^z\right) Y^\dagger, \\ \exp\left[-it \sum_{j=1}^N h_j^y \hat{S}_j^y\right] &= X \exp\left(-it \sum_{j=1}^N h_j^y \hat{S}_j^z\right) X^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Estas operaciones de un espín puede computarse exactamente sin recurrir a rotaciones ni a la aproximación dada por la Ec. (A.6). Sin embargo, nuestro propósito aquí radica en escribir todas las evoluciones parciales en una forma explícitamente diagonal. De hecho, la implementación del método (y en particular, su paralelización) explota particularmente esa manera de proceder.

A.2 Dinámica de espines 1/2: la descomposición XYZ

En analogía con la Ec. (A.6), los operadores de espín-espín resultan:

$$\exp\left(-it\left[\sum_{j,k=1}^N\sum_{\alpha=x,y,z}J_{j,k}^\alpha\hat{S}_j^\alpha\hat{S}_k^\alpha\right]\right)\simeq\prod_{\alpha=x,y,z}\exp\left(-it\left[\sum_{j,k=1}^NJ_{j,k}^\alpha\hat{S}_j^\alpha\hat{S}_k^\alpha\right]\right)\quad(\text{A.8})$$

Nuevamente, los términos en la dirección Z involucran operadores diagonales:

$$e^{itJ_{j,k}^z\hat{S}_j^z\hat{S}_k^z}=\begin{bmatrix} e^{itJ_{j,k}^z/4} & & & \\ & e^{-itJ_{j,k}^z/4} & & \\ & & e^{-itJ_{j,k}^z/4} & \\ & & & e^{itJ_{j,k}^z/4} \end{bmatrix}.\quad(\text{A.9})$$

Los restantes términos espín-espín deben rotarse adecuadamente,

$$\begin{aligned}\exp\left(-it\left[\sum_{j,k=1}^NJ_{j,k}^\alpha\hat{S}_j^\alpha\hat{S}_k^\alpha\right]\right)&=Y\exp\left(-it\left[\sum_{j,k=1}^NJ_{j,k}^x\hat{S}_j^x\hat{S}_k^x\right]\right)Y^\dagger, \\ \exp\left(-it\left[\sum_{j,k=1}^NJ_{j,k}^\alpha\hat{S}_j^\alpha\hat{S}_k^\alpha\right]\right)&=X\exp\left(-it\left[\sum_{j,k=1}^NJ_{j,k}^y\hat{S}_j^y\hat{S}_k^y\right]\right)X^\dagger.\end{aligned}\quad(\text{A.10})$$

De las Ecs. (A.7) y (A.10), puede notarse que las rotaciones para operadores de un espín y operadores espín-espín pueden realizarse simultáneamente. En tal sentido, la implementación del algoritmo TS aquí descrita ha sido intencionalmente adaptada para permitir su paralelización.

A. EL ALGORITMO DE TROTTER-SUZUKI

Apéndice B

El sistema de tres niveles

Consideremos un sistema tres niveles cuyo Hamiltoniano viene dado por:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} E_1 & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & E_2 & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & E_3 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

La situación física que nos interesa es $V_{ij} \simeq E_1 \simeq E_2 \ll E_3$, ya que en el caso de espines se corresponde con la separación de energías Zeeman entre dos subespacios de diferente proyección (m_z). Aquí, esta diferencia induce una descomposición natural del espacio de Hilbert en dos subespacios: uno de ellos expandido por los estados 1 y 2, que llamaremos A , y el subespacio expandido por el estado 3, que llamaremos B . Luego, definimos los proyectores ortogonales \mathcal{P} y $\mathcal{Q} = (\mathbf{I} - \mathcal{P})$, los cuales proyectan sobre los subespacios A y B respectivamente.

Asumimos que el subespacio A tiene una energía media $E_0 \simeq \frac{1}{2}(E_1 + E_2)$, y que la diferencia de energía $E_3 - E_0$ se corresponde con la diferencia de energía Zeeman $\hbar\omega_1$. Presentaremos y discutiremos dos estrategias para construir explícitamente un Hamiltoniano efectivo que provea una descripción *equivalente* a la Ec. (B.1). Esencialmente, queremos estudiar cómo un subespacio particular es afectado por el acople con otro de energía radicalmente diferente ($\hbar\omega_1 \gg 0$). El primer método consiste en una expansión perturbativa para los propagadores (GF) en la representación energía. El segundo se basa en un promedio de los operadores evolución de acuerdo con la teoría de Hamiltonianos promedio (AHT, por sus siglas en inglés), es decir, un cálculo explícito en el dominio temporal.

B. EL SISTEMA DE TRES NIVELES

B.1. Teoría de perturbaciones a orden infinito

Consideremos primero la proyección de \hat{H} en el subespacio A , que describe al subespacio A *aislado*:

$$\hat{H}_A = \mathcal{P}\hat{H}\mathcal{P}, \quad (\text{B.2})$$

cuyo correspondiente propagador o GF es:

$$G_A^{(0)}(\varepsilon) = \begin{bmatrix} \varepsilon - E_1 & -V_{12} \\ -V_{21} & \varepsilon - E_2 \end{bmatrix}^{-1}. \quad (\text{B.3})$$

Análogamente, siendo

$$\hat{H}_B = \mathcal{Q}\hat{H}\mathcal{Q} = (\mathbf{I} - \mathcal{P})\hat{H}(\mathbf{I} - \mathcal{P}) \quad (\text{B.4})$$

la proyección al subespacio B *aislado*, la GF correspondiente es:

$$G_B^{(0)}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - E_3}. \quad (\text{B.5})$$

La interacción que acopla ambos subespacios es:

$$V_{AB} = \mathcal{P}\hat{H}\mathcal{Q} = \mathcal{P}\hat{H}(\mathbf{I} - \mathcal{P}), \quad (\text{B.6})$$

$$V_{BA} = \mathcal{Q}\hat{H}\mathcal{P} = (\mathbf{I} - \mathcal{P})\hat{H}\mathcal{P}. \quad (\text{B.7})$$

La serie perturbativa para G_A es:

$$\begin{aligned} G_A &= G_A^{(0)} + G_A^{(0)}V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} + G_A^{(0)}V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)}V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} + \dots \\ G_A &= G_A^{(0)} \left[\mathbf{I} + V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} + \left(V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} \right)^2 + \left(V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} \right)^3 + \dots \right] \\ G_A &= G_A^{(0)} \left[\mathbf{I} + V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} \left[\mathbf{I} + \left(V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} \right) + \left(V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} \right)^2 + \dots \right] \right] \\ G_A &= G_A^{(0)} \left[\mathbf{I} + V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A \right] \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

que es conocida como ecuación de Dyson para G_A . Definiendo la *self-energy* $\Sigma_A =$

B.1 Teoría de perturbaciones a orden infinito

$V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}$, la ecuación de Dyson toma la forma

$$G_A = \frac{1}{\left[G_A^{(0)}\right]^{-1} - V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}} = \frac{1}{\left[G_A^{(0)}\right]^{-1} - \Sigma_A} \quad (\text{B.9})$$

$$= \left[\begin{array}{cc} \varepsilon - E_1 - \frac{V_{13}V_{31}}{\varepsilon - E_3} & -V_{12} - \frac{V_{13}V_{32}}{\varepsilon - E_3} \\ -V_{21} - \frac{V_{23}V_{31}}{\varepsilon - E_3} & \varepsilon - E_2 - \frac{V_{23}V_{32}}{\varepsilon - E_3} \end{array} \right]^{-1} \quad (\text{B.10})$$

$$= \left[\left(\begin{array}{cc} \varepsilon - E_1 & -V_{12} \\ -V_{21} & \varepsilon - E_2 \end{array} \right) - \left(\begin{array}{cc} \Sigma_{11}(\varepsilon) & \Sigma_{12}(\varepsilon) \\ \Sigma_{21}(\varepsilon) & \Sigma_{22}(\varepsilon) \end{array} \right) \right]^{-1} \\ = [\varepsilon I - \tilde{H}_A(\varepsilon)]^{-1}. \quad (\text{B.11})$$

Notemos que la *self-energy* es una matriz $\Sigma_A(\varepsilon)$ que representa un acople efectivo entre estados en el subespacio A mediado por un estado virtual en el subespacio B . Similarmente, podemos escribir la serie perturbativa para G_B :

$$\begin{aligned} G_B &= G_B^{(0)} + G_B^{(0)} \left[V_{BA}G_A^{(0)}V_{AB}G_B^{(0)} \right] + G_B^{(0)} \left[V_{BA}G_A^{(0)}V_{AB}G_B^{(0)} \right]^2 + \dots \\ G_B &= G_B^{(0)} \left[\mathbf{I} + V_{BA}G_A^{(0)}V_{AB}G_B \right] \\ G_B &= \frac{1}{\left[G_B^{(0)}\right]^{-1} - V_{BA}G_A^{(0)}V_{AB}} \\ G_B &= \frac{1}{\varepsilon - E_3 - \left(\frac{(\varepsilon - E_1)V_{32}V_{23} + (\varepsilon - E_2)V_{31}V_{13} + V_{31}V_{12}V_{23} + V_{32}V_{21}V_{13}}{(\varepsilon - E_1)(\varepsilon - E_2) - V_{12}V_{21}} \right)} \\ G_B &= \frac{1}{\varepsilon - \underbrace{(E_3 + \Sigma_3(\varepsilon))}_{\tilde{E}_3}} \\ G_B &= \frac{1}{\varepsilon - \tilde{E}_3(\varepsilon)} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Hasta aquí, todos los argumentos expuestos son exactos. El paso siguiente consiste en introducir aproximaciones para construir explícitamente un Hamiltoniano efectivo independiente de energía a partir de los dos bloques ortogonales correspondientes a cada subespacio. Deshacerse de la dependencia en energía es esencialmente equivalente a la WBA discutida en el Capítulo 2, es decir, la evaluación de un tasa FGR en una “energía representativa”. De hecho, para el subespacio A consideraremos $E_1 = E_0 + \delta E$, $E_2 = E_0 - \delta E$ y $\varepsilon \simeq \frac{1}{2}(E_1 + E_2) = E_0$. Por lo tanto aproximaremos $\Sigma_A(\varepsilon) \simeq \Sigma_A(E_0)$. Para el subespacio B , la aproximación consiste en evaluar $\Sigma_3(E_3)$ y quedarse con los

B. EL SISTEMA DE TRES NIVELES

órdenes dominantes. Luego, una buena aproximación para la dinámica está dada por el siguiente Hamiltoniano efectivo:

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} \tilde{E}_1 & \tilde{V}_{12} & 0 \\ \tilde{V}_{21} & \tilde{E}_2 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{E}_3 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.13})$$

donde

$$\tilde{E}_1 = E_1 - \frac{V_{13}V_{31}}{(E_3 - E_0)}, \quad (\text{B.14})$$

$$\tilde{E}_2 = E_2 - \frac{V_{23}V_{32}}{(E_3 - E_0)}, \quad (\text{B.15})$$

$$\tilde{V}_{12} = V_{12} - \frac{V_{13}V_{32}}{(E_3 - E_0)}, \quad (\text{B.16})$$

$$\tilde{E}_3 = E_3 + \frac{V_{32}V_{23}}{(E_3 - E_0)} + \frac{V_{31}V_{13}}{(E_3 - E_0)}. \quad (\text{B.17})$$

B.2. Teoría de Hamiltonianos promedio (AHT)

La idea ahora será lidiar explícitamente con el dominio temporal usando la imagen de interacción para separar la dinámica rápida “Zeeman” cuyo período es $t_c = 2\pi/\omega_1$. Nuestro propósito es, como en el caso anterior, generar un Hamiltoniano efectivo [HW68, EBW04] cuya dinámica aproxime la exacta al menos para un conjunto discreto de tiempos $t_n = nt_c$.

Separaremos entonces el Hamiltoniano original $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_B$ de acuerdo con la diferencia de energía ($E_3 - E_0$):

$$\hat{H}_1 = \hat{H} - Q(E_3 - E_0) \quad (\text{B.18})$$

$$= \begin{bmatrix} E_1 & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & E_2 & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & E_0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.19})$$

y

$$\hat{H}_B = Q(E_3 - E_0) \quad (\text{B.20})$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (E_3 - E_0) \end{bmatrix}. \quad (\text{B.21})$$

B.2 Teoría de Hamiltonianos promedio (AHT)

Siguiendo el procedimiento estándar de la AHT [EBW04], el operador evolución completo se separa en dos factores,

$$\hat{U}(t) = \hat{U}_B(t)\hat{U}_1(t), \quad (\text{B.22})$$

con

$$\begin{aligned} \hat{U}_B(t) &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t\right] \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \exp[-\frac{i}{\hbar}(E_3 - E_0)t] \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

y

$$U_1(t) = T \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \tilde{H}_1(t_1) dt_1\right]. \quad (\text{B.24})$$

Aquí, T representa el operador ordenamiento temporal y $\tilde{H}_1(t)$ es la representación de \hat{H}_1 en la imagen de interacción con respecto a \hat{H}_B ,

$$\tilde{H}_1(t) = \hat{U}_B^\dagger(t)\hat{H}_1\hat{U}_B(t). \quad (\text{B.25})$$

La receta a seguir implica la realización de observaciones estroboscópicas, lo cual se traduce en $\hat{U}(nt_c) = \hat{U}_1(t_c)^n$. El siguiente paso consiste en el cálculo de los promedios en la Ec. (B.24), y así obtener

$$\hat{U}_1(t_c) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\bar{H}_1 t_c\right] \quad (\text{B.26})$$

$$= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\bar{H}_1^{(0)} + \bar{H}_1^{(1)} + \bar{H}_1^{(2)} + \dots\right)t_c\right]. \quad (\text{B.27})$$

El orden cero es:

$$\begin{aligned} \bar{H}_1^{(0)} &= \frac{1}{t_c} \int_0^{t_c} U_B^\dagger(t_1)^{-1} \hat{H}_1 U_B(t_1) dt_1. \\ &= \begin{bmatrix} E_1 & V_{12} & 0 \\ V_{21} & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

El orden 1 es:

$$\begin{aligned} \bar{H}_1^{(1)} &= \frac{-i}{2t_c} \int_0^{t_c} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \left[U_B^\dagger(t_2)^{-1} \hat{H}_1 U_B(t_2), U_B^\dagger(t_1)^{-1} \hat{H}_1 U_B(t_1) \right] \\ &= \begin{bmatrix} -\frac{V_{13}V_{31}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{V_{13}V_{32}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{(E_1 - E_0)V_{13} + V_{12}V_{23}}{(E_3 - E_0)} \\ -\frac{V_{23}V_{31}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{V_{23}V_{32}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{(E_2 - E_0)V_{23} + V_{21}V_{13}}{(E_3 - E_0)} \\ -\frac{(E_1 - E_0)V_{31} + V_{32}V_{21}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{(E_2 - E_0)V_{32} + V_{31}V_{12}}{(E_3 - E_0)} & \frac{V_{31}V_{13}}{(E_3 - E_0)} + \frac{V_{32}V_{23}}{(E_3 - E_0)} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

B. EL SISTEMA DE TRES NIVELES

El Hamiltoniano anterior puede simplificarse aproximando $(E_1 - E_0) \simeq (E_2 - E_0) \simeq 0$. Luego, hasta orden 1, el Hamiltoniano promedio \bar{H}_1 está dado por:

$$\bar{H}_1^{(0)} + \bar{H}_1^{(1)} = \begin{bmatrix} E_1 - \frac{V_{13}V_{31}}{(E_3 - E_0)} & V_{12} - \frac{V_{13}V_{32}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{V_{12}V_{23}}{(E_3 - E_0)} \\ V_{21} - \frac{V_{23}V_{31}}{(E_3 - E_0)} & E_2 - \frac{V_{23}V_{32}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{V_{21}V_{13}}{(E_3 - E_0)} \\ -\frac{V_{32}V_{21}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{V_{31}V_{12}}{(E_3 - E_0)} & E_0 + \frac{V_{31}V_{13}}{(E_3 - E_0)} + \frac{V_{32}V_{23}}{(E_3 - E_0)} \end{bmatrix} \quad (\text{B.30})$$

Este Hamiltoniano representa un sistema de tres niveles cuyas energías son casi degeneradas ($\sim E_0$). Una inspección detallada revela que el subespacio A está acoplado al subespacio B por elementos de matriz que son un orden de magnitud más pequeños que los elementos en A (que son del orden $\sim E_0$),

$$E_3 \gg E_0, V_{ij} \Rightarrow \frac{V_{12}V_{23}}{(E_3 - E_0)} \sim \frac{V_{ij}^2}{E_3} \ll V_{ij}. \quad (\text{B.31})$$

Esto implica que los subespacios A y B están de hecho débilmente acoplados. Es importante notar que hasta orden 1, el Hamiltoniano promedio \bar{H}_1 proyectado en el subespacio A provee el mismo Hamiltoniano efectivo que en la Ec. (B.13),

$$\mathcal{P} \left(\bar{H}_1^{(0)} + \bar{H}_1^{(1)} \right) \mathcal{P} = \mathcal{P} \tilde{H} \mathcal{P}, \quad (\text{B.32})$$

que incluye la interacción efectiva dentro del subespacio A mediada por el subespacio B . Sin embargo, resultaría natural preguntarse por los elementos de matriz que acoplan los subespacios A y B en la Ec. (B.30). Si asumimos que el subespacio A no tiene dinámica, es decir $V_{12} = V_{21} = 0$, luego el mencionado acople desaparece y por lo tanto ambas estrategias proveen el mismo Hamiltoniano efectivo,

$$\bar{H}_1^{(0)} + \bar{H}_1^{(1)} = \tilde{H}. \quad (\text{B.33})$$

En las Figs. B.1 y B.2 comparamos evoluciones típicas usando: el Hamiltoniano efectivo dado por la Ec. (B.13), la aproximación a orden 1 obtenida por AHT, es decir Ec. (B.30), y la diagonalización exacta de la Ec. (B.1). En particular, evaluaremos la SP

$$P_{1,1}(t) = \left| \langle \psi | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right] | \psi \rangle \right|^2 \quad (\text{B.34})$$

donde $|\psi\rangle = (1, 0, 0)^T$. La Fig. B.1 está dada por $V_{ij} = J_0 \forall i, j$, $E_1 = 1.01J_0$, $E_2 = 0.99J_0$, $E_3 = 50J_0$, mientras que la Fig. B.2 corresponde a el mismo caso pero sin

B.2 Teoría de Hamiltonianos promedio (AHT)

dinámica intrínseca en el subespacio A , es decir $V_{1,2} = V_{2,1} = 0$. Observamos que ambas estrategias reproducen la dinámica exacta satisfactoriamente. Más aún, dado que la Ec. (B.13) ya provee una buena aproximación a la solución exacta, la inclusión de términos efectivos inter-subespacio (como en la Ec. (B.30)) parece innecesaria.

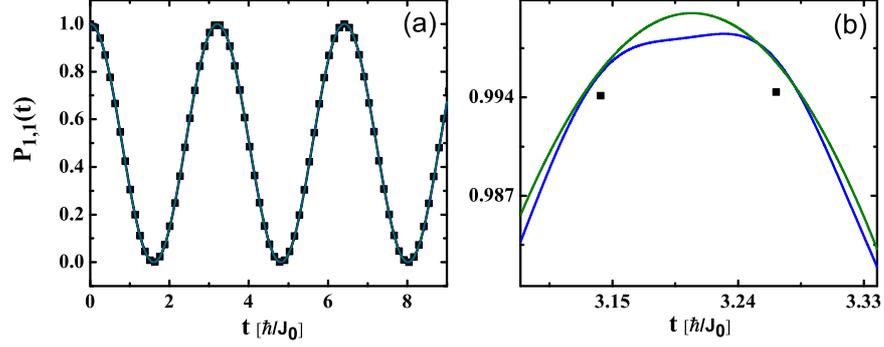


Figura B.1: La SP definida en la Ec. (B.34). Aquí, $V_{ij} = J_0 \forall i, j$, $E_1 = 1.01J_0$, $E_2 = 0.99J_0$, $E_3 = 50J_0$. Puntos negros: observación estroboscópica correspondiente a la AHT, Ec. (B.30). Las líneas continuas verde y azul corresponden al Hamiltoniano efectivo definido en la Ec. (B.13) y la diagonalización exacta de la Ec. (B.1), respectivamente. (a) Varios oscilaciones de Rabi; (b) sección detallada de la dependencia temporal.

B. EL SISTEMA DE TRES NIVELES

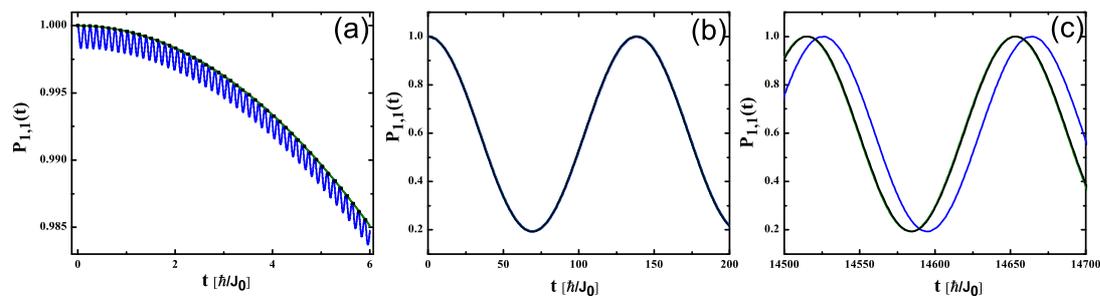


Figura B.2: La SP definida en la Ec. (B.34). Aquí, $V_{ij} = J_0 \forall i, j \notin \{1, 2\}$, $V_{1,2} = V_{2,1} = 0$, $E_1 = 1.01J_0$, $E_2 = 0.99J_0$, $E_3 = 50J_0$. Línea continua negra: observación estroboscópica correspondiente a la AHT, Ec. (B.30). Las líneas continuas verde y azul corresponden al Hamiltoniano efectivo en la Ec. (B.13) y la diagonalización exacta de la Ec. (B.1), respectivamente. (a) Una sección detallada de la dependencia temporal, batidos de alta frecuencia se observan en la solución exacta. (b) Varias oscilaciones de Rabi. (c) Para tiempos suficientemente largos, la diferencia de frecuencias entre la solución exacta y las dos aproximaciones se hace evidente.

Bibliografía

- [AALR79] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, and T.V. Ramakrishnan. *Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions*. Phys. Rev. Lett., 42:673–676, Mar 1979. [108](#)
- [AAS10] I.L. Aleiner, B.L. Altshuler, and G.V. Shlyapnikov. *A finite-temperature phase transition for disordered weakly interacting bosons in one dimension*. Nat. Phys., 6:900–904, Nov 2010. [11](#), [99](#)
- [ADLP06] G.A. Álvarez, E.P. Danieli, P.R. Levstein, and H.M. Pastawski. *Environmentally induced quantum dynamical phase transition in the spin swapping operation*. J. Chem. Phys., 124(19):194507, 2006. [10](#), [20](#)
- [ADLP07] G.A. Álvarez, E.P. Danieli, P.R. Levstein, and H.M. Pastawski. *Decoherence under many-body system-environment interactions: A stroboscopic representation based on a fictitiously homogenized interaction rate*. Phys. Rev. A, 75(6):062116, Jun 2007. [38](#)
- [ADLP08] G.A. Álvarez, E.P. Danieli, P.R. Levstein, and H.M. Pastawski. *Quantum Parallelism as a Tool for Ensemble Spin Dynamics Calculations*. Phys. Rev. Lett., 101(12):120503, Sep 2008. [49](#), [50](#), [115](#)
- [ADLP10] G.A. Álvarez, E.P. Danieli, P.R. Levstein, and H.M. Pastawski. *Decoherence as attenuation of mesoscopic echoes in a spin-chain channel*. Phys. Rev. A, 82(1):012310, Jul 2010. [46](#), [54](#), [56](#), [60](#), [61](#), [63](#), [64](#)
- [AH14] M. Arndt and K. Hornberger. *Testing the limits of quantum mechanical superpositions*. Nat. Phys., 10:271–277, Apr 2014. [19](#)
- [Alv07] G.A. Alvarez. *Decoherence of many-spin systems in NMR: From molecular characterization to an environmentally induced quantum dynamical phase transition*. PhD thesis, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina, 2007. [17](#), [19](#), [35](#), [37](#)
- [And58] P.W. Anderson. *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*. Phys. Rev., 109:1492–1505, Mar 1958. [10](#), [97](#)
- [And72] P.W. Anderson. *More Is Different*. Science, 177:393–396, Aug 1972. [1](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [And78] P.W. Anderson. *Local moments and localized states*. Rev. Mod. Phys., 50:191–201, Apr 1978. [10](#), [54](#), [95](#), [96](#), [97](#), [119](#)
- [AS64] M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*. Number 55 in Applied mathematics series. U.S. Govt. Print. Off., 1964. [39](#), [41](#)
- [AS10] G.A. Álvarez and D. Suter. *NMR Quantum Simulation of Localization Effects Induced by Decoherence*. Phys. Rev. Lett., 104(23):230403, Jun 2010. [111](#)
- [AS11] G.A. Álvarez and D. Suter. *Localization effects induced by decoherence in superpositions of many-spin quantum states*. Phys. Rev. A, 84:012320, Jul 2011. [135](#)
- [ASK15] G.A. Álvarez, D. Suter, and R. Kaiser. *Localization-delocalization transition in the dynamics of dipolar-coupled nuclear spins*. Science, 349:846–848, Aug 2015. [111](#), [135](#)
- [BAA06] D.M. Basko, I.L. Aleiner, and B.L. Altshuler. *Metal insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-particle states*. Ann. Phys. - New York, 321:1126–1205, May 2006. [11](#)
- [BBC⁺94] P. Blanchard, G. Bolz, M. Cini, G.F. de Angelis, and M. Serva. *Localization stabilized by noise*. J. Stat. Phys., 75:749–755, May 1994. [66](#)
- [BCH11] M.C. Bañuls, J.I. Cirac, and M.B. Hastings. *Strong and Weak Thermalization of Infinite Nonintegrable Quantum Systems*. Phys. Rev. Lett., 106(5):050405, Feb 2011. [89](#)
- [BD11] C.S. Bederián and A.D. Dente. *Boosting quantum evolutions using Trotter-Suzuki algorithms on GPUs*. Proceedings of HPCLatAm 2011: High-Performance Computing Symposium, 40:63–75, 2011. [160](#)
- [BDN12] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbéne. *Quantum simulations with ultracold quantum gases*. Nat. Phys., 8:267–276, Apr 2012. [8](#)
- [Ber94] M. Berry. *Asymptotics, singularities and the reduction of theories*. Proc. 9th Int. Cong. Logic, Method., and Phil. of Sci., pages 597–607, 1994. [1](#), [2](#)
- [Bet31] H.A. Bethe. *On the Theory of Metal I. Eigenvalues and Eigenfunctions of a Linear Chain of Atoms*. Z. Phys., 71:205, 1931. [70](#)
- [BF71] O. Bohigas and J. Flores. *Two-body random Hamiltonian and level density*. Phys. Lett. B, 34:261–263, Mar 1971. [71](#), [145](#)
- [BFF⁺81] T.A. Brody, J. Flores, J.B. French, P.A. Mello, A. Pandey, and S.S.M. Wong. *Random-matrix physics: spectrum and strength fluctuations*. Rev. Mod. Phys., 53:385, 1981. [68](#)

- [BH70] M. Blume and J. Hubbard. *Spin Correlation Functions at High Temperatures*. Phys. Rev. B, 1:3815–3830, May 1970. [12](#)
- [BH84] R.G. Brewer and E.L. Hahn. *Atomic Memory*. Sci. Am., 251:50–57, Dec 1984. [3](#), [12](#)
- [BI05] G.P. Berman and F.M. Izrailev. *The Fermi–Pasta–Ulam problem: Fifty years of progress*. Chaos, 15(1):015104, 2005. [5](#), [96](#)
- [BK11] H. Bauke and C.H. Keitel. *Accelerating the Fourier split operator method via graphics processing units*. Comput. Phys. Commun., 182(12):2454 – 2463, 2011. [160](#)
- [Blu96] K. Blum. *Density Matrix Theory and Applications*. Physics of Atoms and Molecules. Plenum Press, New York, 1996. [7](#)
- [BMGP85] J. Baum, M. Munowitz, A.N. Garroway, and A. Pines. *Multiple quantum dynamics in solid state NMR*. J. Chem. Phys., 83(5), 1985. [140](#)
- [BPM12] J.H. Bardarson, F. Pollmann, and J.E. Moore. *Unbounded Growth of Entanglement in Models of Many-Body Localization*. Phys. Rev. Lett., 109:017202, Jul 2012. [96](#), [99](#), [108](#)
- [BR12] R. Blatt and C.F. Roos. *Quantum simulations with trapped ions*. Nat. Phys., 8:277–284, Apr 2012. [8](#)
- [BZP13] D. Bendersky, P.R. Zangara, and H.M. Pastawski. *Fragility of superposition states evaluated by the Loschmidt echo*. Phys. Rev. A, 88:032102, Sep 2013. [15](#), [49](#)
- [Cap14] P. Cappellaro. *Implementation of State Transfer Hamiltonians in Spin Chains with Magnetic Resonance Techniques*. In G.M. Nikolopoulos and I. Jex, editors, *Quantum State Transfer and Network Engineering*, pages 183–222. Springer Berlin Heidelberg, 2014. [45](#), [47](#)
- [CCGI93] G. Casati, B.V. Chirikov, I. Guarneri, and F.M. Izrailev. *Band-random-matrix model for quantum localization in conservative systems*. Phys. Rev. E, 48:R1613, 1993. [69](#), [70](#)
- [CCGI96] G. Casati, B.V. Chirikov, I. Guarneri, and F.M. Izrailev. *Quantum ergodicity and localization in conservative systems: the Wigner band random matrix model*. Phys. Lett. A, 223:430, 1996. [69](#), [70](#)
- [CCR11] A.C. Cassidy, C.W. Clark, and M. Rigol. *Generalized Thermalization in an Integrable Lattice System*. Phys. Rev. Lett., 106(14):140405, Apr 2011. [68](#), [84](#), [86](#), [89](#)
- [CDPZ03] F.M. Cucchiatti, D.A.R. Dalvit, J.P. Paz, and W.H. Zurek. *Decoherence and the Loschmidt Echo*. Phys. Rev. Lett., 91:210403, Nov 2003. [15](#), [49](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [Chi60] B.V. Chirikov. *Resonance processes in magnetic traps*. J. Nucl. Energy C, 1(4):253, 1960. [5](#)
- [CL84] S. Chakravarty and A.J. Leggett. *Dynamics of the Two-State System with Ohmic Dissipation*. Phys. Rev. Lett., 52:5–8, Jan 1984. [66](#)
- [CLM⁺02] F.M. Cucchietti, C.H. Lewenkopf, E.R. Mucciolo, H.M. Pastawski, and R.O. Vallejos. *Measuring the Lyapunov exponent using quantum mechanics*. Phys. Rev. E, 65:046209, Apr 2002. [55](#)
- [CM10] L. Chierchia and J.N. Mather. *Kolmogorov-Arnold-Moser Theory*. Scholarpedia, 5(9):2123, 2010. [5](#)
- [CM11] J.S. Caux and J. Mossel. *Remarks on the notion of quantum integrability*. J. Stat. Mech. - Theory E, 2011(02):P02023, 2011. [6](#), [24](#)
- [CPJ04] F.M. Cucchietti, H.M. Pastawski, and R.A. Jalabert. *Universality of the Lyapunov regime for the Loschmidt echo*. Phys. Rev. B, 70:035311, Jul 2004. [15](#)
- [CRF⁺11] E. Canovi, D. Rossini, R. Fazio, G.E. Santoro, and A. Silva. *Quantum quenches, thermalization, and many-body localization*. Phys. Rev. B, 83:094431, 2011. [77](#)
- [CRV14] S. Chibbaro, L. Rondoni, and A. Vulpiani. *Reductionism, Emergence and levels of reality*. Springer, 2014. [1](#)
- [CS95] B.V. Chirikov and D.L. Shepelyansky. *Shnirelman Peak in Level Spacing Statistics*. Phys. Rev. Lett., 74:518–521, 1995. [77](#)
- [CSF⁺14] T. Caneva, A. Silva, R. Fazio, S. Lloyd, T. Calarco, and S. Montangero. *Complexity of controlling quantum many-body dynamics*. Phys. Rev. A, 89:042322, Apr 2014. [15](#)
- [Cuc04] F.M. Cucchietti. *The Loschmidt echo in classically chaotic systems: Quantum chaos, irreversibility and decoherence*. PhD thesis, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina, 2004. [15](#)
- [DALP07] E.P. Danieli, G.A. Alvarez, P.R. Levstein, and H.M. Pastawski. *Quantum dynamical phase transition in a system with many-body interactions*. Solid State Commun., 141(7):422 – 426, 2007. [38](#)
- [Dan84] P. Danielewicz. *Quantum theory of nonequilibrium processes, I*. Ann. Phys., 152:239–304, Feb 1984. [20](#), [22](#), [34](#)
- [Dan06] E.P. Danieli. *Formalism for the design and control of quantum interferences in the polarization dynamics within a nuclear spin system*. PhD thesis, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina, 2006. [17](#), [19](#), [22](#), [35](#), [37](#)
- [DBMP08] A.D. Dente, R.A. Bustos-Marún, and H.M. Pastawski. *Dynamical regimes of a quantum SWAP gate beyond the Fermi golden rule*. Phys. Rev. A, 78(6):062116, Dec 2008. [21](#), [28](#), [33](#)

-
- [DBZP13] A.D. Dente, C.S. Bederián, P.R. Zangara, and H.M. Pastawski. *GPU accelerated Trotter-Suzuki solver for quantum spin dynamics*. ArXiv e-prints 1305.0036, Apr 2013. [160](#)
- [Den12] A.D. Dente. *Spin environment induced decoherence: relaxation and quantum synchronization*. PhD thesis, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina, 2012. [17](#), [19](#), [29](#), [58](#), [160](#)
- [Deu91] J.M. Deutsch. *Quantum statistical mechanics in a closed system*. Phys. Rev. A, 43:2046, 1991. [68](#)
- [DF92] C.A. Doty and D.S. Fisher. *Effects of quenched disorder on spin-1/2 quantum XXZ chains*. Phys. Rev. B, 45:2167–2179, Feb 1992. [97](#)
- [DGSZ15] F.D. Domínguez, C.E. González, H.H. Segnorile, and R.C. Zamar. *Irreversible decoherence of dipole interacting nuclear spins coupled with a phonon bath*. arXiv preprint arXiv:1505.01559, 2015. [118](#)
- [DOV11] S. Deng, G. Ortiz, and L. Viola. *Dynamical critical scaling and effective thermalization in quantum quenches: Role of the initial state*. Phys. Rev. B, 83:094304, Mar 2011. [89](#)
- [DPA05] E.P. Danieli, H.M. Pastawski, and G.A. Álvarez. *Quantum dynamics under coherent and incoherent effects of a spin bath in the Keldysh formalism: application to a spin swapping operation*. Chem. Phys. Lett., 402(1-3):88 – 95, 2005. [23](#)
- [DPL04] E.P. Danieli, H.M. Pastawski, and P.R. Levstein. *Spin projection chromatography*. Chem. Phys. Lett., 384(4-6):306 – 311, 2004. [23](#), [52](#), [60](#), [99](#)
- [DRBM⁺12] H. De Raedt, B. Barbara, S. Miyashita, K. Michielsen, S. Bertaina, and S. Gambarelli. *Quantum simulations and experiments on Rabi oscillations of spin qubits: Intrinsic vs extrinsic damping*. Phys. Rev. B, 85:014408, Jan 2012. [63](#)
- [DRDR83] H. De Raedt and B. De Raedt. *Applications of the generalized Trotter formula*. Phys. Rev. A, 28:3575–3580, Dec 1983. [159](#)
- [DRHMDR00] H. De Raedt, A. H. Hams, K. Michielsen, and K. De Raedt. *Quantum Computer Emulator*. Comput. Phys. Commun., 132(1-2):1 – 20, 2000. [160](#)
- [DRM06] H. De Raedt and K. Michielsen. *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology*. American Scientific Publishers, Los Angeles, 2006. [159](#), [160](#)
- [DS74] S. Doniach and E.H. Sondheimer. *Green's functions for solid state physicists*. 1974. [14](#)
- [EBW04] R.R. Ernst, G. Bodenhausen, and A. Wokaun. *Principles of nuclear magnetic resonance in one and two dimensions*. Clarendon Press, Oxford, 2004. [168](#), [169](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [Eco83] E.N. Economou. *Green's functions in Quantum Physics*. Springer, Berlin, 1983. [41](#)
- [EF13] T.A. Elsayed and B.V. Fine. *Regression Relation for Pure Quantum States and Its Implications for Efficient Computing*. Phys. Rev. Lett., 110:070404, Feb 2013. [50](#)
- [EFG15] J. Eisert, M. Friesdorf, and C. Gogolin. *Quantum many-body systems out of equilibrium*. Nat. Phys., 11(2):124–130, 2015. [9](#), [96](#)
- [Fan57] U. Fano. *Description of States in Quantum Mechanics by Density Matrix and Operator Techniques*. Rev. Mod. Phys., 29:74–93, Jan 1957. [7](#)
- [FAP15] L.J. Fernández-Alcázar and H.M. Pastawski. *Decoherent time-dependent transport beyond the Landauer-Büttiker formulation: A quantum-drift alternative to quantum jumps*. Phys. Rev. A, 91:022117, Feb 2015. [104](#)
- [Fer65] E. Fermi. *Collected Papers: United States 1939-1954*, volume 2. University of Chicago Press, 1965. [5](#)
- [FGI96] V.V. Flambaum, G.F. Gribakin, and F.M. Izrailev. *Correlations within eigenvectors and transition amplitudes in the two-body random interaction model*. Phys. Rev. E, 53:5729–5741, Jun 1996. [145](#)
- [FGR78] L Fonda, G C Ghirardi, and A Rimini. *Decay theory of unstable quantum systems*. Rep. Prog. Phys., 41(4):587, 1978. [28](#)
- [FI97] V.V. Flambaum and F.M. Izrailev. *Statistical theory of finite Fermi systems based on the structure of chaotic eigenstates*. Phys. Rev. E, 56:5144, 1997. [79](#)
- [FI00] V.V. Flambaum and F.M. Izrailev. *Excited eigenstates and strength functions for isolated systems of interacting particles*. Phys. Rev. E, 61:2539–2542, Mar 2000. [15](#), [69](#)
- [FI01a] V.V. Flambaum and F.M. Izrailev. *Entropy production and wave packet dynamics in the Fock space of closed chaotic many-body systems*. Phys. Rev. E, 64:036220, Aug 2001. [15](#)
- [FI01b] V.V. Flambaum and F.M. Izrailev. *Unconventional decay law for excited states in closed many-body systems*. Phys. Rev. E, 64:026124, Jul 2001. [47](#), [56](#), [146](#)
- [FKE⁺13] T. Fukuhara, A. Kantian, M. Endres, M. Cheneau, P. Schauss, S. Hild, D. Ballew, U. Schollwöck, T. Giamarchi, C. Gross, I. Bloch, and S. Kuhr. *Quantum dynamics of a mobile spin impurity*. Nat. Phys., 9:235–241, Apr 2013. [47](#)
- [FL05] M.B. Franzoni and P.R. Levstein. *Manifestations of the absence of spin diffusion in multipulse NMR experiments on diluted dipolar solids*. Phys. Rev. B, 72:235410, Dec 2005. [111](#)

- [Fla00] V.V. Flambaum. *Time dynamics in chaotic many-body systems: can chaos destroy a quantum computer?* *Austr. J. Phys.*, 53(4):489–497, 2000. [15](#)
- [For75] D. Forster, editor. *Hydrodynamic fluctuations, broken symmetry, and correlation functions*, volume 47, 1975. [12](#)
- [FP86] M. Feingold and A. Peres. *Distribution of matrix elements of chaotic systems*. *Phys. Rev. A*, 34:591, 1986. [68](#)
- [FPU55] E. Fermi, J. Pasta, and S. Ulam. *Studies of nonlinear problems*. LASL Report LA1940, 5(6):977–988, 1955. [5](#), [96](#)
- [FS97] K.M. Frahm and D.L. Shepelyansky. *Quantum Localization in Rough Billiards*. *Phys. Rev. Lett.*, 78:1440–1443, 1997. [77](#)
- [GCMM95] G. García-Calderón, J.L. Mateos, and M. Moshinsky. *Resonant Spectra and the Time Evolution of the Survival and Nonescape Probabilities*. *Phys. Rev. Lett.*, 74(3):337–340, Jan 1995. [28](#)
- [GJPW12] A. Goussev, R. Jalabert, H. Pastawski, and D. Wisniacki. *Loschmidt echo*. *Scholarpedia*, 7(8):11687, 2012. [15](#), [46](#), [55](#)
- [GKS76] V. Gorini, A. Kossakowski, and E.C.G. Sudarshan. *Completely positive dynamical semigroups of N level systems*. *J. Math. Phys.*, 17(5), 1976. [7](#), [19](#)
- [GLTZ10] S. Goldstein, J.L. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zanghí. *Long-time behavior of macroscopic quantum systems. Commentary accompanying the English translation of John von Neumann’s 1929 article on the quantum ergodic theorem*. *Eur. Phys. J. H*, 35:173–200, Nov 2010. [6](#), [9](#), [98](#)
- [GME11] C. Gogolin, M.P. Müller, and J. Eisert. *Absence of Thermalization in Nonintegrable Systems*. *Phys. Rev. Lett.*, 106:040401, Jan 2011. [6](#), [67](#)
- [GMGW98] T. Guhr, A. Mueller-Gröeling, and H.A. Weidenmüller. *Random Matrix Theories in Quantum Physics: Common Concepts*. *Phys. Rep.*, 299:189, 1998. [71](#), [76](#), [77](#)
- [Gou90] S.J. Gould. *Wonderful life: the Burgess Shale and the nature of history*. WW Norton & Company, 1990. [xiv](#)
- [GPSZ06] T. Gorin, T. Prosen, T.H. Seligman, and M. Znidaric. *Dynamics of Loschmidt echoes and fidelity decay*. *Phys. Rep.*, 435(2-5):33 – 156, 2006. [15](#), [46](#)
- [GR07] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series, and Products*. Academic Press, 7 edition, Mar 2007. [39](#), [41](#)
- [GR12] C. Gramsch and M. Rigol. *Quenches in a quasidisordered integrable lattice system: Dynamics and statistical description of observables after relaxations*. *Phys. Rev. A*, 86:053615, 2012. [68](#), [84](#), [86](#), [89](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [GS88] T. Giamarchi and H.J. Schulz. *Anderson localization and interactions in one-dimensional metals*. Phys. Rev. B, 37:325–340, Jan 1988. [97](#)
- [GS00] B. Georgeot and D.L. Shepelyansky. *Quantum chaos border for quantum computing*. Phys. Rev. E, 62(3):3504, 2000. [15](#)
- [GS12] A. Gubin and L.F. Santos. *Quantum chaos: An introduction via chains of interacting spins 1/2*. Am. J. Phys., 80:246–251, 2012. [70](#)
- [GZ04] C. Gardiner and P. Zoller. *Quantum noise: a handbook of Markovian and non-Markovian quantum stochastic methods with applications to quantum optics*, volume 56. Springer Science & Business Media, 2004. [8](#)
- [Haa91] F. Haake. *Quantum Signatures of Chaos*. Springer-Verlag, Berlin, 1991. [71](#), [77](#)
- [Hah50] E.L. Hahn. *Spin echoes*. Phys. Rev., 80(4):580, 1950. [12](#)
- [HN15] D. Huse and R. Nandkishore. *Many-Body Localization and Thermalization in Quantum Statistical Mechanics*. Annu. Rev. Condens. Matter Phys., 6(1), 2015. [9](#), [96](#), [97](#)
- [HR12] K. He and M. Rigol. *Initial-state dependence of the quench dynamics in integrable quantum systems. II. Thermal states*. Phys. Rev. A, 85:063609, Jun 2012. [89](#)
- [HSWR13] K. He, L.F. Santos, T.M. Wright, and M. Rigol. *Single-particle and many-body analyses of a quasiperiodic integrable system after a quench*. Phys. Rev. A, 87:063637, Jun 2013. [68](#), [84](#), [86](#), [89](#)
- [HW68] U. Haeberlen and J. S. Waugh. *Coherent Averaging Effects in Magnetic Resonance*. Phys. Rev., 175:453–467, Nov 1968. [145](#), [168](#)
- [IC66] F.M. Izrailev and B.V. Chirikov. *Statistical Properties of a Nonlinear String*. Sov. Phys. Dokl., 11:30, Jul 1966. [5](#)
- [Izr90] F.M. Izrailev. *Simple models of quantum chaos: Spectrum and eigenfunctions*. Phys. Rep., 196(5-6):299 – 392, 1990. [76](#)
- [JAB02] Ph. Jacquod, I. Adagideli, and C.W.J. Beenakker. *Decay of the Loschmidt Echo for Quantum States with Sub-Planck-Scale Structures*. Phys. Rev. Lett., 89:154103, Sep 2002. [15](#), [113](#)
- [JKS13] K. Joel, D. Kollmar, and L.F. Santos. *An introduction to the spectrum, symmetries, and dynamics of spin-1/2 Heisenberg chains*. Am. J. Phys., 81(6), 2013. [84](#)
- [JP01] R.A. Jalabert and H.M. Pastawski. *Environment-Independent Decoherence Rate in Classically Chaotic Systems*. Phys. Rev. Lett., 86(12):2490–2493, Mar 2001. [6](#), [13](#), [15](#), [49](#), [54](#), [55](#), [102](#), [113](#), [156](#)

- [JP09] Ph. Jacquod and C. Petitjean. *Decoherence, entanglement and irreversibility in quantum dynamical systems with few degrees of freedom*. Adv. in Phys., 58(6):67–196, 2009. [15](#), [46](#)
- [JSB01] Ph. Jacquod, P.G. Silvestrov, and C.W.J. Beenakker. *Golden rule decay versus Lyapunov decay of the quantum Loschmidt echo*. Phys. Rev. E, 64:055203, Oct 2001. [15](#), [55](#), [113](#)
- [KAC13] G. Kaur, A. Ajoy, and P. Cappellaro. *Decay of spin coherences in one-dimensional spin systems*. New J. Phys., 15(9):093035, 2013. [15](#)
- [KB62] L.P. Kadanoff and G. Baym. *Quantum statistical mechanics: Green's function methods in equilibrium and nonequilibrium problems*. Benjamin New York, 1962. [20](#), [22](#)
- [KDBS08] A. Koetsier, R.A. Duine, I. Bloch, and H.T.C. Stoof. *Achieving the Neel state in an optical lattice*. Phys. Rev. A, 77:023623, 2008. [73](#)
- [Kel64] L.V. Keldysh. *Diagram technique for nonequilibrium processes*. Zh. Eksp. Teor. Fiz., 47:1515–1527, 1964. Sov. Phys. JEPT **20**, 1018 (1965). [20](#), [22](#)
- [KF99] A.K. Khitrin and B.M. Fung. *Proton polarization transfer in a ring system*. J. Chem. Phys., 111(16):7480–7485, 1999. [54](#)
- [Kha58] S.A. Khalfin. *Contribution to the Decay Theory of a Quasi-Stationary State*. Sov. Phys. JETP, 6:1053–+, 1958. [28](#)
- [Kim81] J. Kimball. *Comments on the interplay between Anderson localisation and electron-electron interactions*. J. Phys. C Solid State, 14(33):L1061, 1981. [97](#), [107](#)
- [KJZ02] Z.P. Karkuszewski, C. Jarzynski, and W.H. Zurek. *Quantum Chaotic Environments, the Butterfly Effect, and Decoherence*. Phys. Rev. Lett., 89:170405, Oct 2002. [15](#)
- [KM93] B. Kramer and A. MacKinnon. *Localization: theory and experiment*. Rep. Prog. Phys., 56:1469–1564, Dec 1993. [100](#), [102](#)
- [Kot01] V.K.B. Kota. *Embedded random matrix ensembles for complexity and chaos in finite interacting particle systems*. Phys. Rep., 347:223, 2001. [68](#)
- [KPSR13] E. Khatami, G. Pupillo, M. Srednicki, and M. Rigol. *Fluctuation-Dissipation Theorem in an Isolated System of Quantum Dipolar Bosons after a Quench*. Phys. Rev. Lett., 111:050403, Jul 2013. [89](#)
- [KS04] H.G. Krojanski and D. Suter. *Scaling of Decoherence in Wide NMR Quantum Registers*. Phys. Rev. Lett., 93(9):090501, Aug 2004. [15](#)
- [Kuh87] T.S. Kuhn. *Black-body theory and the quantum discontinuity, 1894-1912*. University of Chicago Press, 1987. [3](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [Lau87] R.B. Laughlin. *Electrical resistivity as quantum chaos*. Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.), 2:213–224, Nov 1987. [10](#), [14](#)
- [Leb93] J.L. Lebowitz. *Boltzmann’s entropy and time’s arrow*. Phys. Today, 46:32–38, Sep 1993. [3](#)
- [Leb99] J.L. Lebowitz. *Statistical mechanics: A selective review of two central issues*. Rev. Mod. Phys. Supplement, 71:346, Mar 1999. [3](#), [4](#)
- [Leb08] J.L. Lebowitz. *Time’s arrow and Boltzmann’s entropy*. Scholarpedia, 3(4):3448, 2008. [3](#)
- [Lin76] G. Lindblad. *On the generators of quantum dynamical semigroups*. Commun. Math. Phys., 48(2):119–130, 1976. [6](#), [7](#), [19](#)
- [LPC91] P.R. Levstein, H.M. Pastawski, and R. Calvo. *Spin diffusion in low-dimensional copper-amino-acid complexes*. J. Phys.: Condens. Matter, 3(12):1877, 1991. [24](#)
- [LPSW09] N. Linden, S. Popescu, A.J. Short, and A. Winter. *Quantum mechanical evolution towards thermal equilibrium*. Phys. Rev. E, 79(6):061103, Jun 2009. [67](#)
- [LS13] A. De Luca and A. Scardicchio. *Ergodicity breaking in a model showing many-body localization*. Europhys. Lett., 101(3):37003, 2013. [96](#), [97](#), [99](#), [105](#), [108](#)
- [LSM61] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis. *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*. Ann. Phys., 16(3):407 – 466, 1961. [21](#), [22](#), [120](#)
- [LUP98] P.R. Levstein, G. Usaj, and H.M. Pastawski. *Attenuation of polarization echoes in nuclear magnetic resonance: A study of the emergence of dynamical irreversibility in many-body quantum systems*. J. Chem. Phys., 108(7):2718–2724, 1998. [13](#), [46](#), [47](#), [64](#), [102](#)
- [LW72] D.C. Langreth and J.W. Wilkins. *Theory of Spin Resonance in Dilute Magnetic Alloys*. Phys. Rev. B, 6:3189–3227, Nov 1972. [20](#), [158](#)
- [Mat77] R.D. Mattuck. *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem*. 1977. [28](#)
- [MBSH⁺97] Z.L. Mádi, B. Brutscher, T. Schulte-Herbrüggen, R. Brüschweiler, and R.R. Ernst. *Time-resolved observation of spin waves in a linear chain of nuclear spins*. Chem. Phys. Lett., 268(3-4):300 – 305, 1997. [24](#), [45](#), [50](#), [54](#), [104](#)
- [Mer98] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics*. Wiley, New York, 1998. [159](#)
- [MHCBn12] A. Müller-Hermes, J.I. Cirac, and M.C. Bañuls. *Tensor network techniques for the computation of dynamical observables in one-dimensional quantum spin systems*. New J. Phys., 14(7):075003, 2012. [160](#)
- [MHH12] C.J.M. Mathy, D.A. Huse, and R.G. Hulet. *Enlarging and cooling the Néel state in an optical lattice*. Phys. Rev. A, 86:023606, 2012. [73](#)

- [MNP⁺99] K. Machida, H. Nakazato, S. Pascazio, H. Rauch, and S. Yu. *Reflection and transmission in a neutron-spin test of the quantum Zeno effect*. Phys. Rev. A, 60:3448–3460, Nov 1999. [66](#)
- [MOB12] S.W. Morgan, V. Oganesyan, and G.S. Boutis. *Multispin correlations and pseudo-thermalization of the transient density matrix in solid-state NMR: Free induction decay and magic echo*. Phys. Rev. B, 86:214410, Dec 2012. [15](#), [111](#)
- [Mot68] N.F. Mott. *Metal-Insulator Transition*. Rev. Mod. Phys., 40:677–683, Oct 1968. [11](#), [106](#)
- [MPM87] M. Munowitz, A. Pines, and M. Mehring. *Multiple quantum dynamics in NMR: A directed walk through Liouville space*. J. Chem. Phys., 86(6), 1987. [140](#)
- [NB14] T.E. Northup and R. Blatt. *Quantum information transfer using photons*. Nature Photon., 8:356–363, May 2014. [19](#)
- [NMM⁺14] D. Nigg, M. Müller, E.A. Martinez, P. Schindler, M. Hennrich, T. Monz, M.A. Martin-Delgado, and R. Blatt. *Quantum computations on a topologically encoded qubit*. Science, 345(6194):302–305, 2014. [19](#)
- [OH07] V. Oganesyan and D.A. Huse. *Localization of interacting fermions at high temperature*. Phys. Rev. B, 75:155111, Apr 2007. [96](#), [97](#), [99](#), [108](#)
- [PAEI94] V.N. Prigodin, B.L. Altshuler, K.B. Efetov, and S. Iida. *Mesoscopic dynamical echo in quantum dots*. Phys. Rev. Lett., 72:546–549, Jan 1994. [46](#), [53](#)
- [Pas91] H.M. Pastawski. *Classical and quantum transport from generalized Landauer-Büttiker equations*. Phys. Rev. B, 44:6329–6339, Sep 1991. [20](#), [35](#)
- [Pas92] H.M. Pastawski. *Classical and quantum transport from generalized Landauer-Büttiker equations. II. Time-dependent resonant tunneling*. Phys. Rev. B, 46(7):4053–4070, Aug 1992. [20](#), [35](#)
- [Pas07] H.M. Pastawski. *Revisiting the Fermi Golden Rule: Quantum dynamical phase transition as a paradigm shift*. Physica B, 398(2):278 – 286, 2007. [20](#), [119](#)
- [Pat96] R.K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Elsevier Science, 1996. [1](#)
- [PB02] F. Petruccione and H.P. Breuer. *The theory of open quantum systems*. Oxford Univ. Press, 2002. [8](#), [19](#)
- [PH10] A. Pal and D.A. Huse. *Many-body localization phase transition*. Phys. Rev. B, 82:174411, Nov 2010. [96](#), [97](#), [99](#), [105](#), [108](#)
- [PJ06] C. Petitjean and Ph. Jacquod. *Quantum Reversibility and Echoes in Interacting Systems*. Phys. Rev. Lett., 97(12):124103, Sep 2006. [54](#), [55](#)
- [PLU95] H.M. Pastawski, P.R. Levstein, and G. Usaj. *Quantum Dynamical Echoes in the Spin Diffusion in Mesoscopic Systems*. Phys. Rev. Lett., 75(23):4310–4313, Dec 1995. [31](#), [46](#), [49](#), [53](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [PLU⁺00] H.M. Pastawski, P.R. Levstein, G. Usaj, J. Raya, and J. Hirschinger. *A nuclear magnetic resonance answer to the Boltzmann-Loschmidt controversy?* Physica A, 283(1-2):166 – 170, 2000. [13](#), [14](#), [46](#), [47](#), [64](#), [140](#), [144](#)
- [PM01] H.M. Pastawski and E. Medina. *‘Tight Binding’ methods in quantum transport through molecules and small devices: From the coherent to the decoherent description.* Rev. Mex. Fis., 47:1 – 23, Mar 2001. [30](#)
- [Pop14] S. Popescu. *Nonlocality beyond quantum mechanics.* Nat. Phys., 10:264–270, Apr 2014. [19](#)
- [PPV14] C. Pineda, T. Prosen, and E. Villaseñor. *Two dimensional kicked quantum Ising model: dynamical phase transitions.* New J. Phys., 16(12):123044, 2014. [50](#)
- [Pri98] H. Primas. *Emergence in exact natural science.* Acta Polytech. Sc. Ma., 91:83–98, 1998. [1](#)
- [Pro94] T. Prosen. *Statistical properties of matrix elements in a Hamilton system between integrability and chaos.* Ann. Phys., 235:115, 1994. [68](#)
- [Pro07] T. Prosen. *Chaos and complexity of quantum motion.* J. Phys. A Math. Theor., 40(28):7881, 2007. [114](#)
- [PSSV11] A. Polkovnikov, K. Sengupta, A. Silva, and M. Vengalattore. *Colloquium: Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems.* Rev. Mod. Phys., 83:863–883, Aug 2011. [9](#), [11](#), [96](#)
- [PSW06] S. Popescu, A.J. Short, and A. Winter. *Entanglement and the foundations of statistical mechanics.* Nat. Phys., 2:754–758, Nov 2006. [11](#)
- [PTM02] H.M. Pastawski, L.E.F. Foa Torres, and E. Medina. *Electron phonon interaction and electronic decoherence in molecular conductors.* Chem. Phys., 281(2-3):257 – 278, 2002. [145](#)
- [PUIL98] H.M. Pastawski, G. Usaj, R.A. Iglesias, and P.R. Levstein. *Surgimiento de irreversibilidad dinámica en sistemas cuánticos de muchos cuerpos: Una prueba usando resonancia magnética nuclear.* Rev. Mex. Fis., 44(3):1–6, 1998. [13](#)
- [PUL96] H.M. Pastawski, G. Usaj, and P.R. Levstein. *Quantum interference phenomena in the local polarization dynamics of mesoscopic systems: an NMR observation.* Chem. Phys. Lett., 261:329–334, Oct 1996. [46](#), [54](#)
- [PW87] H.M. Pastawski and C. Wiecko. *Self-similar dependence on dimension of Hamiltonians on hypercubic lattices.* Phys. Rev. A, 36(12):5854–5857, Dec 1987. [40](#)
- [PZ07] T. Prosen and M. Znidaric. *Is the efficiency of classical simulations of quantum dynamics related to integrability?* Phys. Rev. E, 75:015202, Jan 2007. [160](#)

- [QSL⁺06] H. Quan, Z. Song, X. Liu, P. Zanardi, and C. Sun. *Decay of Loschmidt Echo Enhanced by Quantum Criticality*. Phys. Rev. Lett., 96:140604, Apr 2006. [15](#)
- [RDO08] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii. *Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems*. Nature, 452:854–858, Apr 2008. [9](#), [11](#), [98](#)
- [Rei04] L.E. Reichl. *The transition to chaos: conservative classical systems and quantum manifestations*. Springer, New York, 2004. [71](#), [77](#)
- [Rei08] P. Reimann. *Foundation of Statistical Mechanics under Experimentally Realistic Conditions*. Phys. Rev. Lett., 101:190403, 2008. [68](#), [75](#), [93](#)
- [Rei12] P. Reimann. *Equilibration of isolated macroscopic quantum systems under experimentally realistic conditions*. Phys. Scr, 86:058512, 2012. [68](#), [93](#)
- [RF09] E. Rufeil-Fiori. *Coherent dynamics of charge and spin excitations in one dimensional systems*. PhD thesis, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina, 2009. [17](#), [19](#), [21](#), [29](#), [58](#), [59](#)
- [RF11] M. Rigol and M. Fitzpatrick. *Initial-state dependence of the quench dynamics in integrable quantum systems*. Phys. Rev. A, 84:033640, Sep 2011. [89](#)
- [RFP06a] E. Rufeil-Fiori and H.M. Pastawski. *Non-Markovian decay beyond the Fermi Golden Rule: Survival collapse of the polarization in spin chains*. Chem. Phys. Lett., 420(1-3):35 – 41, 2006. [21](#), [28](#), [31](#)
- [RFP06b] E. Rufeil-Fiori and H.M. Pastawski. *Survival probability of surface excitations in a 2d lattice: non-Markovian effects and survival collapse*. Braz. J. Phys., 36:844 – 847, 09 2006. [31](#), [56](#)
- [RFP09] E. Rufeil-Fiori and H.M. Pastawski. *Survival probability of a local excitation in a non-Markovian environment: Survival collapse, Zeno and anti-Zeno effects*. Physica B, 404(18):2812 – 2815, 2009. [31](#)
- [RK71] W.K. Rhim and H. Kessemeier. *Transverse-Magnetization Recovery in the Rotating Frame*. Phys. Rev. B, 3:3655–3661, Jun 1971. [12](#)
- [Rot09] I. Rotter. *A non-Hermitian Hamilton operator and the physics of open quantum systems*. J. Phys. A, 42(15):153001, 2009. [20](#)
- [RPW71] W.K. Rhim, A. Pines, and J.S. Waugh. *Time-Reversal Experiments in Dipolar-Coupled Spin Systems*. Phys. Rev. B, 3:684–696, Feb 1971. [12](#)
- [RS12] M. Rigol and M. Srednicki. *Alternatives to Eigenstate Thermalization*. Phys. Rev. Lett., 108:110601, Mar 2012. [98](#)
- [SAL⁺14] C.M. Sánchez, R.H. Acosta, P.R. Levstein, H.M. Pastawski, and A.K. Chattah. *Clustering and decoherence of correlated spins under double quantum dynamics*. Phys. Rev. A, 90:042122, Oct 2014. [15](#), [118](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [San08] L.F. Santos. *Transport control in low-dimensional spin-1/2 Heisenberg systems*. Phys. Rev. E, 78:031125, 2008. [90](#)
- [San10] L.F. Santos. *Transport Behavior and Dynamical Control in Integrable and Chaotic Spin-1/2 Heisenberg Chains*. J. Phys.: Conf. Ser., 200:022053, 2010. [90](#)
- [SBI12a] L.F. Santos, F. Borgonovi, and F.M. Izrailev. *Chaos and Statistical Relaxation in Quantum Systems of Interacting Particles*. Phys. Rev. Lett., 108:094102, Mar 2012. [70](#), [146](#)
- [SBI12b] L.F. Santos, F. Borgonovi, and F.M. Izrailev. *Onset of chaos and relaxation in isolated systems of interacting spins: Energy shell approach*. Phys. Rev. E, 85:036209, Mar 2012. [70](#), [79](#), [146](#)
- [SBM⁺11] J. Simon, W.S. Bakr, R. Ma, M.E. Tai, P.M. Preiss, and M. Greiner. *Quantum simulation of antiferromagnetic spin chains in an optical lattice*. Nature (London), 472:307–312, 2011. [73](#)
- [SF12] A.J. Short and T.C. Farrelly. *Quantum equilibration in finite time*. New J. Phys., 14:013063, 2012. [68](#), [76](#), [93](#)
- [Shn75] A.I. Shnirelman. *The asymptotic multiplicity of the spectrum of the Laplace operator*. Usp. Mat. Nauk., 30:265, 1975. [77](#)
- [Sho11] A.J. Short. *Equilibration of quantum systems and subsystems*. New J. Phys., 13:053009, 2011. [68](#), [75](#), [93](#)
- [Sil08] A. Silva. *Statistics of the Work Done on a Quantum Critical System by Quenching a Control Parameter*. Phys. Rev. Lett., 101:120603, Sep 2008. [15](#)
- [Sli80] C.P. Slichter. *Principles of magnetic resonance; 2nd ed.* Springer series in solid state sciences. Springer, Berlin, 1980. [19](#), [139](#)
- [SLW76] J. Sweer, D.C. Langreth, and J.W. Wilkins. *Theory of spin resonance in dilute magnetic alloys. II*. Phys. Rev. B, 13:192–206, Jan 1976. [20](#), [158](#)
- [SM11] L.F. Santos and A. Mitra. *Domain wall dynamics in integrable and chaotic spin-1/2 chains*. Phys. Rev. E, 84:016206, 2011. [90](#)
- [SMLO14] P. Shadbolt, J.C.F. Mathews, A. Laing, and J.L. O’Brien. *Testing foundations of quantum mechanics with photons*. Nat. Phys., 10:278–286, Apr 2014. [19](#)
- [Sre] M. Srednicki. *Does quantum chaos explain quantum statistical mechanics?* arXiv:cond-mat/9410046. [68](#)
- [Sre96a] M. Srednicki. *The approach to thermal equilibrium in quantized chaotic systems*. J. Phys. A, 32:1163, 1996. [68](#)
- [Sre96b] M. Srednicki. *Thermal Fluctuations in Quantized Chaotic Systems*. J. Phys. A, 29:L75–L79, 1996. [68](#)

- [SS07] J. Sato and M. Shiroishi. *Density matrix elements and entanglement entropy for the spin-1/2 XXZ chain at $\Delta = 1/2$* . J. Phys. A Math. Gen., 40:8739–8749, Jul 2007. [71](#)
- [Tak05] M. Takahashi. *Thermodynamics of one-dimensional solvable models*. Cambridge University Press, 2005. [71](#)
- [THS14a] E. J. Torres-Herrera and L. F. Santos. *Nonexponential fidelity decay in isolated interacting quantum systems*. Phys. Rev. A, 90:033623, Sep 2014. [142](#)
- [THS14b] E.J. Torres-Herrera and L.F. Santos. *Quench dynamics of isolated many-body quantum systems*. Phys. Rev. A, 89(4):043620, 2014. [114](#), [142](#)
- [THVS14] E.J. Torres-Herrera, M. Vyas, and L.F. Santos. *General features of the relaxation dynamics of interacting quantum systems*. New J. Phys., 16(6):063010, 2014. [114](#), [142](#)
- [UPL98] G. Usaj, H.M. Pastawski, and P.R. Levstein. *Gaussian to exponential crossover in the attenuation of polarization echoes in NMR*. Mol. Phys., 95:1229–1236, Dec 1998. [13](#), [46](#), [47](#), [64](#), [121](#), [139](#), [140](#)
- [Usa99] G. Usaj. *Mesoscopic echoes and polarization echoes in NMR: a study about the spin excitation dynamics in interacting systems*. PhD thesis, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina, 1999. [14](#), [54](#), [140](#)
- [Ved14] V. Vedral. *Quantum entanglement*. Nat. Phys., 10:256–258, Apr 2014. [19](#)
- [von10] J. von Neumann. *Proof of the ergodic theorem and the H-theorem in quantum mechanics. Translation of: Beweis des Ergodensatzes und des H-Theorems in der neuen Mechanik*. Eur. Phys. J. H, 35:201–237, Nov 2010. [6](#), [9](#)
- [VZ13] L.C. Venuti and P. Zanardi. *Gaussian equilibration*. Phys. Rev. E, 87:012106, 2013. [68](#), [84](#), [86](#), [89](#)
- [WB53] R.K. Wangsness and F. Bloch. *The Dynamical Theory of Nuclear Induction*. Phys. Rev., 89:728–739, Feb 1953. [7](#)
- [WC13] P. Wittek and F.M. Cucchietti. *A second order distributed TrotterSuzuki solver with a hybrid CPUGPU kernel*. Comput. Phys. Commun., 184(4):1165 – 1171, 2013. [160](#)
- [Wei08] U. Weiss. *Quantum dissipative systems*. Series in modern condensed matter physics. World Scientific, Singapore, 2008. [66](#)
- [Wen04] X.-G. Wen. *Quantum Field Theory of Many-body Systems from the Origin of Sound to an Origin of Light and Electrons*. 2004. [10](#)
- [WES⁺11] C. Weitenberg, M. Endres, J. F. Sherson, M. Cheneau, P. Schauss, T. Fukuhara, I. Bloch, and S. Kuhr. *Single spin addressing in an atomic Mott insulator*. Nature, 471:319–324, Mar 2011. [47](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [WMM⁺09] D.M. Weld, P. Medley, H. Miyake, D. Hucul, D.E. Pritchard, and W. Ketterle. *Spin Gradient Thermometry for Ultracold Atoms in Optical Lattices*. Phys. Rev. Lett., 103:245301, 2009. [73](#)
- [WRP72] J.S. Waugh, W.K. Rhim, and A. Pines. *Spin echoes and Loschmidt's paradox*. Pure Appl. Chem., 32(1-4):317–324, 1972. [13](#)
- [Zas99] G.M. Zaslavsky. *Chaotic dynamics and the origin of statistical laws*. Phys. Today, 52:39–45, Aug 1999. [5](#)
- [ZBFH96] V. Zelevinsky, B.A. Brown, N. Frazier, and M. Horoi. *The nuclear shell model as a testing ground for many-body quantum chaos*. Phys. Rep., 276:85–176, 1996. [68](#)
- [ZCC⁺09] J. Zhang, F.M. Cucchiatti, C.M. Chandrashekar, M. Laforest, C.A. Ryan, M. Ditty, A. Hubbard, J.K. Gamble, and R. Laflamme. *Direct observation of quantum criticality in Ising spin chains*. Phys. Rev. A, 79:012305, Jan 2009. [111](#)
- [ZCP07] W.H. Zurek, F.M. Cucchiatti, and J.P. Paz. *Gaussian Decoherence and Gaussian Echo from Spin Environments*. Acta Phys. Pol. B, 38:1685, May 2007. [14](#)
- [Zim69] J.M. Ziman. *Localization of electrons in ordered and disordered systems II. Bound bands*. J. Phys. C Solid State, 2(7):1230, 1969. [109](#)
- [ZME92] S. Zhang, B.H. Meier, and R.R. Ernst. *Polarization echoes in NMR*. Phys. Rev. Lett., 69:2149–2151, Oct 1992. [13](#), [24](#)
- [ZPP08] M. Znidaric, T. Prosen, and P. Prelovsek. *Many-body localization in the Heisenberg XXZ magnet in a random field*. Phys. Rev. B, 77:064426, Feb 2008. [96](#), [99](#), [108](#)
- [Zur03] W.H. Zurek. *Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical*. Rev. Mod. Phys., 75(3):715–775, May 2003. [7](#), [19](#)