

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

*Trabajo especial de la Licenciatura en Física*

# Análisis de la validez de la teoría de cobosones en un modelo simple

**Paula Céspedes**

Directora: Dra. Ana Majtey

Diciembre 2018



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

## Resumen

Con la motivación de saber en qué sistemas es conveniente aplicar la teoría de cobosones, el objetivo de este trabajo es responder esta pregunta para un modelo simple de fermiones fuertemente interactuantes.

El sistema a estudiar consiste en una cadena de potenciales unidimensional de  $S$  sitios, con  $N$  pares de fermiones de dos tipos ( $a$  y  $b$ ), con tasa de tuneo de las partículas individuales  $J$  y energía de interacción atractiva  $U_0$ , bajo la condición  $U_0 \gg J$ . Nos centramos en el estudio del estado fundamental del sistema.

Para resolver el problema usamos, en primer lugar, herramientas usuales en Mecánica Cuántica: se buscó un Hamiltoniano efectivo, se lo proyectó en el subespacio de los estados de menor energía, es decir, el espacio donde los pares de fermiones permanecen unidos, y se lo resolvió exactamente o por diagonalización numérica para encontrar el estado fundamental con su energía correspondiente. Se llegó a los mismos resultados mediante el uso de teoría de perturbaciones a segundo orden.

Luego, en segundo lugar, se siguieron las indicaciones de la teoría de cobosones para construir el estado fundamental de  $N$  cobosones del Hamiltoniano efectivo, y se calculó su energía.

Comparando los resultados obtenidos por ambos métodos se puede finalmente determinar si dicha teoría resulta adecuada para resolver este sistema.

## Abstract

Motivated by knowing in which systems can coboson theory be applied, the objective of this work is to answer this question for a simple model of strongly interacting fermions.

The system under study is an unidimensional chain of potentials with  $S$  sites and  $N$  pairs of fermions of two types ( $a$  and  $b$ ), with tunneling rate of individual particles  $J$  and attractive interaction  $U_0$ , with condition  $U_0 \gg J$ . We focused on the study of the ground state of the system.

To solve this model we used, firstly, common techniques in Quantum Mechanics: finding an effective Hamiltonian and projecting it in the subspace of the lowest energy states, which is the space where the pairs of fermions stay together, and then solving it exactly or with numerical diagonalization to find the the ground state and its energy. The same results were found using second order perturbation theory.

We then proceeded to follow the indications given by coboson theory to build the ground state of  $N$  cobosons of the effective Hamiltonian, and computed its energy.

By comparing the results obtained by both methods we are finally able to determine whether said theory is adequate to solve the system.

---

## Palabras clave

- Sistemas de muchas partículas
- Segunda cuantización
- Hamiltoniano efectivo
- Teoría de perturbaciones
- Teoría de cobosones
- Entrelazamiento

## Clasificación

- 03.65.-w Quantum mechanics
- 03.67.-a Quantum information
- 3.65.Ud Entanglement and quantum nonlocality
- 05.30.Fk Fermion systems and electron gas
- 05.30.Jp Boson systems

# Menciones

- ★ Agradecemos a Alex Bouvrie por prestarnos el programa base que luego modificamos para utilizar en este trabajo, y a Cecilia Cormick por las discusiones y ayuda otorgadas.
- ★ Este trabajo fue realizado con el aporte económico de la **Beca Estímulo a las Vocaciones Científicas** del **Consejo Interuniversitario Nacional**.

# Indice

<b>Resumen</b>	<b>1</b>
<b>Abstract</b>	<b>1</b>
<b>Menciones</b>	<b>3</b>
<b>1. Introducción y motivaciones</b>	<b>6</b>
1.1. Formalismo de cobosones . . . . .	6
1.2. Organización del trabajo . . . . .	7
<b>2. Marco teórico</b>	<b>8</b>
2.1. Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo y Hamiltoniano efectivo . . . . .	8
2.1.1. Representación Interacción . . . . .	8
2.1.2. Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo . . . . .	9
2.1.3. Hamiltoniano efectivo . . . . .	10
2.2. Teoría de perturbaciones degenerada independiente del tiempo . . . . .	11
2.2.1. Formalismo y análisis de la degeneración . . . . .	11
2.2.2. Primer orden . . . . .	12
2.2.3. Segundo orden . . . . .	13
2.2.4. Renormalización de la función de onda . . . . .	14
2.3. Segunda cuantización . . . . .	15
2.4. Teoría de cobosones . . . . .	16
<b>3. Sistema a trabajar</b>	<b>18</b>
3.1. Hamiltoniano del sistema . . . . .	18
3.2. Enfoque de Hamiltoniano Efectivo . . . . .	18
3.2.1. 1 par . . . . .	19
3.2.1.1. Primer orden . . . . .	20
3.2.1.2. Segundo orden . . . . .	21
3.2.2. N pares . . . . .	22
3.2.2.1. Primer orden . . . . .	23
3.2.2.2. Segundo orden . . . . .	23
3.3. Enfoque de teoría de perturbaciones independiente del tiempo . . . . .	24
<b>4. Resolución del Hamiltoniano efectivo</b>	<b>26</b>
4.1. Hamiltoniano de un par . . . . .	26
4.1.1. Condiciones periódicas de contorno . . . . .	26
4.1.2. Condiciones abiertas de contorno . . . . .	29
4.1.3. Análisis del entrelazamiento . . . . .	29
4.2. Hamiltoniano de N pares . . . . .	31

---

<b>5. Resolución con ansatz de cobosones</b>	<b>37</b>
5.1. Ansatz de cobosones y energía aproximada . . . . .	37
5.2. Estimación de la energía del estado fundamental en teoría de cobosones . . . . .	40
<b>6. Comparación de resultados</b>	<b>43</b>
6.1. Energías . . . . .	43
6.2. Fidelidad . . . . .	44
<b>7. Bethe ansatz: solución analítica exacta para dos pares</b>	<b>46</b>
7.1. Transformaciones de Jordan-Wigner . . . . .	46
7.2. Comparación con los resultados exactos . . . . .	47
<b>8. Conclusiones</b>	<b>49</b>
8.1. Resumen y conclusiones . . . . .	49
8.2. Perspectivas futuras . . . . .	50
<b>Bibliografía</b>	<b>51</b>
<b>A. Programa utilizado para diagonalización numérica</b>	<b>53</b>

# Capítulo 1

## Introducción y motivaciones

### 1.1. Formalismo de cobosones

Los problemas que involucran muchas partículas interactuantes constituyen un desafío teórico de alta complejidad y gran relevancia en varias ramas de la física, tales como la física estadística o la materia condensada, y también de otras ciencias exactas, como la química. Un amplio espectro de métodos y herramientas ha sido desarrollado para proveer técnicas computacionales o formalismos teóricos para abordar estos problemas y para obtener información de la estructura detallada y la dinámica de estos sistemas. Uno de los formalismos que ha logrado simplificar el abordaje y entendimiento de sistemas de muchas partículas es el de bosones compuestos o cobosones. La teoría de cobosones, según su nombre en inglés *composite bosons*, ha sido desarrollada en forma rigurosa en [1] y permite explicar en detalle el comportamiento de partículas compuestas *aproximadamente* bosónicas.

El modelo estándar establece que las partículas fundamentales que constituyen la materia son fermiónicas. Si no poseemos la capacidad de revelar con exactitud la estructura interna de una partícula compuesta, podemos tratarla aproximadamente como un único bosón, si está compuesta por un número par de fermiones (y por lo tanto poseerá spin total entero), o como un único fermión, si está compuesta por un número impar de fermiones (y por lo tanto poseerá spin semientero). Esto simplifica notablemente su descripción y permite interpretar fenómenos como la superfluidez del  $^4\text{He}$  y la condensación de Bose-Einstein de átomos de  $^{87}\text{Rb}$  [2]. Sin embargo, para el caso de bosones compuestos por fermiones, surge el interrogante de que dos o más bosones pueden compartir el mismo estado cuántico, pero los fermiones que los componen no, debido al principio de exclusión de Pauli. Por lo tanto, la descripción detallada anteriormente no resulta enteramente satisfactoria. En [3] y más recientemente en [4] se ha demostrado que el grado de entrelazamiento entre las partículas constituyentes determina qué tan parecido es el comportamiento de una partícula compuesta al de un bosón puro: mientras mayor el entrelazamiento, mayor el carácter bosónico de la partícula compuesta. Es decir, las fuerzas de atracción mecánicas que intuitivamente pensaríamos que son las encargadas de mantener en forma compacta a un bosón compuesto, dejan de ser esenciales, y sirven únicamente como un medio físico en el que pueden darse correlaciones cuánticas que generarán el carácter bosónico de las partículas compuestas.

Fenómenos ampliamente conocidos pero poco entendidos, como la superconductividad y el comportamiento de las excitaciones en un sólido cristalino, han podido ser explicados en el marco de la teoría de cobosones [5]. Por otro lado, en los últimos años este formalismo se aplicó al estudio de condensados de Bose-Einstein (BECs) moleculares en gases de Fermi ultrafríos con interacción [6-9]. En estos sistemas, los efectos no triviales de la composición, es decir, de la estructura de los cobosones, son accesibles experimentalmente. En el marco de este formalismo se ha mostrado que como consecuencia del comportamiento universal de los gases de Fermi interactuantes, la estadística de estos sistemas de muchas partículas está gobernada por el entrelazamiento entre los fermiones que constituyen una molécula o bosón compuesto [3, 4, 10].

El entrelazamiento juega un rol clave en la comprensión de los sistemas de bosones compuestos. Como mencionamos, el alto entrelazamiento entre las partículas constituyentes de un cobosón garantiza el comportamiento aproximadamente bosónico [3, 4]. El estudio del entrelazamiento en diversos sistemas constituye un aspecto fundamental de la Mecánica Cuántica. A pesar de haber sido foco de una considerable cantidad de investigaciones por varios años, el concepto de entrelazamiento entre partículas idénticas aún posee problemas conceptuales. Por un lado existe cierto consenso en que el entrelazamiento entre partículas indistinguibles está asociado con correlaciones cuánticas que están por encima de las debidas a la (anti)simetría de intercambio. Por otro lado, hay varias propuestas de métodos para “extraer” entrelazamiento útil de sistemas de fermiones o bosones mínimamente correlacionados. De hecho hay un creciente debate sobre si es posible usar las correlaciones de intercambio para tareas de información cuántica [11-13].

Es por esto que el estudio del entrelazamiento juega un rol central en el entendimiento y la creación de aplicaciones de estos sistemas, motivado también por trabajos recientes que muestran indicios de que el entrelazamiento multipartito o correlaciones de muchas partículas se pueden extraer y usar como un recurso en tareas de información cuántica [12, 14, 15].

El formalismo de bosones compuestos abre nuevas conexiones entre los campos de la física atómica y molecular, la materia condensada y la información cuántica. En contraposición con otros tratamientos usuales utilizados para estudiar sistemas de muchas partículas, tales como campo medio o la aproximación de Bogoliubov ([16-19], entre muchos otros), la teoría de cobosones ofrece la importante ventaja de que la función de onda del estado fundamental se escribe en términos de los estados de cada uno de los fermiones constituyentes. Esto posibilita el desarrollo de una descripción del sistema de muchas partículas, aún en el límite macroscópico ( $N \rightarrow \infty$ ), a partir de una formulación microscópica. Esta descripción desde un formalismo microscópico del sistema de muchas partículas es sumamente valiosa para estudiar por ejemplo las correlaciones cuánticas entre los constituyentes del sistema, ya que su abordaje teórico presenta un alto grado de complejidad. Nos encontramos con diversos desafíos tanto teóricos como experimentales, que abren muchas puertas al estudio de esta prometedora teoría.

Surge naturalmente el interrogante de saber de antemano en qué modelos o en qué situaciones resulta apropiado aplicar la teoría de cobosones. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo será analizar un modelo simple de fermiones fuertemente interactuantes y determinar si dicho problema puede resolverse y ser explicado en el marco de esta teoría.

## 1.2. Organización del trabajo

La organización de este trabajo será de la siguiente manera:

En el capítulo 2, explicaremos el marco teórico necesario para comprender este trabajo de forma autocontenida. Profundizaremos en la comprensión de teorías perturbativas para encontrar soluciones para Hamiltonianos que no puedan resolverse exactamente. Luego, estableceremos el modelo en el que está comprendido nuestro trabajo: la segunda cuantización como forma de tratar problemas de muchas partículas. Finalmente, estudiaremos la teoría de cobosones, el análisis de nuestro problema en el marco de esta teoría constituirá el eje principal de este trabajo.

En el capítulo 3, plantharemos el sistema que queremos resolver, y trabajaremos con el Hamiltoniano para encontrar un Hamiltoniano efectivo que proyectaremos sobre el subespacio de interés para este trabajo, que consiste en el subespacio de estados fundamentales.

En el capítulo 4 resolveremos dicho Hamiltoniano para distintos números de partículas, de forma exacta cuando sea posible, y numéricamente cuando no. En el capítulo 5 utilizaremos el enfoque de la teoría de cobosones para resolver el mismo Hamiltoniano.

En el capítulo 6 analizaremos y compararemos los diferentes resultados. En el 7, usaremos el ansatz de Bethe para obtener una solución analítica exacta para el caso de  $N = 2$  mediante el mapeo de nuestro Hamiltoniano efectivo a un Hamiltoniano de spines.

Por último, en el capítulo 8 se presentarán las conclusiones y un cierre general del trabajo.

# Capítulo 2

## Marco teórico

En este capítulo explicaremos los recursos teóricos que se usarán a lo largo del trabajo. En primer lugar, explicaremos cómo usar métodos perturbativos para obtener un Hamiltoniano efectivo para nuestro sistema, que podrá resolverse de forma analítica en algunos casos, y numérica en otros. Luego, hablaremos del enfoque que nos permitirá escribir estados de muchas partículas, y haremos aclaraciones respecto de la notación a utilizar. Por último, se presentará el formalismo de la teoría de cobosones, que se usará para encontrar soluciones del Hamiltoniano efectivo, que se compararán con las soluciones analíticas y numéricas.

### 2.1. Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo y Hamiltoniano efectivo

Comenzaremos a desarrollar las herramientas utilizadas para resolver el Hamiltoniano de nuestro sistema. El objetivo de esta sección es explicar un método para la obtención de un *Hamiltoniano efectivo*, que como veremos más adelante, admite una solución analítica simple en el caso de 1 par. Esta solución será necesaria en el desarrollo del trabajo para construir de forma cerrada el estado de  $N$  pares utilizando el ansatz de la teoría de cobosones. En el caso de  $N$  pares, resolveremos el Hamiltoniano efectivo por diagonalización numérica.

Siguiendo el lineamiento de [20] en esta sección, encontraremos una expansión en series de potencias del operador de evolución temporal, de donde podremos identificar el Hamiltoniano efectivo, como se explicará más adelante. Para esto, primero repasaremos el concepto de *representaciones* en mecánica cuántica, en particular, estamos interesados en la representación interacción.

En mecánica cuántica existen diversas representaciones de los operadores y estados. Cada representación está conectada con las demás por transformaciones unitarias, y difiere de las otras debido a la forma en la que cada una trata la evolución del sistema. La representación más común es la representación de Schrödinger, en donde los estados dependen del tiempo y evolucionan temporalmente, pero los operadores son independientes del tiempo. En cambio, en la representación interacción, tanto los vectores de estado como los operadores evolucionan en el tiempo. Nos concentraremos ahora en encontrar estos y sus ecuaciones de movimiento, a partir de la representación de Schrödinger. A partir de ahora y en lo subsiguiente, utilizaremos una notación donde el subíndice  $I$  indica representación interacción, y no tener subíndice indica representación de Schrödinger.

#### 2.1.1. Representación Interacción

Tomemos un sistema descrito por un Hamiltoniano que pueda escribirse de la siguiente forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (2.1)$$

donde  $\hat{H}_0$  es independiente del tiempo, pero  $\hat{V}$  puede depender del tiempo. Consideramos que  $\hat{V}$  es una perturbación pequeña comparada con  $\hat{H}_0$ .

Los vectores de estado y los operadores se definen respectivamente como:

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{it\hat{H}_0/\hbar} |\psi(t)\rangle \quad (2.2)$$

y

$$\hat{A}_I(t) = e^{it\hat{H}_0/\hbar} \hat{A} e^{-it\hat{H}_0/\hbar}. \quad (2.3)$$

Para encontrar la evolución temporal, tomamos las derivadas en el tiempo. Usando la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (2.4)$$

y usando también el hecho de que  $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$ , encontramos la evolución temporal de los estados y operadores, que están dadas por

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{V}_I |\psi(t)\rangle_I \quad (2.5)$$

y

$$\frac{d\hat{A}_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_I(t), \hat{H}_0]. \quad (2.6)$$

Vemos que la evolución temporal de los estados está dominada por la interacción  $\hat{V}_I$ , mientras que la de los operadores está dominada por el Hamiltoniano sin perturbar  $\hat{H}_0$ .

### 2.1.2. Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo

Ahora que tenemos expresado todo en términos de la representación interacción, podemos comenzar a analizar la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo [20].

La ecuación de Schrödinger a resolver cuando la perturbación está actuando es

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = (\hat{H}_0 + \hat{V}) |\Psi(t)\rangle \quad (2.7)$$

pero es más fácil de trabajar en la representación interacción, por lo tanto la ecuación a resolver es:

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{V}_I |\Psi(t)\rangle_I. \quad (2.8)$$

La evolución temporal del estado en la representación de Schrödinger

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_i) |\Psi(t_i)\rangle \quad (2.9)$$

puede ser escrita en la representación interacción como

$$|\Psi(t)\rangle_I = \hat{U}_I(t, t_i) |\Psi(t_i)\rangle_I. \quad (2.10)$$

Si insertamos 2.10 en 2.8 llegamos a la ecuación

$$i\hbar \frac{d\hat{U}_I(t, t_i)}{dt} = \hat{V}_I(t) \hat{U}_I(t, t_i). \quad (2.11)$$

Las soluciones a esta ecuación, con condición inicial  $\hat{U}_I(t_i, t_i) = \hat{I}$  están dadas por la ecuación integral

$$\hat{U}_I(t, t_i) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t') \hat{U}_I(t', t_i) dt'. \quad (2.12)$$

Como habíamos asumido que la perturbación es pequeña, podemos resolver esta ecuación integral iterativamente, con condición inicial  $\hat{U}_I(t, t_i) = \hat{I}$ . Así, obtenemos la llamada serie de Dyson:

$$\begin{aligned} \hat{U}_I(t, t_i) = & 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t') dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t_1) dt_1 \int_{t_i}^{t_1} \hat{V}_I(t_2) dt_2 + \dots \\ & + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t_1) dt_1 \int_{t_i}^{t_1} \hat{V}_I(t_2) dt_2 \int_{t_i}^{t_2} \hat{V}_I(t_3) dt_3 \dots \int_{t_i}^{t_{n-1}} \hat{V}_I(t_n) dt_n + \dots \end{aligned} \quad (2.13)$$

### 2.1.3. Hamiltoniano efectivo

Al resolver la serie de Dyson, veremos que en nuestro sistema a resolver la contribución a primer orden es nula (esto puede verse en las secciones 3.2.1.1 y 3.2.2.1), y la contribución a segundo orden tiene términos oscilatorios en  $t$  y términos lineales en  $t$  (como veremos en las secciones 3.2.1.2 y 3.2.2.2).

En regímenes donde las contribuciones lineales en el tiempo son dominantes respecto de las contribuciones oscilatorias, podemos identificar a las primeras con la evolución dada por un Hamiltoniano efectivo independiente del tiempo:

$$\hat{U}_I = e^{-it\hat{H}_{ef}/\hbar} \approx 1 - \frac{it}{\hbar}\hat{H}_{ef}. \quad (2.14)$$

De esta forma, resolviendo la serie y manteniendo sólo los términos a orden lineal podemos obtener una expresión para dicho Hamiltoniano efectivo.

## 2.2. Teoría de perturbaciones degenerada independiente del tiempo

Otro enfoque a utilizar en este trabajo es el uso de la teoría de perturbaciones independiente del tiempo. Encontraremos correcciones a la función de onda, a diferentes órdenes, que será utilizada más adelante. Además, vamos a reobtener las energías que se encontraron usando el enfoque del Hamiltoniano efectivo. De esta forma, corroboraremos que los resultados encontrados con los distintos métodos coinciden. En esta sección seguiremos el lineamiento de [20-22], y nos enfocaremos principalmente en el desarrollo de la teoría a segundo orden, el cual no suele encontrarse explícitamente desarrollado en la literatura.

### 2.2.1. Formalismo y análisis de la degeneración

Comenzamos nuevamente con un Hamiltoniano que satisface

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (2.15)$$

donde  $\hat{H}_1$  es una perturbación pequeña. Podemos hacer una expansión de la energía y de la función de onda que es solución del problema de autovalores total de la siguiente forma:

$$|\psi_j\rangle = |\psi_j^{(0)}\rangle + |\psi_j^{(1)}\rangle + |\psi_j^{(2)}\rangle + \dots \quad (2.16)$$

$$E_j = E_j^{(0)} + E_j^{(1)} + E_j^{(2)} + \dots \quad (2.17)$$

El resultado exacto del Hamiltoniano sin perturbar es conocido. Sin embargo, estamos en el caso en el que el problema es degenerado. Esto es, la misma energía corresponde a varios estados:

$$\hat{H}_0 |\phi_{j_n}\rangle = E_j^{(0)} |\phi_{j_n}\rangle \quad (2.18)$$

donde  $n = 1, 2, \dots, g$  y  $g$  es la degeneración del problema.

Por lo tanto, si vemos la expresión 2.16, nos encontramos con que al hacer tender la perturbación a cero, no sabemos a cuál de todos los estados degenerados tiende la función de onda total a orden cero. Debemos encontrar entonces los  $|\psi_j^{(0)}\rangle$  adecuados.

Podemos escribir

$$|\psi_j^{(0)}\rangle = \left( \sum_{n=1}^g |\phi_{j_n}\rangle \langle \phi_{j_n}| \right) |\psi_j^{(0)}\rangle = \sum_{n=1}^g \langle \phi_{j_n} | \psi_j^{(0)} \rangle |\phi_{j_n}\rangle = \sum_{n=1}^g \hat{a}_n |\phi_{j_n}\rangle. \quad (2.19)$$

Notamos que lo que debemos calcular son los coeficientes  $\hat{a}_n$ , que indican cuál es la combinación adecuada de estados degenerados que debemos usar. Una vez determinados, podemos calcular la corrección de la energía y de la función de onda a diferentes órdenes.

Proseguimos con el formalismo insertando las expansiones 2.16 y 2.17 en la ecuación de autovalores del Hamiltoniano total

$$\hat{H} |\psi_j\rangle = E_j |\psi_j\rangle, \quad (2.20)$$

y comparando término a término de acuerdo a los diferentes órdenes, podemos encontrar ecuaciones que nos permitan calcular los términos de distintos órdenes de las expansiones:

$$\text{Orden 0: } \hat{H}_0 |\psi_j^{(0)}\rangle = E_j^{(0)} |\psi_j^{(0)}\rangle \quad (2.21)$$

$$\text{Orden 1: } \hat{H}_0 |\psi_j^{(1)}\rangle + \hat{H}_1 |\psi_j^{(0)}\rangle = E_j^{(0)} |\psi_j^{(1)}\rangle + E_j^{(1)} |\psi_j^{(0)}\rangle \quad (2.22)$$

$$\text{Orden 2: } \hat{H}_0 |\psi_j^{(2)}\rangle + \hat{H}_1 |\psi_j^{(1)}\rangle = E_j^{(0)} |\psi_j^{(2)}\rangle + E_j^{(1)} |\psi_j^{(1)}\rangle + E_j^{(2)} |\psi_j^{(0)}\rangle \quad (2.23)$$

Ahora consideramos las condiciones de normalización

$$\langle \phi_{j_n} | \phi_{j_m} \rangle = 0 \quad (2.24)$$

y sin pérdida de generalidad, dado que luego renormalizaremos la función de onda total, elegimos

$$\langle \psi_j^{(0)} | \psi_j \rangle = 1 \quad (2.25)$$

con lo cual, insertando 2.16 en 2.25, tenemos

$$\langle \psi_j^{(0)} | \psi_j^{(0)} \rangle = 1, \langle \psi_j^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = \langle \psi_j^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle = \dots = 0. \quad (2.26)$$

### 2.2.2. Primer orden

Trabajaremos primero con las expresiones de orden 1, es decir, 2.22.

Resolveremos esta ecuación en el subespacio de los estados degenerados del Hamiltoniano sin perturbar. Si lo pensamos en términos de proyectores, tenemos el proyector  $P_0$  que genera el subespacio de degeneración  $g$ , es decir, el subespacio de  $|\phi_{j_n}\rangle$ , y también tenemos  $P_1 = 1 - P_0$  que genera todo el subespacio restante.

Para hacer esto, multiplicaremos  $\langle \phi_{j_n} |$  por izquierda en ambos miembros. Usando las condiciones de normalización determinadas, la expresión 2.19, y la hermiticidad del Hamiltoniano, llegamos a la expresión

$$\sum_m a_m \left( \langle \phi_{j_n} | \hat{H}_1 | \phi_{j_m} \rangle - E_j^{(1)} \delta_{mn} \right) = 0. \quad (2.27)$$

Vemos que este es un sistema de  $g$  ecuaciones lineales homogéneas para los coeficientes  $a_m$ . Por lo tanto, los coeficientes serán no nulos sólo cuando el determinante sea nulo, es decir, debe cumplirse

$$|\hat{H}_1 - E_j^{(1)} \hat{I}| = 0. \quad (2.28)$$

Tenemos  $g$  raíces de la ecuación secular, que son las  $E_{j_m}^{(1)}$  con  $m = 1, 2, \dots, g$ . Es decir, encontramos  $g$  correcciones de la energía a primer orden. Reemplazando cada una de las  $E_{j_m}^{(1)}$  en 2.27, podemos despejar los autovectores correspondientes a cada corrección:

$$a_m = \begin{pmatrix} a_{m_1} \\ a_{m_2} \\ \vdots \\ a_{m_g} \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

Así, podemos reescribir 2.19 de la forma

$$|\psi_{j_m}^{(0)}\rangle = \sum_{n=1}^g a_{m_n} |\phi_{j_n}\rangle \quad (2.30)$$

y finalmente tenemos la función de onda a orden cero adecuada a la cual la función de onda total tiende si hacemos que la perturbación tienda a cero.

Por lo tanto, como hemos encontrado qué combinación lineal de  $|\phi_{j_n}\rangle$  diagonalizan la perturbación, podemos escribir más compactamente

$$E_j^{(1)} = \langle \psi_j^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_j^{(0)} \rangle. \quad (2.31)$$

Volvemos a analizar ahora 2.22. Esta vez, buscamos la corrección a primer orden de la función de onda. Trabajaremos ahora en el subespacio  $P_1$ . Llamamos  $|\psi_k^{(0)}\rangle$  a los estados de este subespacio, el índice 0 indicando que se trata del Hamiltoniano sin perturbar, y el índice  $k \neq j$  indicando la ortogonalidad de los estados de  $P_1$  y  $P_0$ , es decir, se tiene

$$\langle \psi_k^{(0)} | \phi_{j_n} \rangle = \langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(0)} \rangle = 0. \quad (2.32)$$

De la misma manera que antes, multiplicamos por izquierda  $\langle \psi_k^{(0)} |$ . Usamos nuevamente la hermiticidad del Hamiltoniano, y la ortogonalidad 2.32. Obtenemos así la corrección a primer orden de la función de onda:

$$|\psi_j^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq j} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_j^{(0)} \rangle}{E_j^{(0)} - E_k^{(0)}} |\psi_k^{(0)}\rangle. \quad (2.33)$$

### 2.2.3. Segundo orden

Generamente, el cálculo hasta primer orden alcanza para identificar los  $|\psi_j^{(0)}\rangle$  adecuados. Sin embargo, veremos más adelante, en la sección 3.2.1.1, ecuación 3.14, que para nuestro sistema se satisface la siguiente expresión:

$$\langle \phi_{j_n} | \hat{H}_1 | \phi_{j_n} \rangle = 0. \quad (2.34)$$

Por lo tanto, no podemos adquirir ninguna información acerca de cuáles son los  $|\psi_j^{(0)}\rangle$  que debemos utilizar, porque obtendremos  $E_j^{(1)} = 0$ , es decir, corrección de la energía a primer orden nula. El análisis de la teoría hasta primer orden no es suficiente para resolver nuestro sistema.

Debemos entonces repetir los mismos pasos que en la sección 2.2.2, pero trabajando esta vez sobre la expresión 2.23, es decir, debemos desarrollar un orden más.

Vemos primero el análisis en el subespacio  $P_0$ : multiplicamos  $\langle \phi_{j_n} |$  por izquierda. Utilizamos nuevamente la hermiticidad del Hamiltoniano, las condiciones de normalización 2.26, la expresión 2.19, y la recientemente obtenida corrección a primer orden de la función de onda 2.33. Llegamos a

$$\sum_m a_m \left( \langle \phi_{j_n} | \left( \sum_{k \neq j} \frac{\hat{H}_1 | \psi_k^{(0)} \rangle \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}_1}{E_j^{(0)} - E_k^{(0)}} \right) | \phi_{j_m} \rangle - E_j^{(2)} \delta_{mn} \right) = 0. \quad (2.35)$$

En nuestro trabajo encontraremos que todas las energías  $E_k^{(0)}$  son iguales y nulas (sección 3.2), por lo tanto no contribuyen a la sumatoria. Además, por la forma en la que  $\hat{H}_1$  actúa sobre  $|\phi_{j_m}\rangle$ , dado por la ecuación 3.13, la expresión 2.35 toma para el modelo que vamos a resolver la siguiente forma particular

$$\sum_m a_m \left( \frac{\langle \phi_{j_n} | \hat{H}_1^2 | \phi_{j_m} \rangle}{E_j^{(0)}} - E_j^{(2)} \delta_{mn} \right) = 0, \quad (2.36)$$

por lo tanto nos encontramos una vez más con un sistema de  $g$  ecuaciones lineales homogéneas para los coeficientes  $a_m$  en donde habrá raíces no nulas si el siguiente determinante cumple

$$|\alpha \hat{H}_1^2 - E_j^{(2)} \hat{I}| = 0 \quad (2.37)$$

con  $\alpha = 1/E_j^{(0)}$ . Las raíces de la ecuación secular serán las correcciones  $E_{j_m}^{(2)}$  con  $m = 1, 2, \dots, g$ , y reemplazando en 2.36 podemos encontrar los vectores  $g$ -dimensionales  $a_m$  y tener finalmente los  $|\psi_{j_m}^{(0)}\rangle$  correctos.

Nuevamente podemos escribir en forma compacta

$$\alpha \langle \psi_j^{(0)} | \hat{H}_1^2 | \psi_j^{(0)} \rangle = E_j^{(2)}. \quad (2.38)$$

Notamos que esta forma cuadrática de la perturbación del Hamiltoniano es equivalente a llegar hasta segundo orden en la serie de Dyson para obtener un Hamiltoniano efectivo, como se explicó en la sección 2.1.2.

Procedemos con el análisis de 2.23, esta vez en el subespacio  $P_1$ . Multiplicamos  $\langle \psi_k^{(0)} |$  por izquierda, usamos la ortogonalidad 2.32, y la hermiticidad del Hamiltoniano, para obtener

$$|\psi_j^{(2)}\rangle = \sum_{k \neq j} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_j^{(1)} \rangle}{E_j^{(0)} - E_k^{(0)}} |\psi_k^{(0)}\rangle, \quad (2.39)$$

y como conocemos  $|\psi_j^{(1)}\rangle$  (ecuación 2.33), tenemos todos los elementos necesarios para calcular la función de onda total y las correcciones de la energía hasta segundo orden.

#### 2.2.4. Renormalización de la función de onda

Una vez que encontramos la función de onda perturbada, al haber elegido  $\langle \psi_j^{(0)} | \psi_j \rangle = 1$  al momento de realizar los cálculos (recordar 2.25 en la sección 2.2.1), nos damos cuenta de que la función de onda no está normalizada de la forma usual, por lo tanto, debemos renormalizarla.

Vemos que manteniendo términos sólo hasta segundo orden se obtiene:

$$\begin{aligned} Z_n &= \langle \psi_j | \psi_j \rangle = 1 + \langle \psi_j^{(1)} | \psi_j^{(1)} \rangle \\ &= 1 + \frac{\sum_{k \neq j} \left( \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_j^{(0)} \rangle \right)^2}{\left( E_j^{(0)} - E_k^{(0)} \right)^2}, \end{aligned} \quad (2.40)$$

por lo tanto se tiene

$$|\psi'_j\rangle = Z_n^{-1/2} |\psi_j\rangle \simeq \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{\sum_{k \neq j} \left( \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_j^{(0)} \rangle \right)^2}{\left( E_j^{(0)} - E_k^{(0)} \right)^2} \right) |\psi_j\rangle \quad (2.41)$$

$$= \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{\sum_{k \neq j} \left( \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_j^{(0)} \rangle \right)^2}{\left( E_j^{(0)} - E_k^{(0)} \right)^2} \right) \left( |\psi_j^{(0)}\rangle + |\psi_j^{(1)}\rangle + |\psi_j^{(2)}\rangle + \dots \right) \quad (2.42)$$

$$|\psi'_j\rangle = \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{\sum_{k \neq j} \left( \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_j^{(0)} \rangle \right)^2}{\left( E_j^{(0)} - E_k^{(0)} \right)^2} \right) |\psi_j^{(0)}\rangle + |\psi_j^{(1)}\rangle + |\psi_j^{(2)}\rangle + \dots \quad (2.43)$$

y así obtenemos nuestra función de onda normalizada  $|\psi'_j\rangle$  que cumple  $\langle \psi'_j | \psi'_j \rangle = 1$

### 2.3. Segunda cuantización

La segunda cuantización es el enfoque que utilizaremos en ese trabajo para escribir estados de muchas partículas [23]. Históricamente, el nombre segunda cuantización surge en el desarrollo de la teoría de campos, en donde los campos actuaban como operadores a los que se les determinaban reglas de cuantización, en contraposición a la “primera cuantización” en donde las magnitudes físicas (posición, momento, etc.) son las que actúan como operadores.

Definimos un estado de muchas partículas como

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (2.44)$$

donde  $n_i$  indica el número de partículas con autovalor  $k_i$  para el operador que estemos analizando. Este vector pertenece al *espacio de Fock*. El vacío se define como  $|0, 0, \dots, 0, \dots\rangle = |0\rangle$  y el estado en donde hay una única partícula con autovalor  $k_i$  se define como  $|n_1, n_2, \dots, n_i = 1, \dots\rangle = |k_i\rangle$ .

Para construir estados de muchas partículas hacemos uso de operadores de aniquilación  $\hat{a}_i$  y creación  $\hat{a}_i^\dagger$  que como su nombre lo indica, crean o aniquilan partículas con autovalor  $k_i$ . Estos cumplen:

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0 \quad (2.45)$$

$$\hat{a}_i |k_i\rangle = |0\rangle \quad (2.46)$$

$$\hat{a}_i^\dagger |0\rangle = |k_i\rangle. \quad (2.47)$$

Estos operadores pueden crear o aniquilar bosones o fermiones, de acuerdo al caso, cumplen las siguientes relaciones de conmutación y anticonmutación respectivamente:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (\text{para bosones}) \quad (2.48)$$

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (\text{para fermiones}). \quad (2.49)$$

La notación a utilizar en este trabajo será ligeramente diferente. A lo largo de este trabajo los vectores en el espacio de Fock serán estados donde únicamente hay una sola o ninguna partícula correspondiente a los diferentes autovalores, debido a que trabajaremos con partículas fermiónicas que se rigen por el principio de exclusión de Pauli. Este indica que no puede haber dos fermiones en el mismo estado cuántico a la vez. Por lo tanto, enfatizaremos en nuestra notación la posición de cada partícula, escribiendo los estados de la forma

$$\bigotimes_i |j_i\rangle = |j_1\rangle |j_2\rangle \cdots |j_N\rangle \quad (2.50)$$

donde  $i$  identifica el número total de partículas, es decir, cada ket representará el estado de una única partícula, y  $j$  identifica la posición de esta partícula. A modo de ejemplo, de acuerdo a esta representación, el siguiente estado de dos partículas se escribiría de la siguiente forma:

$$|1, 0, 0, 1\rangle = |j_1 j_2\rangle = |1 4\rangle \quad (2.51)$$

El lado izquierdo de esta igualdad, escrito en la base de estados de Fock, indica que hay una partícula con autovalor correspondiente a la primera posición y una partícula con autovalor correspondiente a la cuarta posición, y cero partículas con autovalores correspondientes a la segunda y tercera posición. El lado derecho de esta igualdad indica directamente las posiciones en donde están ubicadas estas partículas, que son la posición 1 y posición 4, sabiendo de antemano que cada ket corresponde a una sola partícula.

## 2.4. Teoría de cobosones

Un cobosón (abreviación según el término en inglés *composite boson*) es una partícula compuesta de dos o más subpartículas, que pueden ser a su vez fermiones o bosones. Si el spin total de las subpartículas es entero, la partícula compuesta se comporta entonces aproximadamente como un bosón. Se ha demostrado que el grado de entrelazamiento entre las partículas determina qué tan similar es el comportamiento de un cobosón frente al de un bosón puro [3].

Si se tiene un estado puro compuesto por dos partículas distinguibles de tipo  $a$  y  $b$ , podemos escribir la descomposición de Schmidt para el sistema compuesto, definida de la forma

$$\Psi(x_a, x_b) = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\lambda_n} \phi_n^{(a)}(x_a) \phi_n^{(b)}(x_b), \quad (2.52)$$

donde los modos de Schmidt  $\phi_n^{(a)}$  y  $\phi_n^{(b)}$  son los autovectores de las matrices densidad reducidas de  $a$  y  $b$ , con los mismos autovalores  $\lambda_n$  en cada caso. Los  $\sqrt{\lambda_n}$  se llaman coeficientes de Schmidt, son no negativos, y satisfacen  $\sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n = 1$  [3, 24].

Estos están directamente relacionados con el grado de entrelazamiento del sistema compuesto. Decimos que un sistema  $c$  compuesto de partes  $a$  y  $b$  está entrelazado si no puede escribirse de la forma

$$|c\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle, \quad (2.53)$$

es decir, si no puede escribirse como un estado producto. Si en cambio puede escribirse de la forma 2.53, decimos que no está entrelazado.

Si definimos el rango de Schmidt como el número de  $\sqrt{\lambda_n}$  no nulos presentes en la expresión 2.52, notamos que tener rango de Schmidt igual a 1, es decir, un solo  $\sqrt{\lambda_n}$ , corresponde a tener un estado producto, por lo cual las partículas  $a$  y  $b$  no están entrelazadas, mientras que tener rango de Schmidt mayor a 1 corresponde a distintos grados de entrelazamiento entre las partículas, dependiendo de la distribución de los  $\sqrt{\lambda_n}$ . En particular, se tendrá entrelazamiento máximo entre las partículas si existe una distribución uniforme de  $\sqrt{\lambda_n}$  [24].

En términos de segunda cuantización, la expresión 2.52 puede escribirse como el operador creación de un cobosón, actuando sobre el vacío, de la siguiente forma:

$$\hat{c}^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\lambda_n} \hat{a}_n^\dagger \hat{b}_n^\dagger, \quad (2.54)$$

donde  $\hat{a}_n^\dagger$  y  $\hat{b}_n^\dagger$  son los operadores creación de las partículas de tipo  $a$  y  $b$ . Este operador satisface la relación de conmutación

$$[\hat{c}, \hat{c}^\dagger] = 1 + s\Delta \quad (2.55)$$

con  $s = +1$  si ambas partículas son bosones,  $s = -1$  si ambas son fermiones, y el operador  $\Delta$  se define como:

$$\Delta = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \left( \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n \right) \quad (2.56)$$

por lo cual puede verse que el operador  $\hat{c}^\dagger$  no es perfectamente bosónico.

A partir del estado de un cobosón se puede construir el estado de  $N$  cobosones, que tiene la forma:

$$|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{\chi_N N!}} \left( \hat{c}^\dagger \right)^N |0\rangle \quad (2.57)$$

donde  $|0\rangle$  es el estado vacío, es decir, sin partículas, y  $\chi_N$  es una constante de normalización tal que se cumpla  $\langle N|N\rangle = 1$ , y que también varía dependiendo de si las partículas constituyentes son fermiones o bosones. Si son fermiones, se tiene

$$\chi_N^F = N! \sum_{P_N > \dots > P_2 > P_1} \lambda_{P_1} \lambda_{P_2} \dots \lambda_{P_N} \quad (2.58)$$

mientras que si son bosones, esta constante tiene la forma

$$\chi_N^B = N! \sum_{P_N \geq \dots \geq P_2 \geq P_1} \lambda_{P_1} \lambda_{P_2} \cdots \lambda_{P_N}. \quad (2.59)$$

En nuestro trabajo analizaremos el caso en el que las partículas constituyentes son fermiones. El factor de normalización  $\chi_N$  refleja cómo los pares de fermiones deben distribuirse en los estados de cada uno de los fermiones constituyentes en la cadena obedeciendo el principio de exclusión de Pauli. De acuerdo con la teoría de cobosones, la física del sistema de muchas partículas emerge del estado fundamental de un par, que determina los coeficientes  $\lambda_j$ , junto con la “interacción de intercambio” de los  $N$  pares de fermiones [1].

Si escribimos la ecuación general del operador aniquilación actuando sobre  $|N\rangle$

$$\hat{c}|N\rangle = \alpha_n \sqrt{N} |N-1\rangle + |\epsilon_N\rangle, \quad (2.60)$$

donde  $\alpha_n$  es una constante y  $|\epsilon_N\rangle$  es ortogonal a  $|N-1\rangle$ , vemos que el operador  $\hat{c}$  será perfectamente bosónico si se satisfacen las condiciones  $\alpha_n \rightarrow 1$  y  $\langle \epsilon_N | \epsilon_N \rangle \rightarrow 0$ . Luego de realizar cálculos encontramos que para  $N > 1$  se cumple:

$$\alpha_n = \sqrt{\frac{\chi_N}{\chi_{N-1}}} \quad (2.61)$$

y

$$\langle \epsilon_N | \epsilon_N \rangle = 1 - N \frac{\chi_N}{\chi_{N-1}} + (N-1) \frac{\chi_{N+1}}{\chi_N}. \quad (2.62)$$

Entonces, vemos que en el límite  $\frac{\chi_{N+1}}{\chi_N} \rightarrow 1$  un cobosón se comporta como un bosón perfecto. Como los  $\chi_N$  dependen directamente de la distribución de  $\lambda_n$ , encontramos aquí la relación entre entrelazamiento y comportamiento bosónico.

## Capítulo 3

# Sistema a trabajar

### 3.1. Hamiltoniano del sistema

El sistema a estudiar consiste en una cadena unidimensional de  $S$  sitios, donde se encuentran presentes  $N$  pares de fermiones fuertemente interactuantes. Los fermiones distinguibles  $a$  y  $b$  interactúan atractivamente mediante  $U_0$ , y la tasa de tuneo de las partículas individuales está dada por  $J$ . En el régimen a estudiar se tiene  $U_0 \gg J$ . El Hamiltoniano que describe este sistema es [25]

$$\hat{H} = -U_0 \sum_{j=1}^S \hat{a}_j^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{b}_j - \frac{J}{2} \sum_{j=1}^S (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1} + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_{j+1} + H.C.), \quad (3.1)$$

donde  $\hat{a}_j^\dagger$  ( $\hat{a}_j$ ) crea (aniquila) una partícula del tipo  $a$  en el estado  $j$ . Introducimos además el operador número  $\hat{n}_j^{(a)} = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$  que cuenta el número de partículas de tipo  $a$  en el estado  $j$ . Como estamos trabajando con fermiones,  $\hat{n}_j^{(a)}$  tomará el valor 0 o 1 dependiendo si el sitio está o no ocupado. Las definiciones son análogas para las partículas de tipo  $b$ .

El subíndice  $j+1$  cobrará diferentes sentidos según las condiciones de contorno que consideremos: corresponderá al sitio 1 cuando se usen condiciones periódicas de contorno, y a un sitio ficticio  $S+1$  cuando se usen condiciones abiertas. Esto se verá en detalle más adelante.

El sistema puede verse representado gráficamente en la figura 3.1, en donde los círculos azules y rojos identifican a los fermiones de tipo  $a$  y tipo  $b$ .

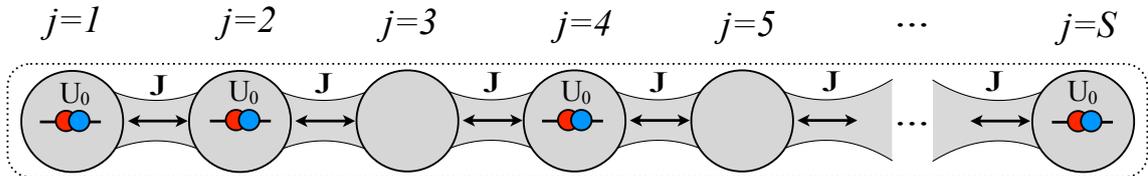


Figura 3.1: Sistema a trabajar

### 3.2. Enfoque de Hamiltoniano Efectivo

Nuestro enfoque para resolver el problema será encontrar el Hamiltoniano efectivo descrito en la sección 2.1.3. Para esto, debemos resolver la serie de Dyson e identificar lo que acompaña a los términos lineales en  $t$ , como se explicó en las secciones 2.1.2 y 2.1.3.

Analizaremos en primer lugar el caso más simple donde hay un solo par de fermiones en la cadena de  $S$  sitios. Este resultado será necesario al momento de aplicar la teoría de cobosones, para construir estados de múltiples cobosones. Luego, analizaremos el caso de  $N$  pares de fermiones en la cadena.

Debido a que nos concentraremos en analizar el estado fundamental, definimos  $P_g$  como el proyector sobre el subespacio de estados fundamentales, y  $P_e$  como el proyector sobre el subespacio del primer estado excitado. Como estos espacios son ortogonales, se tiene

$$P_g P_e = P_e P_g = 0. \quad (3.2)$$

Proyectaremos entonces el operador de evolución temporal sobre el subespacio de interés, es decir, resolveremos  $P_g \hat{U}_I P_g$ . Así podremos identificar el Hamiltoniano efectivo, trabajando sobre este subespacio.

Recordando el Hamiltoniano de nuestro sistema escrito más arriba, identificamos:

$$\hat{H}_0 = -U_0 \sum_{j=1}^S \hat{a}_j^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{b}_j \quad (3.3)$$

$$\hat{V} = -\frac{J}{2} \sum_{j=1}^S (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1} + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_{j+1} + H.C.) \quad (3.4)$$

$$\hat{V}_I = e^{it\hat{H}_0/\hbar} \hat{V} e^{-it\hat{H}_0/\hbar}. \quad (3.5)$$

### 3.2.1. 1 par

El caso donde se tiene en la cadena un único par de partículas tipo  $a$  y  $b$  es el más simple. Respecto del Hamiltoniano sin perturbar, el estado fundamental en este caso consiste en tener ambas partículas en un mismo sitio, teniendo  $S$  sitios posibles, por lo tanto es un sistema con degeneración  $S$ . La energía correspondiente a este estado es  $-U_0$ . Entonces, podemos escribir al estado y al proyector sobre dicho subespacio respectivamente de la siguiente manera:

$$|\psi_g\rangle = \sum_{j=1}^S |jj\rangle \quad (3.6)$$

$$P_g = \sum_{j=1}^S |jj\rangle \langle jj|, \quad (3.7)$$

donde se tiene  $\hat{a}_j^\dagger$  y  $\hat{b}_j^\dagger$  son los operadores de creación de las partículas, es decir,  $\hat{a}_j^\dagger \hat{b}_j^\dagger |00\rangle = |jj\rangle$ .

Debemos encontrar  $\hat{U}_I$  a distintos órdenes. Veremos (sección 3.2.1.1) que es necesario llegar hasta orden dos en la expansión, y nos quedaremos hasta este orden en la expansión. Para realizar este cálculo, escribimos al operador de evolución temporal del Hamiltoniano sin perturbar como

$$\hat{U}_g = e^{-it\hat{H}_0/\hbar} = P_g e^{-itE_g/\hbar} + P_e e^{itE_e/\hbar} = P_g e^{itU_0/\hbar} + P_e \quad (3.8)$$

porque con respecto a dicho Hamiltoniano, la energía del estado fundamental es  $-U_0$  y la energía del primer estado excitado es 0. En este caso, notamos que sólo existe un estado excitado, que también es degenerado y es el que corresponde a tener el par separado, es decir, las partículas  $a$  y  $b$  ubicadas en distintos sitios. Podemos definir entonces este estado y a su respectivo proyector sobre ese subespacio como

$$|\psi_e\rangle = \sum_{\substack{m,n \\ m \neq n}} |mn\rangle \quad (3.9)$$

$$P_e = \sum_{\substack{m,n \\ m \neq n}} |mn\rangle \langle mn|. \quad (3.10)$$

Entonces, con  $t_i = 0$  debemos resolver los diferentes órdenes de la serie de Dyson, recordemos la expresión 2.13:

$$P_g \hat{U}_I^{(1)}(t) P_g = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t P_g \hat{V}_I(t_1) P_g dt_1 = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t P_g \hat{U}_g^\dagger(t_1) \hat{V} \hat{U}_g(t_1) P_g dt_1 \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} P_g \hat{U}_I^{(2)}(t) P_g &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t P_g \hat{V}_I(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} \hat{V}_I(t_2) P_g dt_2 \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 P_g (\hat{U}_g^\dagger(t_1) \hat{V} \hat{U}_g(t_1)) (\hat{U}_g^\dagger(t_2) \hat{V} \hat{U}_g(t_2)) P_g. \end{aligned} \quad (3.12)$$

### 3.2.1.1. Primer orden

Calculamos entonces  $\hat{U}_I^{(1)}(t)$ . Para esto primero hacemos una cuenta auxiliar: veremos la acción de la perturbación sobre los estados fundamentales.

$$\begin{aligned} \hat{V} P_g &= -\frac{J}{2} \sum_{j=1}^S (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1} + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_{j+1} + H.C.) \sum_{i=1}^S |i i\rangle \langle i i| \\ &= -\frac{J}{2} \sum_{j=1}^S (|j j+1\rangle + |j+1 j\rangle) (\langle j+1 j+1| + \langle j j|). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Por lo tanto, se tiene:

$$P_g \hat{V} P_g = \left( \sum_{i=1}^S |i i\rangle \langle i i| \right) \left( -\frac{J}{2} \sum_{j=1}^S (|j j+1\rangle + |j+1 j\rangle) (\langle j+1 j+1| + \langle j j|) \right) = 0. \quad (3.14)$$

Vemos que la acción 3.13 lleva un estado donde ambas partículas del par están en un mismo sitio a un estado donde el par se separó y las partículas  $a$  y  $b$  están entonces en dos sitios contiguos. Es decir, lleva un estado del subespacio  $P_g$  al subespacio  $P_e$ , por lo tanto vemos en 3.14, que, al proyectar con  $P_g$ , el resultado es cero ya que estos dos espacios son ortogonales.

Nos concentramos ahora en el argumento de la integral de la derecha de la ecuación 3.11. Si escribimos las expresiones adecuadas para  $\hat{U}_g$  y  $\hat{U}_g^\dagger$  según lo expresado en 3.8, llegamos a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} P_g \hat{U}_g^\dagger(t_1) \hat{V} \hat{U}_g(t_1) P_g &= P_g (P_g e^{-itU_0/\hbar} + P_e) \hat{V} (P_g e^{itU_0/\hbar} + P_e) P_g \\ &= P_g (P_g \hat{V} P_g + e^{-itU_0/\hbar} P_g \hat{V} P_e + e^{itU_0/\hbar} P_e \hat{V} P_g + P_e \hat{V} P_e) P_g. \end{aligned} \quad (3.15)$$

En el primer término de esta expresión está presente la acción  $P_g \hat{V} P_g$ . Debido a lo calculado en 3.14, podemos ver que este términos se hacen cero.

Por otra parte las acciones  $P_e P_g$  y  $P_g P_e$  están presentes en el segundo, tercer, y cuarto término de esta expresión, que nuevamente producen una contribución nula dado que estos operadores proyectan sobre subespacios ortogonales entre sí, como se dijo en 3.2.

De esta forma concluimos que

$$\hat{U}_I^{(1)}(t) = 0 \quad (3.16)$$

y confirmamos que es necesario calcular por lo menos un orden más en la expansión en la serie de Dyson.

### 3.2.1.2. Segundo orden

Nuevamente nos concentramos en el argumento de la segunda integral en la expresión 3.12

$$P_g (\hat{U}_g^\dagger(t_1) \hat{V} \hat{U}_g(t_1)) (\hat{U}_g^\dagger(t_2) \hat{V} \hat{U}_g(t_2)) P_g = P_g (P_g \hat{V} P_g + e^{-it_1 U_0/\hbar} P_g \hat{V} P_e + e^{it_1 U_0/\hbar} P_e \hat{V} P_g + P_e \hat{V} P_e) \times \\ \times (P_g \hat{V} P_g + e^{-it_2 U_0/\hbar} P_g \hat{V} P_e + e^{it_2 U_0/\hbar} P_e \hat{V} P_g + P_e \hat{V} P_e) P_g. \quad (3.17)$$

Antes de distribuir esta expresión, notamos que los términos que tengan  $P_e$  a su derecha o a su izquierda no contribuirán al ser proyectados con los  $P_g$  de afuera de los paréntesis, como vimos en 3.2. Obtenemos entonces la expresión

$$P_g (\hat{U}_g^\dagger(t_1) \hat{V} \hat{U}_g(t_1)) (\hat{U}_g^\dagger(t_2) \hat{V} \hat{U}_g(t_2)) P_g = P_g (P_g \hat{V} P_g P_g \hat{V} P_g + e^{it_2 U_0/\hbar} P_g \hat{V} P_g P_e \hat{V} P_g + \\ + e^{-it_1 U_0/\hbar} P_g \hat{V} P_e P_g \hat{V} P_g + e^{i(t_2-t_1) U_0/\hbar} P_g \hat{V} P_e P_e \hat{V} P_g) P_g. \quad (3.18)$$

Ahora volvemos a utilizar la cuenta auxiliar 3.14. De esta forma, vemos que el primer, segundo, y tercer término de la expresión 3.18 no contribuyen al segundo orden de la expansión, debido a que tienen presente el término  $P_g \hat{V} P_e$ . Por lo tanto, el único término que hasta el momento contribuye es el cuarto término.

Retomando nuevamente la expresión general, obtenemos lo siguiente:

$$P_g \hat{U}_I^{(2)}(t) P_g = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 P_g P_g \hat{V} P_e P_e \hat{V} P_g P_g e^{i(t_2-t_1) U_0/\hbar} \\ = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 P_g \hat{V} P_e \hat{V} P_g e^{i(t_2-t_1) U_0/\hbar} \\ = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 P_g \hat{V}^2 P_g e^{i(t_2-t_1) U_0/\hbar}, \quad (3.19)$$

donde en la segunda igualdad usamos que todo proyector  $P$  satisface  $P^2 = P$ , y en la última usamos de nuevo la cuenta 3.13, que indica que no es necesario incluir el  $P_e$  debido a que ya nos encontramos en ese subespacio.

Sólo resta resolver el argumento de la integral reemplazando  $\hat{V}$  por 3.4 y  $P_g$  por 3.7. Obtenemos el resultado

$$P_g \hat{V}^2 P_g = P_g \frac{J^2}{4} \left( \sum_{j=1}^S |jj\rangle \langle j+1 j+1| + |j+1 j+1\rangle \langle jj| + 2 |jj\rangle \langle jj| \right) P_g. \quad (3.20)$$

Analícemos la integral. Dado que  $P_g \hat{V}^2 P_g$  no depende del tiempo, podemos sacarlo fuera del signo de integral, y nos concentremos en resolver la parte dependiente del tiempo, cuyo resultado es

$$I = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{i(t_2-t_1) U_0/\hbar} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \frac{\hbar}{iU_0} \frac{J^2}{4} \left( t + \frac{\hbar}{iU_0} (e^{-itU_0/\hbar} - 1) \right). \quad (3.21)$$

Encontramos términos lineales y oscilatorios en  $t$ . Así, podemos finalmente identificar el Hamiltoniano efectivo como los factores que acompañan al término lineal, de orden  $J^2/U_0$ , y descartar los términos oscilatorios, de orden  $J^2/U_0^2$ , debido a la condición  $J \ll U_0$ .

Por último, regresamos a la representación de Schrödinger. Para esto, analícemos cómo surge el Hamiltoniano que buscamos:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V} \\
 \hat{U}_0^\dagger \hat{H} \hat{U}_0 &= \hat{U}_0^\dagger (\hat{H}_0 + \hat{V}) \hat{U}_0 \\
 \hat{H}_I &= \hat{H}_0 + \hat{V}_I \\
 \implies \hat{H}_{ef} &\sim \hat{V}_I = \hat{H}_I - \hat{H}_0,
 \end{aligned}$$

donde en la segunda igualdad transformamos a la representación interacción, y en la última igualdad usamos que el Hamiltoniano efectivo está asociado únicamente a la perturbación usada para encontrar la expansión usando la serie de Dyson. Por lo tanto vemos que para encontrar nuestro Hamiltoniano en la representación de Schrödinger debemos hacer lo siguiente:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{ef} &\sim \hat{H}_I - \hat{H}_0 \\
 \hat{H}_I &\sim \hat{H}_0 + \hat{H}_{ef} \\
 \hat{U}_0 \hat{H}_I \hat{U}_0^\dagger &\sim \hat{U}_0 (\hat{H}_0 + \hat{H}_{ef}) \hat{U}_0^\dagger \\
 \implies \hat{H} &\sim \hat{H}_0 + \hat{H}_{ef},
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

donde hemos usado que  $\hat{H}_{ef}$  ya está proyectado en un subespacio de  $\hat{H}_0$  asociado a  $\hat{U}_0$ . Vemos que para obtener el Hamiltoniano final en la representación de Schrödinger debemos sumar el Hamiltoniano sin perturbar al Hamiltoniano efectivo hallado.

Obtenemos entonces el Hamiltoniano efectivo en el subespacio de estados fundamentales (indicado por el subíndice  $g$ ) para un par (indicado por el superíndice 1), y regresando a la representación de Schrödinger, tenemos el Hamiltoniano final:

$$\hat{H}_g^{(1)} = \sum_{j=1}^S \left( -\frac{J^2}{2U_0} \right) (|j+1 j+1\rangle \langle j j| + |j j\rangle \langle j+1 j+1|) - \sum_{j=1}^S \left( \frac{J^2}{U_0} + U_0 \right) |j j\rangle \langle j j|. \tag{3.23}$$

### 3.2.2. N pares

Ahora nos concentraremos en encontrar el Hamiltoniano efectivo para el caso de tener  $N$  pares distribuidos en  $S$  sitios. El estado fundamental en este caso consiste en no tener ningún par desarmado. Por lo tanto, escribimos

$$|\psi_g\rangle = \sum_{j_1 < j_2 < \dots < j_N} \left( \bigotimes_{n=1}^N |j_n j_n\rangle \right) \tag{3.24}$$

$$P_g = \sum_{j_1 < j_2 < \dots < j_N} \left( \bigotimes_{n=1}^N |j_n j_n\rangle \langle j_n j_n| \right). \tag{3.25}$$

La cuenta es similar a la de un par. Primero escribimos lo siguiente:

$$\hat{U}_g = e^{-it\hat{H}_0/\hbar} = P_g e^{-itE_g/\hbar} + P_e e^{itE_e/\hbar} = P_g e^{itNU_0/\hbar} + P_e e^{it(N-1)U_0/\hbar} \tag{3.26}$$

donde  $P_g$  es el proyector sobre el estado fundamental del sistema con energía  $-NU_0$ , es decir, los  $N$  pares unidos, y  $P_e$  es el proyector sobre el primer estado excitado que consiste en  $N-1$  pares unidos con energía  $-(N-1)U_0$  y un par separado que aporta energía 0.

### 3.2.2.1. Primer orden

Repitiendo la cuenta de la misma forma que antes, llegamos nuevamente a la expresión 3.15. Si recordamos la cuenta auxiliar, esta vez tenemos que el operador  $\hat{V}$  actuando sobre  $P_g$  lleva un estado donde todos los pares están juntos a un estado donde sólo un par está separado, es decir, al subespacio  $P_e$ . Por lo tanto, se sigue cumpliendo que  $P_g \hat{V} P_g = 0$ . Con el mismo razonamiento que para un solo par, nos encontramos con que todos los términos de 3.15 son nulos, por lo tanto la contribución a primer orden en este caso también es cero.

### 3.2.2.2. Segundo orden

Siguiendo el mismo procedimiento que para el caso de un par, recuperamos la expresión 3.19 para el caso actual.

Además, debido a que en este caso entra en juego la estadística de fermiones y bosones, para llegar a la expresión final debemos usar algunas otras herramientas, como las relaciones de anticonmutación para fermiones [23]

$$\begin{aligned} \{\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger\} &= \delta_{kl} \\ \{\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger\} &= 0 \\ \{\hat{a}_k, \hat{a}_l\} &= 0, \end{aligned} \quad (3.27)$$

que son análogas para el fermión  $b$ . Estas dan cuenta del principio de exclusión de Pauli, que indica que no podremos tener dos fermiones del mismo tipo en el mismo estado cuántico.

Usamos también los operadores número

$$\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j = \hat{n}_j^{(a)} \quad (3.28)$$

$$\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j = \hat{n}_j^{(b)}, \quad (3.29)$$

e identificamos el operador número del par de partículas  $\hat{n}_j$ , que es de la forma

$$\hat{d}_j^\dagger \hat{d}_j = \hat{n}_j \quad \text{con} \quad \hat{a}_j^\dagger \hat{b}_j^\dagger = \hat{d}_j^\dagger \quad (3.30)$$

y que cumple

$$\hat{n}_j^{(a)} + \hat{n}_j^{(b)} = 2\hat{n}_j \quad (3.31)$$

y

$$\hat{n}_j^{(a)} \hat{n}_{j+1}^{(a)} + \hat{n}_j^{(b)} \hat{n}_{j+1}^{(b)} = 2\hat{n}_j \hat{n}_{j+1}. \quad (3.32)$$

El operador creación (aniquilación) de un par  $\hat{d}_j^\dagger$  ( $\hat{d}_j$ ) satisface las propiedades algebraicas de un operador de bosones *hard-core* [26], es decir:

$$j \neq i : [\hat{d}_j^\dagger, \hat{d}_i^\dagger] = 0, \quad (3.33)$$

$$(\hat{d}_j^\dagger)^2 = (\hat{d}_j)^2 = 0, \quad \{\hat{d}_j^\dagger, \hat{d}_j\} = 1. \quad (3.34)$$

Esto significa que no podremos tener más de una partícula tipo  $d$  ocupando simultáneamente el mismo estado cuántico, ya que se satisface el principio de exclusión de Pauli en los fermiones que componen el par. Sin embargo, la función de onda de múltiples pares será simétrica ante el intercambio de partículas, ya que el intercambio simultáneo de las partículas tipo  $a$  y las partículas tipo  $b$  que componen los pares, ambas antisimétricas ante el intercambio, compensan el cambio de signo del par en su totalidad.

A partir de ahora, dado que ya no es más necesario mantener la diferencia entre las partículas  $a$  y  $b$ , porque los pares siempre están unidos, la notación a utilizar será  $\hat{a}_j^\dagger \hat{b}_j^\dagger \equiv \hat{d}_j^\dagger$ , entonces tenemos que  $|jj\rangle \equiv |j\rangle$ .

Como antes, resolvemos la integral, dada por 3.21. Nos encontramos con términos oscilatorios y términos lineales en  $t$ , por lo cual identificamos el Hamiltoniano efectivo como lo que acompaña a estos últimos. Regresamos luego a la representación de Schrödinger, usando nuevamente 3.22.

Para escribir claramente el Hamiltoniano final, recordamos para el término diagonal el proyector 3.25, y definimos los siguientes operadores:

$$B_j^- = \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_N} |i_1 i_2 \dots j \dots i_N\rangle \langle i_1 i_2 \dots j+1 \dots i_N| \quad (3.35)$$

$$B_j^+ = \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_N} |i_1 i_2 \dots j+1 \dots i_N\rangle \langle i_1 i_2 \dots j \dots i_N| \quad (3.36)$$

$$N_j N_{j+1} = \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_N} |i_1 i_2 \dots j j+1 \dots i_N\rangle \langle i_1 i_2 \dots j j+1 \dots i_N|. \quad (3.37)$$

Por lo tanto, encontramos

$$\hat{H}_g^{(N)} = -N \left( U_0 + \frac{J^2}{U_0} \right) P_g - \frac{J^2}{2U_0} \sum_{j=1}^S (B_j^- + B_j^+) + \frac{J^2}{U_0} \sum_{j=1}^S N_j N_{j+1}. \quad (3.38)$$

En este caso, la proyección al manifold fundamental del término proporcional a  $J^2$  tiene un término adicional, que es el último término del lado derecho de la ecuación 3.38, proveniente del hecho de que el salto de una partícula a un dado sitio puede estar prohibido si ese sitio ya está ocupado.

Para el caso de un par ( $N = 1$ ),  $\hat{H}_g^{(N)}$  se reduce al Hamiltoniano  $\hat{H}_g^{(1)}$  dado por la ecuación 3.23.

### 3.3. Enfoque de teoría de perturbaciones independiente del tiempo

Corroboraremos ahora que con la teoría de perturbaciones independiente del tiempo obtenemos el mismo resultado que al resolver el Hamiltoniano efectivo.

Recordemos la expresión 3.20:

$$P_g \hat{V}^2 P_g \quad (3.39)$$

con

$$\hat{V} = -\frac{J}{2} \sum_{j=1}^S (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1} + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_{j+1} + H.C.).$$

Junto a los factores que aparecerán al evaluar la integral 3.21 e identificando el término lineal, tenemos

$$\hat{H}_{ef} = -P_g \frac{\hat{V}^2}{U_0} P_g. \quad (3.40)$$

Por otra parte, de la teoría de perturbaciones independiente del tiempo a segundo orden tenemos la expresión 2.38

$$\alpha \langle \psi_j^{(0)} | \hat{H}_1^2 | \psi_j^{(0)} \rangle = E_j^{(2)} \quad (3.41)$$

con  $\alpha = 1/E_j^{(0)} = -1/U_0$ .

Notando que  $\hat{H}_1$  es igual a  $\hat{V}$ , y recordando que  $P_g$  es el proyector sobre el espacio fundamental asociado a los estados  $|\psi_j^{(0)}\rangle$ , inmediatamente vemos que las expresiones 3.40 y 3.41 son iguales.

Por lo tanto, los dos enfoques son totalmente equivalentes.

A modo de resumen, concluimos que para resolver nuestro problema debemos encontrar las funciones de onda que diagonalicen la perturbación al cuadrado del Hamiltoniano original, y con esto, encontrar las correspondientes autoenergías.

Esto se explicará en detalle en el capítulo 4.

## Capítulo 4

# Resolución del Hamiltoniano efectivo

Procederemos a resolver los Hamiltonianos  $\hat{H}_g^{(1)}$  y  $\hat{H}_g^{(N)}$  que hemos encontrado en el capítulo anterior. En este capítulo, los resolveremos de forma exacta cuando sea posible, y de forma numérica cuando no. En el capítulo siguiente, los resolveremos utilizando la teoría de cobosones.

Primero, nos concentraremos en el Hamiltoniano de un par. Este admite una solución analítica [27], por lo cual podremos encontrar de forma exacta el estado fundamental y su correspondiente energía.

Luego, analizaremos el Hamiltoniano de  $N$  pares. Elegiremos valores particulares de  $N$  y de  $S$ , para así escribir la matriz explícita y diagonalizarla según lo indicado en la sección 2.2.3, encontrando sus autovalores y autovectores. Identificar el autovalor más bajo nos permitirá a su vez identificar el autoestado fundamental.

### 4.1. Hamiltoniano de un par

#### 4.1.1. Condiciones periódicas de contorno

El Hamiltoniano de un par se corresponde con el Hamiltoniano para un modelo de *tight binding* unidimensional, que podemos resolver exactamente.

Comenzamos con el caso donde el sistema tiene condiciones periódicas de contorno, es decir, identificamos al sitio  $S + 1$  con el sitio 1. Este está representado gráficamente en la figura 4.1.

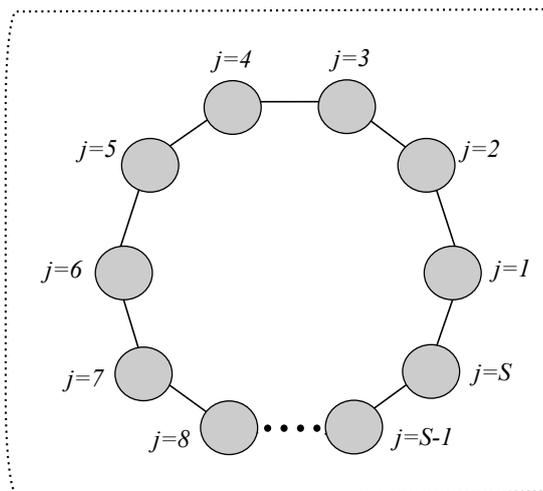


Figura 4.1: Cadena con condiciones de contorno periódicas

Proponemos una solución como transformada de Fourier, donde los autoestados del Hamiltoniano serán de la forma

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{n=1}^S e^{-2\pi ink/S} |n\rangle. \quad (4.1)$$

Recordemos que dado que los pares se mantienen siempre juntos, la notación ahora corresponde a la transformada de Fourier del estado de un único par en el sitio  $n$ , como se indicó en la sección 3.2.2.2.

Ahora debemos resolver el problema de autovalores

$$\hat{H}_g^{(1)} |k\rangle = E_g^{(1)}(k) |k\rangle. \quad (4.2)$$

Introduciendo en el lado izquierdo de esta expresión el estado 4.1 y el Hamiltoniano dado en 3.23, obtenemos:

$$\begin{aligned} \hat{H}_g^{(1)} |k\rangle &= \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{nj} e^{-2\pi ink/S} \left[ \left( \frac{-J^2}{2U_0} \right) (|j+1\rangle \langle j|n\rangle + |j\rangle \langle j+1|n\rangle) - \left( \frac{J^2}{U_0} + U_0 \right) |j\rangle \langle j|n\rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_j e^{-2\pi ikj/S} \left[ \left( \frac{-J^2}{2U_0} \right) (e^{2\pi ik/S} + e^{-2\pi ik/S}) - \left( \frac{J^2}{U_0} + U_0 \right) \right] |j\rangle \\ &= \left[ \left( \frac{-J^2}{2U_0} \right) (e^{2\pi ik/S} + e^{-2\pi ik/S}) - \left( \frac{J^2}{U_0} + U_0 \right) \right] |k\rangle \\ &= \left[ -\frac{2J^2}{U_0} \cos^2 \left( \frac{\pi k}{S} \right) - U_0 \right] |k\rangle, \end{aligned} \quad (4.3)$$

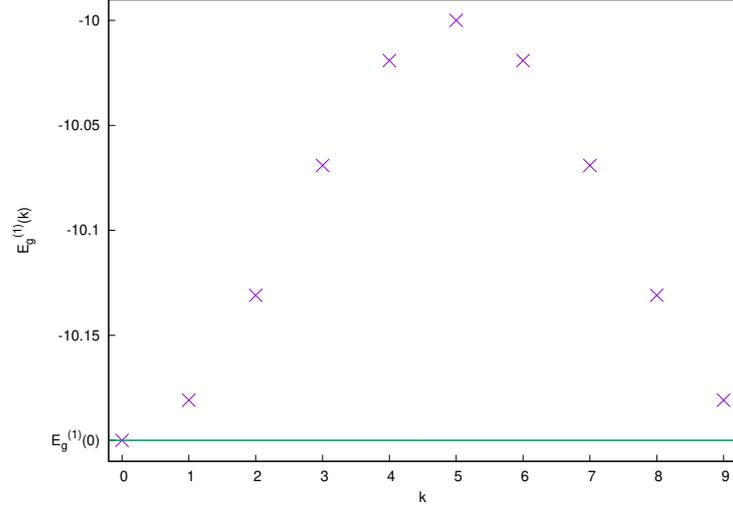
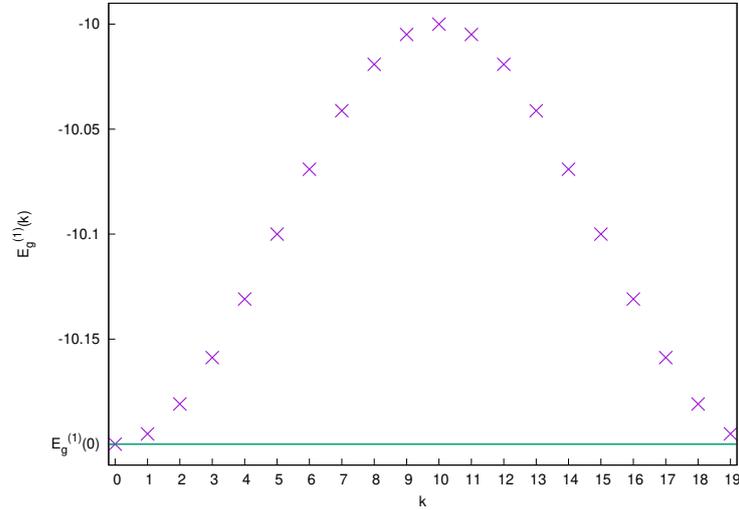
donde en la segunda igualdad se usó ortogonalidad entre los estados de los sitios, en la tercera igualdad se identificó nuevamente el estado  $|k\rangle$ , y en la tercera se trabajó algebraicamente sobre la expresión.

En 4.3 y comparando con 4.2 podemos identificar los autovalores:

$$E_g^{(1)}(k) = -\frac{2J^2}{U_0} \cos^2 \left( \frac{\pi k}{S} \right) - U_0. \quad (4.4)$$

Esto corresponde a diferentes energías para cada valor entero de  $k$ , tal que  $0 < k < S - 1$ . Todos los estados son doblemente degenerados, excepto el estado fundamental, y el de máxima energía en el caso de un número par de sitios, como se ve en las figuras 4.2 y 4.3.

Vemos que el valor más bajo de la energía se da para  $k = 0$ , independientemente del número de sitios. En la figura 4.2 hemos graficado esta energía para  $S = 10$ , y en la figura 4.3 lo hemos hecho para  $S = 20$ , para poder apreciar el comportamiento, con valores  $J = 1$  y  $U_0 = 10$ , tal que satisfacen  $J \ll U_0$ .


 Figura 4.2:  $E_g^{(1)}(k)$  para  $S = 10$ 

 Figura 4.3:  $E_g^{(1)}(k)$  para  $S = 20$ 

Si reemplazamos el valor de  $k = 0$  en 4.1, obtenemos finalmente que el autoestado de menor energía es

$$|k = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{n=1}^S |n\rangle \quad (4.5)$$

con energía

$$E_g^{(1)}(0) = -U_0 - \frac{2J^2}{U_0}. \quad (4.6)$$

Analizando 4.5, notamos que este estado es tal que el par de fermiones tiene la misma probabilidad  $\frac{1}{S}$  de encontrarse en cualquier sitio. Es decir, el par está uniformemente distribuido a lo largo de la cadena.

Veremos en el capítulo 5 que en este caso es posible encontrar una expresión cerrada para el cálculo de  $\chi_N^F$  (necesario para encontrar el ansatz de cobosones).

### 4.1.2. Condiciones abiertas de contorno

Si en vez de utilizar condiciones periódicas de contorno utilizamos condiciones abiertas de contorno, la forma de resolver el problema es identificar dos sitios ficticios  $j = 0$  y  $j = S + 1$  tal como se indica en la figura 4.4

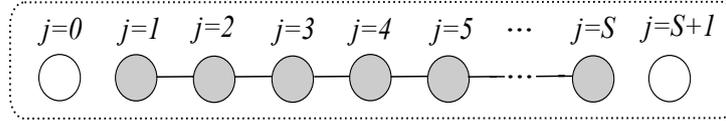


Figura 4.4: Cadena con condiciones de contorno abiertas

y plantear una solución de la forma

$$|k\rangle = \sqrt{\frac{2}{S+1}} \sum_{n=0}^{S+1} \sin\left(\frac{2\pi nk}{S+1}\right) |n\rangle, \quad (4.7)$$

ya que debe satisfacerse que la solución se anule para los sitios ficticios.

Resolvemos ahora la ecuación 4.2 utilizando el estado 4.7. Ésta se resuelve de forma similar al caso de las condiciones periódicas de contorno. Obtenemos así la misma expresión 4.4 para la energía, pero vemos que ahora el valor más bajo de ésta, correspondiente a  $k = 0$ , no es solución, debido al seno presente en el estado 4.7. Por lo tanto el valor más bajo corresponderá a  $k = 1$ . Esto generará una distribución no uniforme de pesos en la combinación de los estados del estado  $|k\rangle$  resultante:

$$|k\rangle = \sqrt{\frac{2}{S+1}} \sum_{n=0}^{S+1} \sin\left(\frac{2\pi n}{S+1}\right) |n\rangle. \quad (4.8)$$

Por lo tanto, encontrar una expresión cerrada para el cálculo de  $\chi_N^F$  se vuelve una tarea más compleja.

### 4.1.3. Análisis del entrelazamiento

Analicemos el entrelazamiento entre las partículas del par, para el estado fundamental con las dos condiciones de contorno analizadas.

El entrelazamiento se puede cuantificar utilizando diferentes medidas, por ejemplo, la entropía de Von Neumann, o la entropía lineal, de la matriz densidad reducida de un fermión o de una partícula. Es más común usar la lineal [28] porque tiene ventajas numéricas y analíticas frente al uso de otras entropías, por ejemplo, no requiere la diagonalización de la matriz  $\rho_a$ , además coincide a menos de constantes multiplicativas y aditivas con medidas de entrelazamiento *monotone* bien definidas, es decir, que no crecen bajo la acción de operaciones locales, que han sido importantes para investigar características del entrelazamiento de estados puros.

En términos de la pureza, la entropía lineal se define como

$$S_L(\rho) = 1 - P(\rho) \quad (4.9)$$

con

$$P(\rho) = \text{Tr}(\rho^2). \quad (4.10)$$

En general, en un sistema compuesto por dos partículas  $a$  y  $b$  que se encuentren en un estado puro  $\psi_{ab}$ , definimos la matriz densidad del sistema como

$$\rho = |\psi_{ab}\rangle \langle \psi_{ab}| \quad (4.11)$$

y a las matrices reducidas de  $a$  y  $b$  como

$$\rho_a = \text{Tr}_b(\rho_{ab}) \quad (4.12)$$

$$\rho_b = \text{Tr}_a(\rho_{ab}). \quad (4.13)$$

Se tiene que si  $S_L(\rho_a) = 0$ , el estado es separable, mientras que si  $S_L(\rho_a) > 0$ , las partículas  $a$  y  $b$  están entrelazadas. Se tiene además  $\text{Tr}(\rho_a^2) = \text{Tr}(\rho_b^2)$ , debido a que los autovalores de  $\rho_a$  y  $\rho_b$  son iguales [24], por lo tanto el análisis es idéntico para la partícula  $b$ .

Para nuestro estado fundamental con condiciones periódicas de contorno, 4.5, tenemos, regresando a la notación que pone en evidencia las dos partículas:

$$\rho_{ab} = \frac{1}{S} \sum_{ij} |jj\rangle \langle ii| \quad (4.14)$$

$$\rho_a = \frac{1}{S} \sum_m |m\rangle \langle m| \quad (4.15)$$

$$\text{Tr}(\rho_a^2) = \frac{1}{S}, \quad (4.16)$$

y por lo tanto

$$S_L(\rho_a) = 1 - \frac{1}{S}, \quad (4.17)$$

es decir, este estado se corresponde con el caso donde los componentes del par están máximamente entrelazados, como mencionamos en la sección 2.4.

En cambio, para el estado fundamental con condiciones abiertas de contorno, 4.8, tenemos:

$$\rho_{ab} = \frac{2}{S+1} \sum_{ij} \text{sen} \left( \frac{2\pi i}{S+1} \right) \left( \frac{2\pi j}{S+1} \right) |jj\rangle \langle ii|, \quad (4.18)$$

$$\rho_a = \frac{2}{S+1} \sum_m \text{sen}^2 \left( \frac{2\pi m}{S+1} \right) |m\rangle \langle m|, \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho_a^2) &= \left( \frac{2}{S+1} \right)^2 \sum_m \text{sen}^4 \left( \frac{2\pi m}{S+1} \right) \\ &= \left( \frac{2}{S+1} \right)^2 \frac{3(S+1)}{8}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

y por lo tanto tendremos

$$S_L(\rho_a) = 1 - \left( \frac{2}{S+1} \right)^2 \frac{3(S+1)}{8}. \quad (4.21)$$

Podemos ver el comportamiento de las expresiones 4.17 y 4.21 en el gráfico 4.5, para distintos valores de  $S$ .

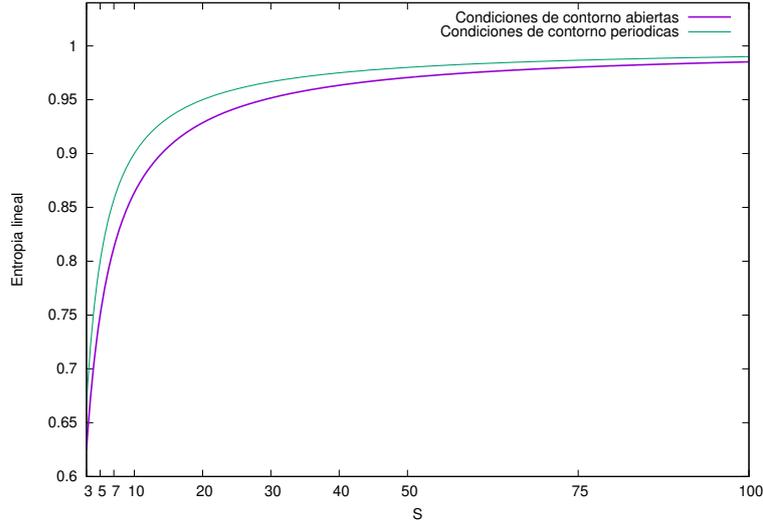


Figura 4.5: Entrelazamiento del estado fundamental de un par

Vemos que el entrelazamiento del par en las condiciones abiertas de contorno es menor al entrelazamiento máximo, pero que cuando  $S \rightarrow \infty$  ambas expresiones tienden a 1 y no habría diferencia entre condiciones de contorno abiertas o periódicas.

En lo que resta del trabajo analizaremos sólo el caso de condiciones periódicas de contorno.

## 4.2. Hamiltoniano de N pares

El Hamiltoniano a resolver es el dado por 3.38. Este puede identificarse con el Hamiltoniano de Hubbard para fermiones sin spin, del cual no se conoce solución exacta para  $N$  pares.

Por lo tanto, el enfoque fue analizar casos particulares: para  $N = 2$  con  $S = 3$ ,  $S = 4$  y  $S = 5$ , y para  $N = 3$  con  $S = 4$ ,  $S = 5$  y  $S = 6$ . Para estos números de pares, los Hamiltonianos toman la forma

$$\hat{H}_g^{(2)} = -2 \left( U_0 + \frac{J^2}{U_0} \right) P_g - \frac{J^2}{2U_0} \sum_{j=1}^S (B_j^- + B_j^+) + \frac{J^2}{U_0} \sum_{j=1}^S N_j N_{j+1} \quad (4.22)$$

y

$$\hat{H}_g^{(3)} = -3 \left( U_0 + \frac{J^2}{U_0} \right) P_g - \frac{J^2}{2U_0} \sum_{j=1}^S (B_j^- + B_j^+) + \frac{J^2}{U_0} \sum_{j=1}^S N_j N_{j+1}. \quad (4.23)$$

Para escribir el Hamiltoniano matricialmente para estos casos, usamos la base de estados de Fock, representada por el vector 2.44, pero utilizando la notación establecida en la sección 2.3. Ejemplificamos con algunos casos de dimensión pequeña:

- Para  $N = 2$ ,  $S = 3$  la base es

$$|1, 1, 0\rangle = |12\rangle, \quad |1, 0, 1\rangle = |13\rangle, \quad |0, 1, 1\rangle = |23\rangle$$

- Para  $N = 2$ ,  $S = 4$  la base es

$$\begin{aligned} |1, 1, 0, 0\rangle = |12\rangle, \quad |1, 0, 1, 0\rangle = |13\rangle, \quad |1, 0, 0, 1\rangle = |14\rangle, \\ |0, 1, 1, 0\rangle = |23\rangle, \quad |0, 1, 0, 1\rangle = |24\rangle, \quad |0, 0, 1, 1\rangle = |34\rangle \end{aligned}$$

- Para  $N = 3$ ,  $S = 4$  la base es

$$|1, 1, 1, 0\rangle = |123\rangle, \quad |1, 1, 0, 1\rangle = |124\rangle, \quad |1, 0, 1, 1\rangle = |134\rangle, \quad |0, 1, 1, 1\rangle = |234\rangle$$

Podemos visualizar gráficamente los distintos valores de la matriz del Hamiltoniano para cada caso, en los siguientes gráficos.

Para  $N = 2$ , tenemos los gráficos 4.6, 4.7 y 4.8. Hemos incluido el gráfico 4.9 que representa el Hamiltoniano del caso  $S = 10$  para ejemplificar cómo es la apariencia del Hamiltoniano para valores cada vez más grandes de  $S$ .

Los elementos de la diagonal corresponden a los valores  $-2(U_0 + \frac{J^2}{U_0}) + \frac{J^2}{U_0}$  (color verde) y  $-2(U_0 + \frac{J^2}{U_0})$  (naranja), mientras que los elementos fuera de la diagonal son  $-\frac{J^2}{2U_0}$  (violeta) o nulos (blanco).

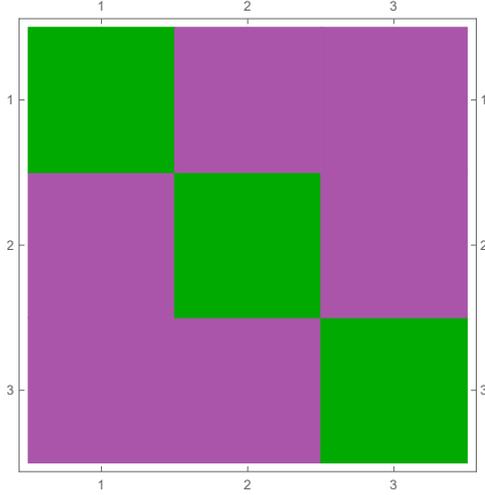


Figura 4.6:  $N=2, S=3$

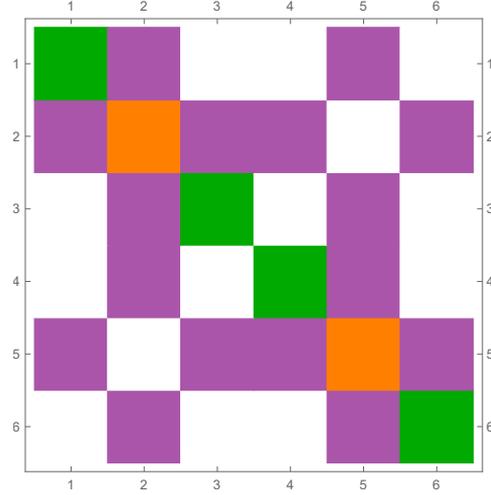


Figura 4.7:  $N=2, S=4$

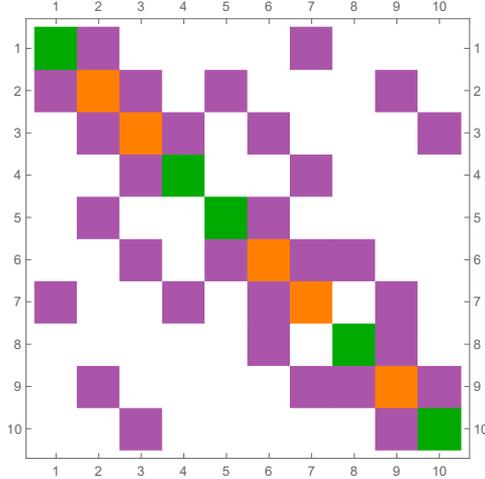


Figura 4.8:  $N=2, S=5$

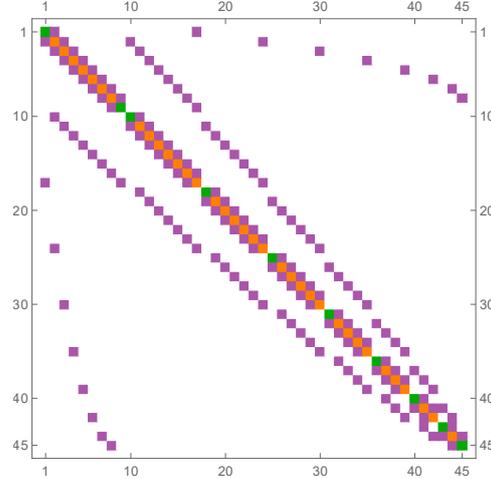


Figura 4.9:  $N=2, S=10$

En cambio, para  $N = 3$ , los casos a trabajar son los representados en las figuras 4.10, 4.11 y 4.12, mientras que nuevamente, para ejemplificar la forma de la matriz al aumentar  $S$ , incluimos la figura 4.13. En este caso, los elementos de la diagonal se corresponden a  $-3(U_0 + \frac{J^2}{U_0}) + 2\frac{J^2}{U_0}$  (verde),  $-3(U_0 + \frac{J^2}{U_0}) + \frac{J^2}{U_0}$  (naranja), y  $-3(U_0 + \frac{J^2}{U_0})$  (azul), mientras que los elementos fuera de la diagonal son nulos (blanco) o valen  $-\frac{J^2}{2U_0}$  (violeta).

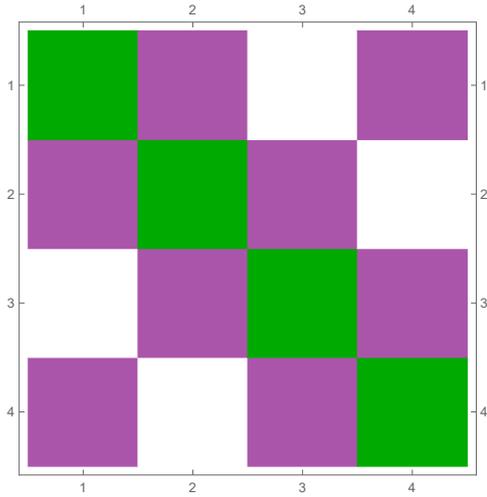


Figura 4.10:  $N=3, S=4$

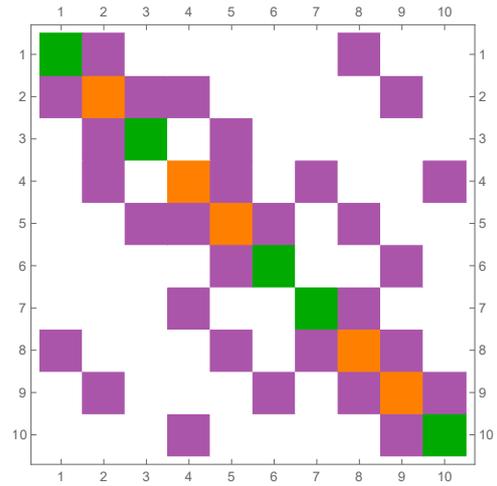


Figura 4.11:  $N=3, S=5$

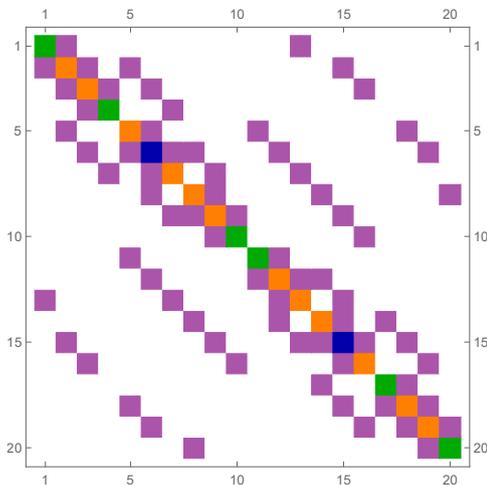


Figura 4.12:  $N=3, S=6$

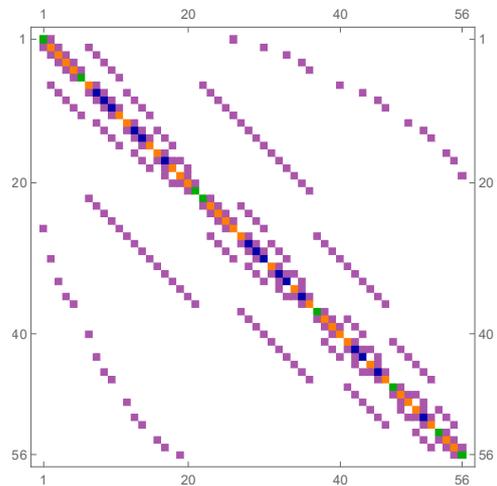


Figura 4.13:  $N=3, S=8$

Se procedió a la diagonalización de cada Hamiltoniano usando *Mathematica*. Obtuvimos así los autovalores y autovectores, e identificando el menor autovalor y su autovector correspondiente, pudimos obtener el estado fundamental.

En los casos de menor dimensión fue posible encontrar una expresión explícita para la energía del estado fundamental, en términos de las constantes del problema, mientras que en para dimensiones mayores fue necesario elegir valores numéricos para  $J$  y  $U_0$  para que el programa sea capaz de procesar el resultado final. Por lo tanto, a modo de comparación, estos valores numéricos se usaron también para calcular las energías en todos los casos. Los valores elegidos fueron nuevamente  $J = 1$ ,  $U_0 = 10$ , que cumplen la relación  $U_0 \gg J$ .

Los resultados obtenidos fueron:

$$N = 2, S = 3: \quad E_g^{(2)} = -2 \frac{J^2}{U_0} - 2U_0 = -20,2$$

$$|G\rangle_{N=2} = \frac{1}{\sqrt{3}} (|12\rangle + |13\rangle + |23\rangle)$$

$$N = 2, S = 4: \quad E_g^{(2)} = -3 \frac{J^2}{U_0} - 2U_0 = -20,3$$

$$|G\rangle_{N=2} = \frac{1}{\sqrt{12}} (|12\rangle + 2|13\rangle + |14\rangle + |23\rangle + 2|24\rangle + |34\rangle)$$

$$N = 2, S = 5: \quad E_g^{(2)} = -20,34142$$

$$|G\rangle_{N=2} = a|12\rangle + b|13\rangle + b|14\rangle + a|15\rangle + a|23\rangle + b|24\rangle + b|25\rangle + a|34\rangle + \dots \\ \dots + b|35\rangle + a|45\rangle$$

$$(\text{con } a = 0,171141\dots, b = 0,413171\dots, \text{ tal que } \langle \psi_g^{(2)} | \psi_g^{(2)} \rangle = 1)$$

$$N = 3, S = 4: \quad E_g^{(3)} = -2 \frac{J^2}{U_0} - 3U_0 = -30,2$$

$$|G\rangle_{N=3} = \frac{1}{2} (|123\rangle + |124\rangle + |14\rangle + |134\rangle + |234\rangle)$$

$$N = 3, S = 5: \quad E_g^{(3)} = -30,3414$$

$$|G\rangle_{N=3} = a|123\rangle + b|124\rangle + a|125\rangle + b|134\rangle + b|135\rangle + a|145\rangle + a|234\rangle + \dots \\ \dots + b|235\rangle + b|245\rangle + a|345\rangle$$

$$(\text{con } a = 0,171141\dots, b = 0,413171\dots, \text{ tal que } \langle \psi_g^{(3)} | \psi_g^{(3)} \rangle = 1)$$

$$N = 3, S = 6: \quad E_g^{(3)} = -30,4303$$

$$|G\rangle_{N=3} = a|123\rangle + b|124\rangle + b|125\rangle + a|126\rangle + b|134\rangle + c|135\rangle + b|136\rangle + \dots \\ \dots + b|145\rangle + b|146\rangle + a|156\rangle + a|234\rangle + b|235\rangle + b|236\rangle + \dots \\ \dots + b|245\rangle + c|246\rangle + b|256\rangle + a|345\rangle + a|346\rangle + b|356\rangle + a|456\rangle$$

$$(\text{con } a = 0,0629206\dots, b = 0,207813\dots, c = 0,478546\dots \text{ tal que } \langle \psi_g^{(3)} | \psi_g^{(3)} \rangle = 1)$$

Notamos que para el mismo  $N$ , la energía disminuye cuando el número de sitios aumenta.

Vemos que para  $N = 2$  los estados fundamentales resultaron ser aquellos en los que el mayor peso está en los estados donde los dos pares no se encuentran uno en el sitio contiguo al otro, si no separados por por lo menos un sitio sin ocupar. La excepción es el caso  $S = 3$  que sí o sí tiene sus dos pares contiguos sin importar el sitio en el que se encuentren, por lo tanto en este caso se encontró una distribución uniforme de peso entre las diferentes ocupaciones de los dos pares.

Para  $N = 3$  sucede algo similar, los estados fundamentales son aquellos en donde los pares están lo más separados que se pueda entre sí. En el caso de  $S = 4$  nuevamente ocurre que sin importar dónde se encuentren los pares, las condiciones periódicas de contorno indicarán que siempre están los tres pares en sitios sucesivos, por lo cual en este caso la distribución es uniforme. Para  $S = 6$  tenemos el mayor peso en estados con los pares lo más separados entre sí, peso intermedio para dos pares contiguos y uno separado, y el menor peso para los tres pares ubicados en sitios contiguos.

Podemos apreciar este comportamiento en las figuras de la 4.14 a la 4.20 en donde hemos incluido además casos de dimensión superior que mejor ejemplifican lo dicho anteriormente. Aquí, graficamos el valor absoluto al cuadrado de los coeficientes de cada estado que conforman el estado fundamental. En los gráficos de dimensión superior etiquetamos sólo algunos estados, para que no se superpongan todas las etiquetas del eje.



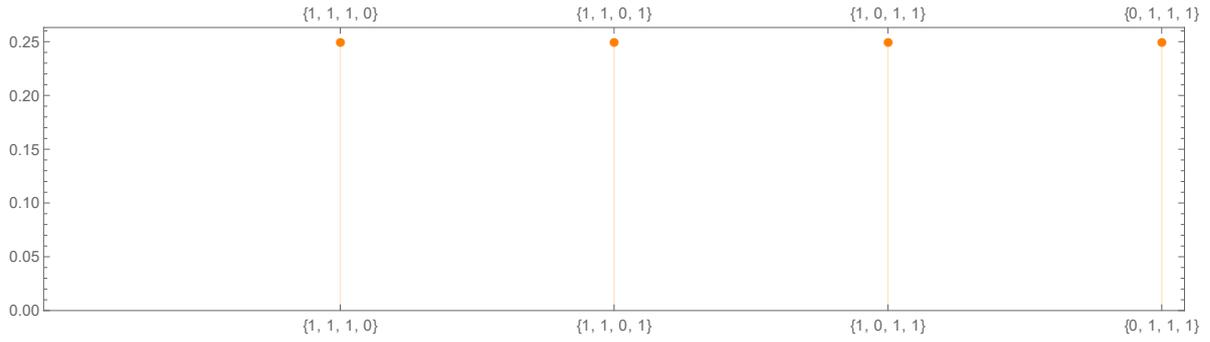


Figura 4.18: Distribución de autoestados para  $N=3, S=4$

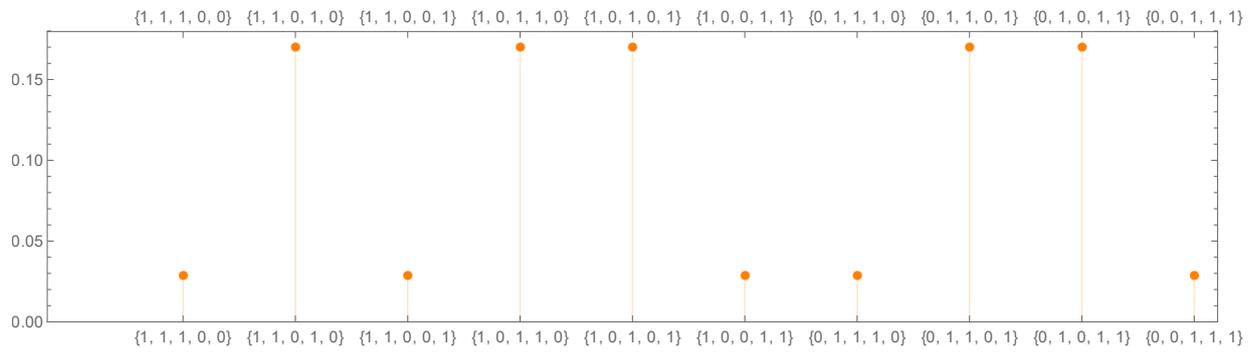


Figura 4.19: Distribución de autoestados para  $N=3, S=5$

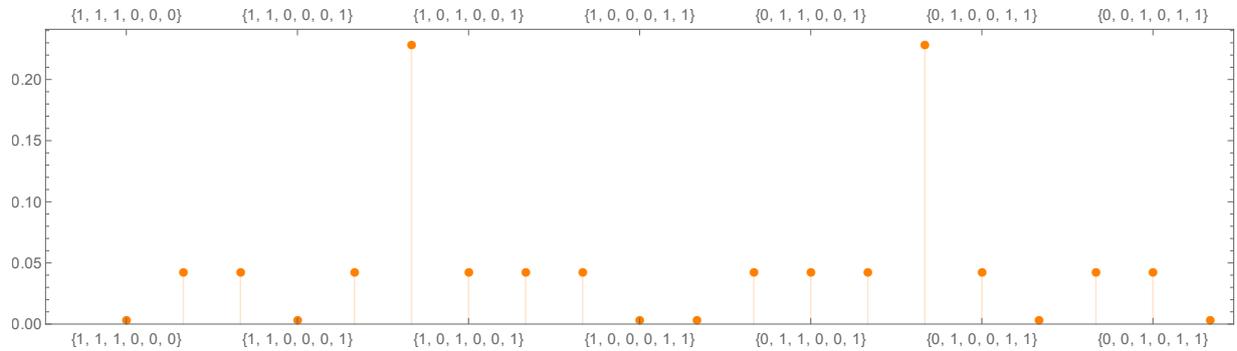


Figura 4.20: Distribución de autoestados para  $N=3, S=6$

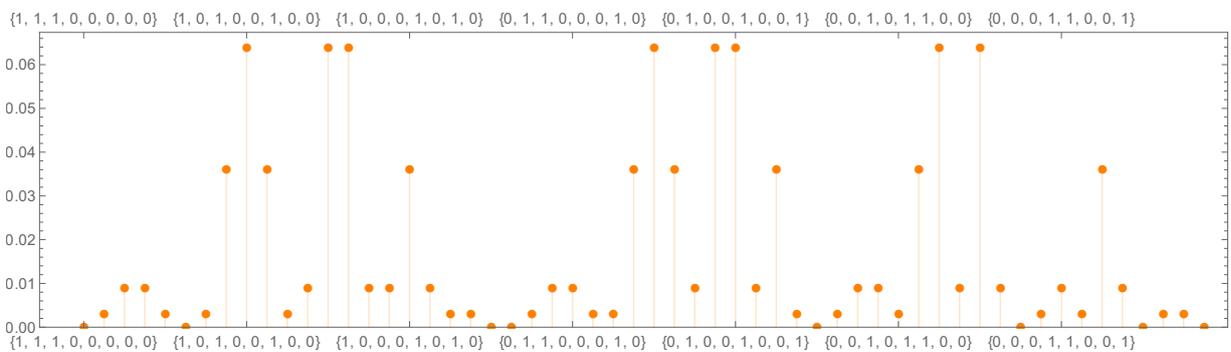


Figura 4.21: Distribución de autoestados para  $N=3, S=8$

## Capítulo 5

# Resolución con ansatz de cobosones

A partir del estado fundamental de un par, que hemos encontrado en la sección 4.1 del capítulo anterior, construiremos un estado de  $N$  pares, según como lo indica la teoría de cobosones. Este ansatz, al que llamaremos  $|N\rangle$ , será usado para calcular una energía aproximada dada por

$$\langle N | \hat{H}_g^{(N)} | N \rangle. \quad (5.1)$$

Luego calcularemos para la energía del estado fundamental para un sistema de cobosones siguiendo una expresión dada por la teoría de cobosones, que veremos en detalle en la sección 5.2.

### 5.1. Ansatz de cobosones y energía aproximada

Recordando lo dicho en la sección 2.4, sabemos que el operador creación de un cobosón tiene la forma

$$\hat{c}^\dagger = \sum_{n=1}^S \sqrt{\lambda_n} \hat{a}_n^\dagger \hat{b}_n^\dagger \quad (5.2)$$

y que a partir de este puede formarse el estado de  $N$  pares, de la forma

$$|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{\chi_N N!}} (\hat{c}^\dagger)^N |0\rangle \quad (5.3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\chi_N N!}} \sum_{j_1 < j_2 < \dots < j_N = 1}^S \sqrt{\lambda_{j_1} \lambda_{j_2} \dots \lambda_{j_N}} \hat{a}_{j_1}^\dagger \hat{b}_{j_1}^\dagger \dots \hat{a}_{j_N}^\dagger \hat{b}_{j_N}^\dagger |0\rangle \quad (5.4)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\chi_N N!}} \sum_{j_1 < j_2 < \dots < j_N = 1}^S \sqrt{\lambda_{j_1} \lambda_{j_2} \dots \lambda_{j_N}} \hat{d}_{j_1}^\dagger \dots \hat{d}_{j_N}^\dagger |0\rangle, \quad (5.5)$$

donde  $\chi_N$  para nuestro caso, que es cobosones compuestos de fermiones, es

$$\chi_N^F = N! \sum_{P_N > P_{N-1} > \dots > P_1} \lambda_{P_1} \lambda_{P_2} \dots \lambda_{P_N}. \quad (5.6)$$

En base a nuestros resultados anteriores podemos armar el estado de  $N$  partículas. Recordemos que habíamos encontrado que el estado fundamental de un par era

$$|c\rangle = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{n=1}^S |n\rangle. \quad (5.7)$$

Es decir, nuestro estado de un par tiene todos los  $\lambda_i$  iguales ente sí, e iguales a  $1/S$ . Como se había adelantado en la sección 2.4, esta distribución de  $\lambda_i$  corresponde al máximo entrelazamiento entre los fermiones que componen el cobosón.

Esta distribución de  $\lambda_i$  permite además un cálculo explícito de  $\chi_N^F$ :

$$\begin{aligned}\chi_N^F &= N! \sum_{P_N > P_{N-1} > \dots > P_1} \lambda_{P_1} \lambda_{P_2} \dots \lambda_{P_N} \\ &= \frac{N!}{S^N} \sum_{P_N > P_{N-1} > \dots > P_1} 1 \\ &= \frac{N!}{S^N} \binom{S}{N},\end{aligned}$$

y por lo tanto, también permite el cálculo de  $|N\rangle$ . Obtenemos finalmente el siguiente resultado:

$$|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{\chi_N^F}} \sqrt{\frac{N!}{S^N}} \sum_{j_1 < j_2 < \dots < j_N = 1}^S \hat{a}_{j_1}^\dagger \hat{b}_{j_1}^\dagger \dots \hat{a}_{j_N}^\dagger \hat{b}_{j_N}^\dagger |0\rangle \quad (5.8)$$

con

$$\chi_N^F = \frac{N!}{S^N} \binom{S}{N}. \quad (5.9)$$

Reemplazando, 5.9 en 5.8 vemos que podemos escribir

$$|N\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{\binom{S}{N}}} \sum_{j_1 < j_2 < \dots < j_N = 1}^S \hat{a}_{j_1}^\dagger \hat{b}_{j_1}^\dagger \dots \hat{a}_{j_N}^\dagger \hat{b}_{j_N}^\dagger |0\rangle \quad (5.10)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\binom{S}{N}}} \sum_{j_1 < j_2 < \dots < j_N = 1}^S \hat{d}_{j_1}^\dagger \dots \hat{d}_{j_N}^\dagger |0\rangle, \quad (5.11)$$

donde hemos agregado el subíndice  $S$  para indicar el número de sitios. Notamos que en este caso, los estados obtenidos para  $N$  pares según el ansatz de cobosones son estados donde los pares están uniformemente distribuidos y cada uno tiene el mismo peso, a diferencia de los autoestados encontrados al diagonalizar el Hamiltoniano, vistos en el capítulo anterior.

Podemos proceder entonces a calcular la energía aproximada  ${}_S\langle N | \hat{H}_g^{(N)} | N \rangle_S$  para cualquier  $N$  y  $S$ .

Primero reescribimos el Hamiltoniano 3.38 para poner en evidencia a los operadores creación, aniquilación, y número presentes:

$$\hat{H}_g^{(N)} = -N \left( U_0 + \frac{J^2}{U_0} \right) - \frac{J^2}{2U_0} \sum_{j=1}^S \left( \hat{d}_{j+1}^\dagger \hat{d}_j + \hat{d}_j^\dagger \hat{d}_{j+1} \right) + \frac{J^2}{U_0} \sum_{j=1}^S \hat{n}_j \hat{n}_{j+1}. \quad (5.12)$$

Debido a que  ${}_S\langle N | N \rangle_S = 1$ , el primer término del Hamiltoniano 5.12 es trivial.

Para los otros términos, usaremos algunas expresiones no triviales que fueron necesarias definir al analizar la acción de los distintos operadores sobre el estado  $|N\rangle$ .

Escribimos

$$\chi_{N-1}^{\{\lambda_j, \lambda_{j+1}\}} = \frac{(N-1)!}{S^{N-1}} \binom{S-2}{N-1} \quad (5.13)$$

como la condición de normalización de cobosones compuestos de fermiones que tiene asociada una distribución uniforme de coeficientes  $\lambda_i$ , a la que le faltan dos coeficientes:  $\lambda_{i=j}$  y  $\lambda_{i=j+1}$ , es decir, con dos sitios menos disponibles, para  $N-1$  pares, y

$$\chi_{N-2}^{\{\lambda_j, \lambda_{j+1}\}} = \frac{(N-2)!}{S^{N-2}} \binom{S-2}{N-2} \quad (5.14)$$

de la misma forma, pero para  $N - 2$  pares.

Con esto podemos escribir para el segundo término del Hamiltoniano

$$\hat{d}_j |N\rangle = \frac{N\sqrt{\lambda_j}}{\sqrt{\chi_N N!}} \sum_{j_1 < j_2 < \dots < j_{N-1}=1}^S \sqrt{\lambda_{j_1} \lambda_{j_2} \dots \lambda_{j_{N-1}}} \hat{d}_{j_1}^\dagger \dots \hat{d}_{j_{N-1}}^\dagger |0\rangle \quad (5.15)$$

y

$$\hat{d}_{j+1} |N\rangle = \frac{N\sqrt{\lambda_{j+1}}}{\sqrt{\chi_N N!}} \sum_{j_1 < j_2 < \dots < j_{N-1}=1}^S \sqrt{\lambda_{j_1} \lambda_{j_2} \dots \lambda_{j_{N-1}}} \hat{d}_{j_1}^\dagger \dots \hat{d}_{j_{N-1}}^\dagger |0\rangle, \quad (5.16)$$

y por lo tanto, usando además que  $\langle N | \hat{d}_i^\dagger = \hat{d}_i |N\rangle$ , tenemos que

$$\begin{aligned} \langle N | \hat{d}_{j+1}^\dagger \hat{d}_j |N\rangle &= \langle N | \hat{d}_j^\dagger \hat{d}_{j+1} |N\rangle = \frac{N^2 \sqrt{\lambda_{j+1} \lambda_j}}{\sqrt{\chi_N N!}} \sum_{\substack{j_1 < \dots < j_{N-1} \\ i_1 < \dots < i_{N-1}}}^S \sqrt{\lambda_{j_1} \dots \lambda_{j_{N-1}} \lambda_{i_1} \dots \lambda_{i_{N-1}}} \times \\ &\quad \times \langle 0 | \hat{d}_{j_1}^\dagger \dots \hat{d}_{j_{N-1}}^\dagger \hat{d}_{i_1}^\dagger \dots \hat{d}_{i_{N-1}}^\dagger |0\rangle \\ &= \frac{N^2 \sqrt{\lambda_{j+1} \lambda_j}}{\sqrt{\chi_N N!}} \chi_{N-1}^{\{\lambda_j, \lambda_{j+1}\}} (N-1)!, \end{aligned} \quad (5.17)$$

donde en la última igualdad hemos usado el producto interno  $\langle N-1 | N-1\rangle = 1$  con el estado  $|N-1\rangle$  normalizado con la distribución de  $\lambda_i$  correspondiente.

Análogamente encontramos para el tercer término del Hamiltoniano

$$\langle N | \hat{n}_j \hat{n}_{j+1} |N\rangle = \frac{N^2 (N-1)^2 \lambda_{j+1} \lambda_j}{\sqrt{\chi_N N!}} \chi_{N-2}^{\{\lambda_j, \lambda_{j+1}\}} (N-2)! \quad (5.18)$$

y finalmente, usando 5.9, 5.13, 5.14, y reemplazando el valor correspondiente  $\lambda_i = 1/S$ , obtenemos luego de un poco de álgebra la siguiente expresión general:

$${}_S \langle N | \hat{H}_g^{(N)} |N\rangle_S = -N \left( U_0 + \frac{2J^2}{U_0} \right) + \frac{2J^2}{U_0} \frac{N(N-1)}{S-1}. \quad (5.19)$$

Calculamos ahora los estados de  $N$  cobosones para los mismos casos analizados en la sección 4.2, y su energía aproximada. Además, nuevamente usamos los valores  $J = 1$  y  $U_0 = 10$  para poder obtener valores numéricos para la energía. Los resultados son entonces los siguientes:

$$N = 2, S = 3 : \quad |2\rangle_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} (|12\rangle + |13\rangle + |23\rangle)$$

$${}_3 \langle 2 | \hat{H}_g^{(2)} |2\rangle_3 = -2U_0 - 2 \frac{J^2}{U_0} = -20,2$$

$$N = 2, S = 4 : \quad |2\rangle_4 = \frac{1}{\sqrt{6}} (|12\rangle + |13\rangle + |14\rangle + |23\rangle + |24\rangle + |34\rangle)$$

$${}_4 \langle 2 | \hat{H}_g^{(2)} |2\rangle_4 = -2U_0 - \frac{8}{3} \frac{J^2}{U_0} = -20,26666\dots$$

$$N = 2, S = 5 : \quad |2\rangle_5 = \frac{1}{\sqrt{10}} (|12\rangle + |13\rangle + |14\rangle + |15\rangle + |23\rangle + |24\rangle + |25\rangle + |34\rangle + |35\rangle + |45\rangle)$$

$${}_5 \langle 2 | \hat{H}_g^{(2)} |2\rangle_5 = -2U_0 - 3 \frac{J^2}{U_0} = -20,3$$

$$N = 3, S = 4: \quad |3\rangle_4 = \frac{1}{6} (|123\rangle + |124\rangle + |134\rangle + |234\rangle)$$

$${}_4\langle 3 | \hat{H}_g^{(3)} | 3 \rangle_4 = -3U_0 - 2\frac{J^2}{U_0} = -30,2$$

$$N = 3, S = 5: \quad |3\rangle_5 = \frac{1}{\sqrt{10}} (|123\rangle + |124\rangle + |125\rangle + |134\rangle + |135\rangle + |145\rangle + |243\rangle + |235\rangle + \dots \\ \dots + |245\rangle + |345\rangle)$$

$${}_5\langle 3 | \hat{H}_g^{(3)} | 3 \rangle_5 = -3U_0 - 3\frac{J^2}{U_0} = -30,3$$

$$N = 3, S = 6: \quad |3\rangle_6 = \frac{1}{\sqrt{20}} (|123\rangle + |124\rangle + |125\rangle + |126\rangle + |134\rangle + |135\rangle + |136\rangle + |145\rangle + \dots \\ \dots + |146\rangle + |156\rangle + |234\rangle + |235\rangle + |236\rangle + |245\rangle + |246\rangle + |256\rangle + \dots \\ \dots + |345\rangle + |346\rangle + |356\rangle + |456\rangle)$$

$${}_6\langle 3 | \hat{H}_g^{(3)} | 3 \rangle_6 = -3U_0 - \frac{18}{5}\frac{J^2}{U_0} = -30,36$$

## 5.2. Estimación de la energía del estado fundamental en teoría de cobosones

Calcularemos ahora la energía del estado fundamental del sistema dada por la teoría de cobosones. Ésta puede ser estimada utilizando el ansatz de cobosones [29]. Para esta estimación se asume que el Hamiltoniano del sistema contiene la energía asociada con el estado de cada fermión en forma cuadrática, más términos de interacciones adicionales. En [29] las formas de las interacciones corresponden a un potencial cuártico que preserva el momento. Bajo estos supuestos y condiciones la energía del estado fundamental del sistema dada por la teoría de cobosones toma la siguiente forma [30]:

$$E_g = NE_0 + N(N-1)(\langle \phi_0 | \otimes \langle \phi_0 |)(\hat{X}_a - \hat{I})(\hat{I} \otimes \hat{H}_I)\hat{X}_a(|\phi_0\rangle \otimes |\phi_0\rangle) \quad (5.20)$$

donde se tiene que:

- $|\phi_0\rangle$  es la función de onda del estado fundamental de un par,
- $E_0$  es la energía del estado fundamental de un par,
- $\hat{X}_a$  es un operador que actúa sobre dos pares intercambiando la partícula  $a$  de ambos,
- $\hat{H}_I$  es el Hamiltoniano de interacción (veremos que en nuestro caso corresponde a  $\hat{H}_0$ ) pero actuando sobre el espacio de un solo par.

Como dijimos anteriormente, esta fórmula se basa en un Hamiltoniano cuadrático para cada tipo de fermión junto con un término de interacción entre los fermiones de diferentes tipos que es cuártico. El Hamiltoniano efectivo para el subespacio fundamental de nuestro problema 3.38 no exhibe estas características, puesto que aparecen términos de interacción que involucran dos pares (es decir presenta interacciones a cuatro cuerpos). Para poder evaluar la fórmula de la energía 5.20 vamos a volver al Hamiltoniano completo inicial 3.1. En este caso, el Hamiltoniano de interacción  $\hat{H}_0$  es cuadrático en cada especie ( $\hat{H}$  presenta interacciones a dos cuerpos).

Si tomamos el ansatz de cobosones del estado fundamental a orden cero en  $J$ , 5.7, y utilizamos el Hamiltoniano inicial que exhibe las propiedades adecuadas, encontramos una energía a orden cero

en  $J$  y por lo tanto perdemos todas las correcciones. Para calcular las correcciones de la energía será necesario tomar el estado fundamental a segundo orden en  $J$ , por lo que utilizaremos la teoría de perturbaciones presentada en la sección 2.2, que además nos servirá para corroborar los resultados obtenidos anteriormente.

Recordando las expresiones 2.33 y 2.39 para las correcciones de la función de onda a primer y segundo orden respectivamente, obtenemos:

$$\begin{aligned} |\psi_j^{(1)}\rangle &= \frac{J}{U_0} \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{\substack{k \neq j \\ j}} \langle \psi_k^{(0)} | (|jj+1\rangle + |j+1j\rangle) | \psi_k^{(0)} \rangle \\ |\psi_j^{(1)}\rangle &= \frac{J}{U_0} \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{j=1}^S (|jj+1\rangle + |j+1j\rangle), \end{aligned} \quad (5.21)$$

debido a la forma 3.9 de los estados del subespacio donde los pares se encuentran separados.

Análogamente

$$\begin{aligned} |\psi_j^{(2)}\rangle &= \frac{J^2}{U_0^2} \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{\substack{k \neq j \\ j}} \langle \psi_k^{(0)} | (|jj+2\rangle + |j+2j\rangle + 2|jj\rangle) | \psi_k^{(0)} \rangle \\ |\psi_j^{(2)}\rangle &= \frac{J^2}{U_0^2} \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{j=1}^S (|jj+2\rangle + |j+2j\rangle), \end{aligned} \quad (5.22)$$

donde en la segunda igualdad notamos que el término  $|jj\rangle$  no contribuye debido a la proyección sobre el subespacio ortogonal.

Renormalizando la función de onda completa según lo visto en la sección 2.2.4, y conservando los términos hasta orden  $\frac{J^2}{U_0^2}$ , obtenemos:

$$|\phi_0\rangle = \left(1 - \frac{J^2}{U_0^2}\right) \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{j=1}^S |jj\rangle + \frac{J}{U_0} \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{j=1}^S (|jj+1\rangle + |j+1j\rangle) + \frac{J^2}{U_0^2} \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{j=1}^S (|jj+2\rangle + |j+2j\rangle). \quad (5.23)$$

La forma del estado fundamental a órdenes mayores ya no es tan simple porque aparecen contribuciones no nulas de los estados de subespacios excitados tal que los coeficientes de Schmidt ya no son todos iguales.

Con esta expresión podemos calcular ahora la energía 5.20 según la teoría de cobosones. Al hacer la cuenta hay que ser cuidadosos con qué términos contribuyen y cuales no, ya que aparecen muchos términos provenientes del producto de las dos funciones de onda de un par. Debemos mantener siempre los términos hasta orden  $\frac{J^2}{U_0^2}$ .

Encontramos entonces la expresión

$$E_g = -N \left( U_0 + \frac{2J^2}{U_0} \right) + \frac{2J^2}{U_0} \frac{N(N-1)}{S}. \quad (5.24)$$

Comparándola con la energía aproximada 5.19, vemos que difieren en el denominador. Es decir, va a haber un corrimiento sistemático en donde la energía aproximada para  $S$  sitios se corresponderá con la energía de cobosones para  $S-1$  sitios, pero tenderán al mismo valor para  $S$  grande.

Calculamos entonces la energía del estado fundamental según la teoría de cobosones para cada uno de los casos antes mencionados:

$$N = 2, S = 3: E_g = -2U_0 - \frac{8 J^2}{3 U_0} = -20,2666\dots$$

$$N = 2, S = 4: E_g = -2U_0 - 3 \frac{J^2}{U_0} = -20,3$$

$$N = 2, S = 5: E_g = -2U_0 - \frac{16 J^2}{5 U_0} = -20,32$$

$$N = 3, S = 4: E_g = -3U_0 - 3 \frac{J^2}{U_0} = -30,3$$

$$N = 3, S = 5: E_g = -3U_0 - \frac{18 J^2}{5 U_0} = -30,36$$

$$N = 3, S = 6: E_g = -3U_0 - 4 \frac{J^2}{U_0} = -30,4$$

Nuevamente notamos que la energía disminuye al aumentar  $N$ , y para un mismo  $N$ , disminuye al aumentar  $S$ . En el capítulo 6 apreciaremos mejor este comportamiento al graficarla comparativamente junto a las otras energías calculadas.

# Capítulo 6

## Comparación de resultados

### 6.1. Energías

Ahora, efectuamos las comparaciones entre las energías para el estado fundamental obtenidas por la teoría de perturbaciones y por la teoría de cobosones.

$N = 2, S = 3 :$	$E_g^{(2)} = -20,2$	${}_3\langle 2   \hat{H}_g^{(2)}   2 \rangle_3 = -20,2$	$E_g = -20,26666\dots$
$N = 2, S = 4 :$	$E_g^{(2)} = -20,3$	${}_4\langle 2   \hat{H}_g^{(2)}   2 \rangle_4 = -20,26666\dots$	$E_g = -20,3$
$N = 2, S = 5 :$	$E_g^{(2)} = -20,34142$	${}_5\langle 2   \hat{H}_g^{(2)}   2 \rangle_5 = -20,3$	$E_g = -20,32$
$N = 3, S = 4 :$	$E_g^{(3)} = -30,2$	${}_4\langle 3   \hat{H}_g^{(3)}   3 \rangle_4 = -30,2$	$E_g = -30,3$
$N = 3, S = 5 :$	$E_g^{(3)} = -30,3414$	${}_5\langle 3   \hat{H}_g^{(3)}   3 \rangle_5 = -30,3$	$E_g = -30,36$
$N = 3, S = 6 :$	$E_g^{(3)} = -30,4303$	${}_6\langle 3   \hat{H}_g^{(3)}   3 \rangle_6 = -30,36$	$E_g = -30,4$

Podemos resumir estas expresiones en el gráfico 6.1 para  $N = 2$  y en el gráfico 6.2 para  $N = 3$

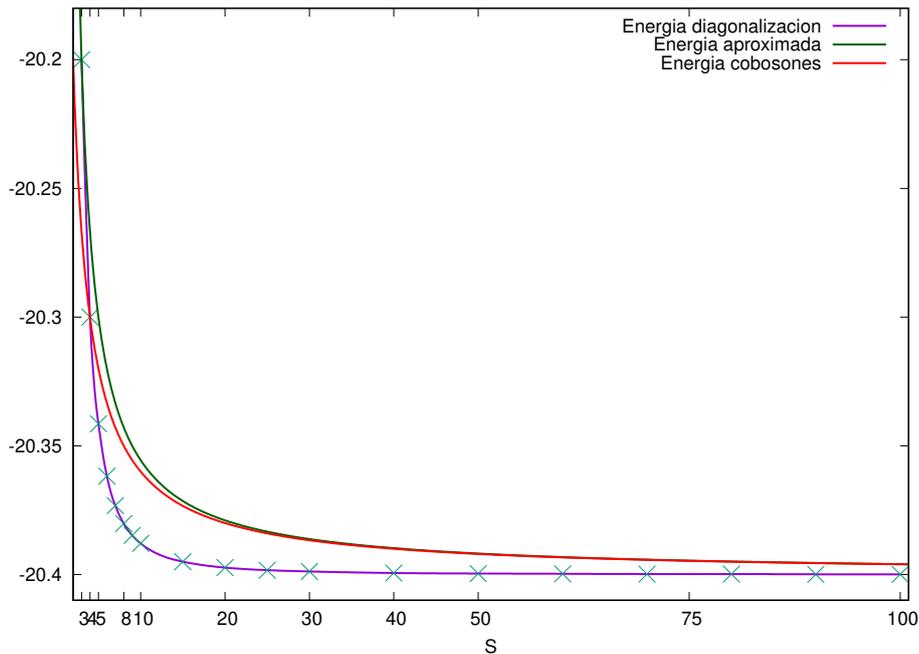
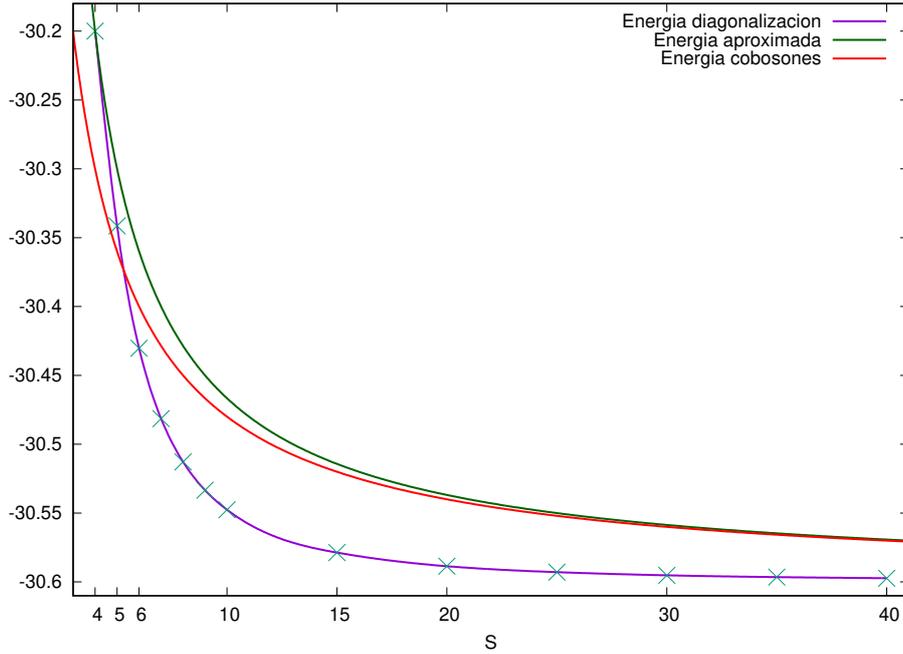


Figura 6.1: Energías para  $N = 2$


 Figura 6.2: Energías para  $N = 3$ 

Vemos que para  $S$  grande, la diferencia entre la energía de la teoría de cobosones y la energía de diagonalización exacta disminuye. Para  $N = 2$ , el error porcentual entre estas energías para  $S = 100$  es de un 0,02%. Para  $N = 3$  es de un 0,09% para  $S = 40$ .

## 6.2. Fidelidad

La fidelidad es una medida de distancia entre estados cuánticos que adquiere gran importancia cuando se utiliza para calcular distancia entre estados mezcla. Para el caso de este trabajo donde debemos comparar similitudes entre estados puros obtenidos por mecanismos distintos, la fidelidad es un criterio de comparación apropiado y simple, ya que se reduce al solapamiento entre ambos estados. Por lo tanto, para dos estados puros  $|\psi\rangle$  y  $|\phi\rangle$ , podemos definirla como [24]:

$$F(|\psi\rangle, |\phi\rangle) = |\langle\psi|\phi\rangle|^2. \quad (6.1)$$

En el gráfico 6.3 podemos ver el comportamiento de la fidelidad para valores cada vez más grandes de  $S$  para  $N = 2$ , mientras que en el gráfico 6.4 presentamos la misma información para  $N = 3$ .

Notamos que en ambos casos la fidelidad disminuye rápidamente al aumentar  $S$  en tan solo una unidad cuando los valores son más bajos, para luego comenzar a estabilizarse para los valores más altos. Además, para  $N = 3$  los valores de la fidelidad son mucho menores que para  $N = 2$ .

El error porcentual entre el valor esperado de la fidelidad  $F = 1$  y los valores que obtiene para  $S$  creciente es del 19% para  $N = 2$  y del 39% para  $N = 3$ .

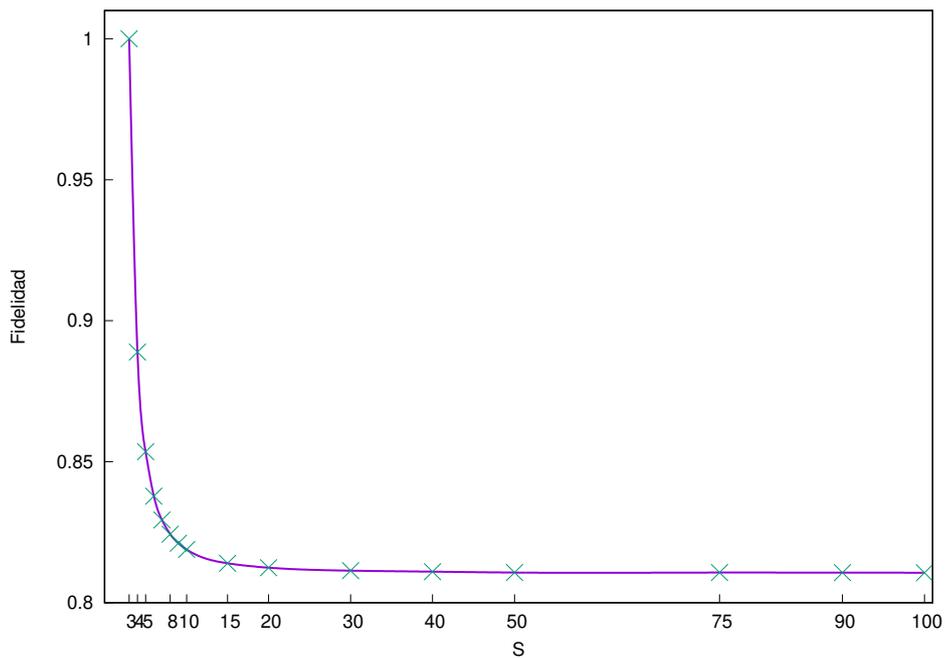


Figura 6.3: Fidelidad para N=2

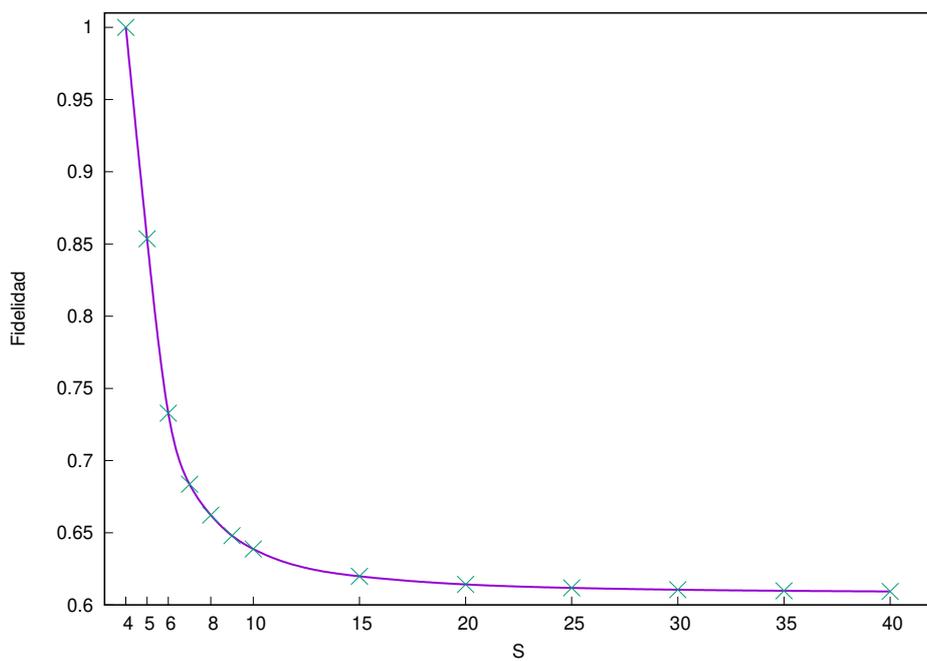


Figura 6.4: Fidelidad para N=3

## Capítulo 7

# Bethe ansatz: solución analítica exacta para dos pares

En este capítulo analizaremos una solución exacta [31] para un Hamiltoniano de Heisenberg para spines. Existe un método para encontrar los autovalores y autovectores exactos de este modelo en una dimensión, conocido como *Bethe ansatz*. Diversos modelos de muchas partículas pueden resolverse con diferentes variaciones de este ansatz, que presenta algunas ventajas frente a la diagonalización directa, como la caracterización de los autovectores con números cuánticos que dependen de sus características físicas específicas, y que en muchos casos podemos evaluar los autovalores y sus propiedades físicas en el límite termodinámico [31].

Aunque el modelo físico del que deriva el ansatz de Bethe es muy distinto al de este trabajo, mapeando el Hamiltoniano 3.38 a un Hamiltoniano de spines podremos usar las soluciones conocidas dadas en [31] para aplicarlas a nuestro problema y comparar con los resultados obtenidos para el caso de dos pares.

El modelo de Heisenberg para spines  $\hat{S}_n = (\hat{S}_n^x, \hat{S}_n^y, \hat{S}_n^z)$  con número cuántico  $s = 1/2$ , en una cadena unidimensional de  $S$  sitios y condiciones de contorno periódicas está dado por

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\tilde{J} \sum_{n=1}^S \hat{S}_n \hat{S}_{n+1} \\ &= -\tilde{J} \sum_{n=1}^S \left( \frac{1}{2} (\hat{S}_n^+ \hat{S}_{n+1}^- + \hat{S}_n^- \hat{S}_{n+1}^+) + \hat{S}_n^z \hat{S}_{n+1}^z \right),\end{aligned}\quad (7.1)$$

donde  $\hat{S}_n^\pm = \hat{S}_n^x \pm i\hat{S}_n^y$  son operadores *spin-flip* tal que  $S^- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$  y  $S^+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$ .

Recordamos además nuestro Hamiltoniano escrito en término de operadores, según la expresión 5.12, y para el caso de dos pares:

$$\hat{H}_g^{(2)} = -2 \left( U_0 + \frac{J^2}{U_0} \right) - \frac{J^2}{2U_0} \sum_{j=1}^S (\hat{d}_{j+1}^\dagger \hat{d}_j + \hat{d}_j^\dagger \hat{d}_{j+1}) + \frac{J^2}{U_0} \sum_{j=1}^S \hat{n}_j \hat{n}_{j+1}. \quad (7.2)$$

En la siguiente sección veremos cómo mapear 7.2 para obtener 7.1.

### 7.1. Transformaciones de Jordan-Wigner

Las transformaciones de Jordan-Wigner para mapear operadores de creación y aniquilación de fermiones a operadores de spin están dadas por [32]

$$\hat{S}_j^z = \hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j - \frac{1}{2} \quad (7.3)$$

$$\hat{S}_j^+ = \hat{f}_j^\dagger e^{i\pi \sum_{l < j} n_l} \quad (7.4)$$

$$\hat{S}_j^- = \hat{f}_j e^{-i\pi \sum_{l < j} n_l}, \quad (7.5)$$

donde  $n_l$  es el operador número de fermiones en el sitio  $l$ , y la fase aparece debido al hecho que los operadores de spin en diferentes sitios conmutan pero los operadores de fermiones anticonmutan.

Por lo tanto, para nuestro caso, donde nuestros operadores creación y aniquilación de un par se comportan como bosones *hard-core*, con propiedades algebraicas idénticas a la de los operadores de spines 1/2, podemos identificar los operadores  $\hat{f}_j^\dagger$  ( $\hat{f}_j$ ) con los operadores  $\hat{d}_j^\dagger$  ( $\hat{d}_j$ ) y usar de forma directa las transformaciones sin las fases:

$$\hat{S}_j^z = \hat{d}_j^\dagger \hat{d}_j - \frac{1}{2} \quad (7.6)$$

$$\hat{S}_j^+ = \hat{d}_j^\dagger \quad (7.7)$$

$$\hat{S}_j^- = \hat{d}_j. \quad (7.8)$$

De esta forma, el Hamiltoniano 7.2 toma la forma

$$\hat{H}_g^{(2)} = -2U_0 - \frac{J^2 S}{U_0 4} - \frac{J^2}{2U_0} \sum_j \left( \hat{S}_{j+1}^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_j^+ \hat{S}_{j+1}^- \right) + \frac{J^2}{U_0} \sum_j \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z. \quad (7.9)$$

Notamos que los dos términos del Hamiltoniano que no son constantes poseen distinto signo, mientras que todos los términos del Hamiltoniano de Heisenberg 7.1 poseen el mismo signo. Para poder realizar la comparación apropiadamente, aplicamos una rotación en un ángulo  $\alpha = \pi$  alrededor del eje  $Z$ . Esto se realiza sólo en sitios intercalados, es decir, al rotar en un sitio necesariamente debe haber un sitio vecino donde no se realiza la rotación, por lo cual en principio necesitamos una cadena con  $S$  par, aunque para  $S$  grande se espera que esto no influya. Esta rotación está dada por la operación unitaria  $\hat{R}_z(\alpha) = e^{-i\alpha \hat{S}_z}$ , y teniendo en cuenta cómo transforman los operadores de spin bajo rotaciones [33]:

$$\left[ \hat{R}_z(\alpha) \right]^\dagger \hat{S}^z \hat{R}_z(\alpha) = \hat{S}^z \quad (7.10)$$

$$\left[ \hat{R}_z(\alpha) \right]^\dagger \hat{S}^\pm \hat{R}_z(\alpha) = e^{\pm i\alpha} \hat{S}^\pm \quad (7.11)$$

obtenemos el Hamiltoniano

$$\left[ \hat{R}_z(\alpha) \right]^\dagger \hat{H}_g^{(2)} \hat{R}_z(\alpha) = -2U_0 - \frac{J^2 S}{U_0 4} + \frac{J^2}{2U_0} \sum_j \left( \hat{S}_{j+1}^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_j^+ \hat{S}_{j+1}^- \right) + \frac{J^2}{U_0} \sum_j \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z \quad (7.12)$$

$$= -2U_0 - \frac{J^2}{U_0} \left( H_H + \frac{S}{4} \right) \quad (7.13)$$

donde  $H_H$  corresponde al Hamiltoniano de Heisenberg 7.1 con  $\tilde{J} = 1$ .

## 7.2. Comparación con los resultados exactos

Siguiendo el lineamiento de [31], se plantea una solución de la forma

$$|\psi\rangle = \sum_{1 \leq n_1 < n_2 \leq S}^S a(n_1, n_2) |n_1, n_2\rangle, \quad (7.14)$$

donde  $|n_1, n_2\rangle$  corresponde, en el caso del Hamiltoniano de Heisenberg, a

$$|n_1, n_2\rangle = S_{n_1}^- S_{n_2}^- |\uparrow \cdots \uparrow\rangle = |\uparrow \cdots \downarrow_{n_1} \cdots \downarrow_{n_2} \cdots \uparrow\rangle, \quad (7.15)$$

es decir, un estado donde todos los fermiones tienen spin hacia arriba exceptuando los ubicados en los sitios  $n_1$  y  $n_2$ , que apuntan hacia abajo. En cambio, en nuestro modelo, este estado se corresponde al estado que posee sólo los sitios  $n_1$  y  $n_2$  ocupados con un par de partículas. Podemos utilizar entonces los coeficientes [31] para determinar la ecuación de onda:

$$a(n_1, n_2) = 2 (-1)^{n_1+n_2} \sin \left( \pi \left( \frac{d(n_1, n_2) - 1/2}{S-1} \right) \right) \quad (7.16)$$

donde  $d(n_1, n_2)$  es la distancia entre dos sitios ocupados, tomada módulo  $S$ , de forma tal que la distancia máxima entre dos sitios ocupados sea  $S/2$ .

Al rotar estas soluciones para que sean las soluciones de nuestro hamiltoniano rotado, los coeficientes serán

$$a(n_1, n_2) = 2 \sin \left( \pi \left( \frac{d(n_1, n_2) - 1/2}{S-1} \right) \right) \quad (7.17)$$

y así, resolviendo la ecuación de autovalores, podemos encontrar analíticamente la energía correspondiente al estado fundamental, obteniendo

$$E = -4 \frac{J^2}{U_0} \cos^2 \left( \frac{\pi}{2(S-1)} \right) - 2U_0. \quad (7.18)$$

En la figura 7.1 podemos corroborar que el resultado obtenido por diagonalización numérica coincide con el resultado obtenido con el Bethe ansatz. Nuevamente usamos los números  $J = 1$  y  $U_0 = 10$ .

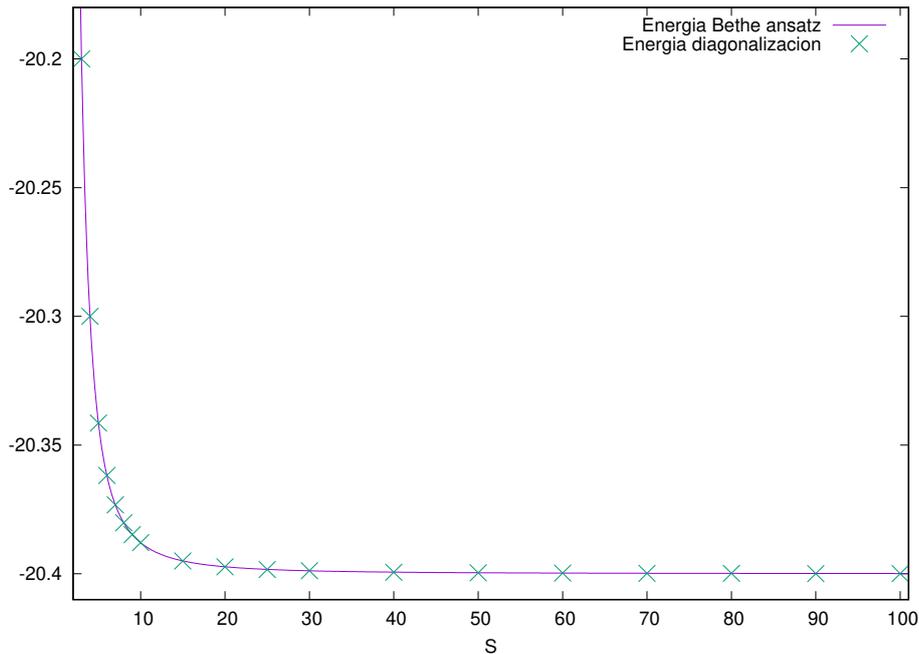


Figura 7.1: Comparación Bethe ansatz para N=2

# Capítulo 8

## Conclusiones

### 8.1. Resumen y conclusiones

Repasaremos aquí los principales resultados de este trabajo y profundizaremos en la comprensión e interpretación de los mismos.

Utilizando el enfoque de obtención de un Hamiltoniano efectivo, proyectado en el subespacio de estados de interés, es decir, el subespacio de estados fundamentales, el Hamiltoniano original con pares de fermiones tipo  $a$  y  $b$  se modificó de tal forma que en esta aproximación pudo escribirse como un Hamiltoniano en donde los fermiones se mueven siempre de a pares. Por lo tanto, pudimos pensar en un modelo donde existía un único tipo de partículas  $d$  que se comportaban como bosones *hard-core*. Este sistema admitió una solución analítica exacta para el caso de un par, y además pudo diagonalizarse numéricamente para el caso de  $N = 2$  y  $N = 3$  pares. Para  $N = 2$  el programa permitía llegar hasta altos números de  $S$ , mientras que para  $N = 3$  se volvía lento para valores  $S$  bastante menores.

Los mismos resultados pudieron obtenerse siguiendo el enfoque de teoría de perturbaciones independiente del tiempo a segundo orden. Normalmente en los libros de texto no se encuentra el desarrollo de esta teoría a órdenes mayores que uno, dado que cuando la contribución a primer orden no es nula, no suele ser necesario averiguar correcciones a mayores órdenes. Sin embargo, en este trabajo encontramos que la corrección de la energía a primer orden es nula, por lo tanto, fue necesario profundizar en el uso de esta teoría para encontrar dichas correcciones a segundo orden.

Para  $N = 2$  pudimos encontrar también una solución analítica exacta mediante el mapeo de nuestro Hamiltoniano a un Hamiltoniano de spines, y aplicar las soluciones conocidas siguiendo el ansatz de Bethe para una cadena de spines  $1/2$ . Por lo tanto, obtuvimos expresiones cerradas para la energía y la función de onda del estado fundamental para  $N = 2$  y cualquier  $S$ .

Para el caso de un par, al resolver el sistema con condiciones periódicas de contorno encontramos un estado fundamental cuyos pesos o coeficientes de Schmidt son todos iguales entre sí, por lo tanto es un estado con máximo entrelazamiento entre las partes. No así en el caso de condiciones abiertas de contorno, donde los pesos hallados fueron diferentes y el nivel de entrelazamiento fue menor.

Para el caso de  $N$  pares, encontramos que el estado fundamental posee mayor peso en las contribuciones donde los pares están separados unos de otros, y menor peso en las contribuciones donde los pares están contiguos. Esto revela que existen correlaciones de largo alcance en las posiciones de los sitios ocupados en el sistema.

Finalmente nos concentramos en resolver el sistema usando la teoría de cobosones.

Con el estado fundamental de un par pudimos construir el estado fundamental de  $N$  pares siguiendo esta vez la teoría de cobosones. Esto pudo realizarse debido a que el estado de un par estaba máximamente entrelazado, por lo tanto, fue posible encontrar una expresión cerrada para el estado de  $N$  pares, ya que este caso es uno de los pocos en los cuales su factor de normalización  $\chi_N$  se puede calcular de manera cerrada o analítica. Este ansatz, a diferencia del estado encontrado mediante diagonalización, tiene el mismo peso en cada uno de los estados de la base de Fock, dando

cuenta de que en este caso no existen correlaciones entre las posiciones.

Con el ansatz de  $N$  pares, pudimos encontrar una energía aproximada. Usando correcciones a órdenes mayores del estado de un par, encontramos además una expresión explícita de la energía del sistema dada por la teoría de cobosones.

Al comparar las energías, notamos que para un mismo  $N$  la energía aproximada y de cobosones disminuyen al aumentar el número de sitios, y tienden al mismo valor. La energía de diagonalización, que también disminuye al aumentar  $S$ , tiende a un valor menor. La distancia entre energía la energía obtenida por diagonalización y por la teoría de cobosones disminuye al aumentar  $S$  y todas las energías disminuyen al aumentar  $N$ .

Al comparar las funciones de onda de los estados fundamentales, encontramos que para un mismo  $N$ , la fidelidad entre el estado obtenido por diagonalización y el ansatz de cobosones disminuye abruptamente al aumentar  $S$ . Se estabiliza rápidamente tendiendo a un valor fijo, que es mayor mientras menor sea el número de pares. Sin embargo encontramos una diferencia del 18 % entre la fidelidad esperada y la hallada para  $N = 2$ , y una diferencia del 39 % para  $N = 3$ .

Podemos decir entonces que la teoría de cobosones no parece la más adecuada para resolver este sistema. Vemos que el ansatz de cobosones no describe correctamente el estado fundamental, se esperaba que la fidelidad fuese una función creciente de  $S$  o que tendiera a un valor cercano a 1. Ni las interacciones atractivas de corto alcance en un sistema de baja densidad, ni el estado construido a partir del estado fundamental de un par con entrelazamiento máximo, fueron suficientes para considerar el ansatz como válido.

## 8.2. Perspectivas futuras

Hay varios análisis que podemos realizar para comprobar por qué no es adecuado utilizar este formalismo para resolver este modelo.

En primer lugar, puede realizarse un análisis dimensional, para analizar la dependencia del funcionamiento de la teoría de cobosones con la dimensión del problema. Se debería resolver de forma similar la primer generalización a nuestro trabajo ( $1 \times S$ ), que consistiría en dos cadenas con tasas de tuneo horizontal y vertical diferentes ( $2 \times S$ ), para luego pasar a un modelo en dos dimensiones, como por ejemplo una red cuadrada ( $S \times S$ ). Para esto, sería conveniente primero realizar un programa más eficiente para el caso unidimensional.

Manteniendo el análisis en una dimensión, puede plantearse resolver un sistema similar, pero con un modelo continuo en vez de discreto. Plantear este modelo es mucho más desafiante, pero sería importante resolverlo, para entender un poco más acerca de en qué situaciones es aplicable la teoría de cobosones, y también porque es relevante para implementaciones con átomos ultrafríos.

Sería interesante estudiar este sistema tomando en cuenta el efecto del ruido. Típicamente, un sistema físico inmerso en un ambiente interactúa con él de alguna forma que degrada su dinámica cuántica [24, 34, 35], es decir, generando decoherencia y por ende, para nuestro caso, pérdida del entrelazamiento entre las partículas constituyentes de un par. Es por esto que pensamos que la interacción de un cobosón con su entorno llevará a una disminución del carácter bosónico del compuesto. Para analizar la evolución del entrelazamiento, describiríamos la interacción entre el sistema de cobosones y el entorno utilizando procesos de decoherencia típicos o paradigmáticos de sistemas de partículas distinguibles, modificados para que sean aplicables al sistema de cobosones. Cabe mencionar que una generalización de este tipo fue investigada en [36] para el caso de sistemas de fermiones idénticos y recientemente analizadas para el caso de bosones idénticos [37].

# Bibliografía

1. Combescot, M., Betbeder-Matibet, O. y Dubin, F. The many-body physics of composite bosons. *Physics Reports* **463**, 215-320 (2008) (pp. 6, 17).
2. Annett, J. *Superconductivity, Superfluids and Condensates* (OUP Oxford, 2004) (p. 6).
3. Law, C. K. Quantum entanglement as an interpretation of bosonic character in composite two-particle systems. *Phys. Rev. A* **71**, 034306 (3 mar. de 2005) (pp. 6, 7, 16).
4. Chudzicki, C., Oke, O. y Wootters, W. K. Entanglement and Composite Bosons. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 070402 (7 feb. de 2010) (pp. 6, 7).
5. Combescot, M. y Shiao, S.-Y. *Excitons and Cooper Pairs: Two Composite Bosons in Many-Body Physics* (Oxford University Press, 2015) (p. 6).
6. Greiner, M., Regal, C. A. y Jin, D. S. Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas. *Nature* **426**, 537 (2003) (p. 6).
7. Zwierlein, M. *y col.* Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 250401 (2003) (p. 6).
8. Jochim, S. *y col.* Bose-Einstein condensation of molecules. *Science* **302**, 2101 (2003) (p. 6).
9. Partridge, G. B., Strecker, K. E., Kamar, R. I., Jack, M. W. y Hulet, R. G. Molecular Probe of Pairing in the BEC-BCS Crossover. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 020404 (2005) (p. 6).
10. Bouvrie, P. A., Tichy, M. C. y Roditi, I. Composite-boson approach to molecular Bose-Einstein condensates in mixtures of ultracold Fermi gases. *Phys. Rev. A* **95**, 023617 (2017) (p. 6).
11. Wiseman, H. M. y Vaccaro, J. A. Entanglement of indistinguishable particles shared between two parties. *Phys. Rev. Lett* **91**, 097902 (2003) (p. 7).
12. Killoran, N., Cramer, M. y Plenio, M. B. Extracting entanglement from identical particles. *Phys. Rev. Lett.* **112**, 150501 (2014) (p. 7).
13. Bouvrie, P. A., Valdés-Hernández, A., Majtey, A. P., Zander, C. y Plastino, A. R. Entanglement generation through particle detection in systems of identical fermions. *Ann. Phys.* **383**, 401 (2017) (p. 7).
14. Gross, C., Zibold, T., Nicklas, E., Esteve, J. y Oberthaler, M. K. Nonlinear atom interferometer surpasses classical precision limit. *Nature* **464**, 1165 (2010) (p. 7).
15. Sorensen, A., Duan, L. M., Cirac, J. I. y Zoller, P. Many-particle entanglement with Bose-Einstein condensates. *Nature* **409**, 63 (2001) (p. 7).
16. Bogoliubov, N. On the theory of superfluidity. *J. Phys* **11**, 23 (1947) (p. 7).
17. Pérez-García, V. M., Michinel, H. y Herrero, H. Bose-Einstein solitons in highly asymmetric traps. *Phys. Rev. A* **57**, 3837-3842 (5 mayo de 1998) (p. 7).
18. Salasnich, L., Manini, N. y Parola, A. Condensate fraction of a Fermi gas in the BCS-BEC crossover. *Physical Review A* **72**, 023621 (2005) (p. 7).
19. Pong, Y. H. y Law, C. K. Bosonic characters of atomic Cooper pairs across resonance. *Phys. Rev. A* **75**, 043613 (4 abr. de 2007) (p. 7).

20. Zettili, N. *Quantum mechanics: concepts and applications* 2nd ed (Wiley-Blackwell, 2009) (pp. 8, 9, 11).
21. Sakurai, J. J. y Napolitano, J. *Modern Quantum Mechanics* 2.<sup>a</sup> ed. (Cambridge University Press, 2017) (p. 11).
22. Raggio, G. *Teoría de perturbaciones estacionarias* (2014) (p. 11).
23. Merzbacher, E. *Quantum Mechanics* (Wiley, 1998) (pp. 15, 23).
24. Nielsen, M. A. y Chuang, I. L. *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition* (Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2011) (pp. 16, 30, 44, 50).
25. Tichy, M. C., Bouvrie, P. A. y Mølmer, K. Collective Interference of Composite Two-Fermion Bosons. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 260403 (26 dic. de 2012) (p. 18).
26. Girardeau, M. Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension. *Journal of Mathematical Physics* **1**, 516-523 (1960) (p. 23).
27. Münder, W. *Matrix Product Calculation of Correlation Density Matrices for 1-Dimensional Quantum Chains* (Ludwig-Maximilians-Universität München, 2008) (p. 26).
28. Bouvrie, P., P. Majtey, A., Tichy, M., Dehesa, J. y Plastino, A. Entanglement and the Born-Oppenheimer approximation in an exactly solvable quantum many-body system. *The European Physical Journal D* **68** (2014) (p. 29).
29. Combescot, M. *Many-body physics of composite bosons* (Cours de 3e cycle de la Physique en Suisse Romande, 2008) (p. 40).
30. Cormick, C. *Estimation of the ground-state energy in coboson theory*. Comunicación privada. (2018) (p. 40).
31. Karabach, M. y Müller, G. Introduction to the Bethe Ansatz I. *Computers in Physics* **11**, 36-43 (1997) (pp. 46, 47, 48).
32. Coleman, P. *Introduction to Many-Body Physics* (Cambridge University Press, 2015) (p. 46).
33. Perrin, H. Notes for Les Houches lectures on adiabatic potentials (2013) (p. 47).
34. Paz, J. P. y Zurek, W. H. *Environment-Induced Decoherence and the Transition from Quantum to Classical* en *Coherent atomic matter waves* (eds. Kaiser, R., Westbrook, C. y David, F.) (Springer Berlin Heidelberg, 2001), 533-614 (p. 50).
35. Schlosshauer, M. *Decoherence and the Quantum to Classical Transition* (Springer, 2007) (p. 50).
36. Valdes-Hernandez, A., Majtey, A. P. y Plastino, A. R. Dynamics of entanglement in systems of identical fermions undergoing decoherence. *Phys. Rev. A* **91**, 032313 (3 mar. de 2015) (p. 50).
37. Bussandri, D. G., Céspedes, P., Valdés-Hernández, A. y Majtey, A. P. Dynamics of entanglement in open systems of identical particles under decoherence in a non-Markovian regime. En preparación (2018) (p. 50).

# Apéndice A

## Programa utilizado para diagonalización numérica

Adjuntamos aquí el programa usado para  $N = 2$  y  $N = 3$ , ejemplificando con  $S = 4$ .

### One Dimension

#### Fock State list

```
in(1)= (*Creates a list of all NN-hardcore bosons states in 2 wells*)
FockStateList1D[NN_, L_] :=
  Permutations[Join[Table[1, {i, 1, NN}], Table[0, {k, 1, L - NN}]]]

in(2)= FockStateList1D[2, 4]
Out(2)= {{1, 1, 0, 0}, {1, 0, 1, 0}, {1, 0, 0, 1}, {0, 1, 1, 0}, {0, 1, 0, 1}, {0, 0, 1, 1}}
```

#### Many-Particle Hamiltonian

```
in(4)= (*Builds the many-body Hamiltonian,
starting from the single-particle matrix and the interaction*)
Hamiltonian1D[NN_, L_, Omega_, U0_] :=
(
  (*We need a list of the Fock-states,
  since all action is happening within this space*)
  FS1D = FockStateList1D[NN, L];

  (*How large is the Hamiltonian*)
  NFS1D = Length[FS1D];

  (*First fill in 0s*)
  Hami1D = Table[0, {k, 1, NFS1D}, {j, 1, NFS1D}];

  Do[(*Go through all Fock state combinations (j,k)*)
    If[FS1D[[j]].FS1D[[k]] == NN - 1, (* Just one particle tunnel *)

      jj = Position[FS1D[[j]] - FS1D[[k]], 1][[1, 1]];
      (*Which single-particle matrix element connects them?*)
      kk = Position[FS1D[[j]] - FS1D[[k]], -1][[1, 1]];

      If[Abs[jj - kk] == 1,
        Hami1D[[j, k]] = -Omega^2 / (2 U0)
      ,
        If[Abs[jj - kk] == L - 1,
          Hami1D[[j, k]] = -Omega^2 / (2 U0) (*Periodic boundary conditions*)
        , 0]]
      ,
      If[j == k, Pos = Flatten[Position[FS1D[[j]], 1]];
        Hami1D[[j, k]] = (If[Pos[[2]] - Pos[[1]] > 1 && Pos[[2]] - Pos[[1]] < L - 1,
          -NN (U0 + (Omega^2 / U0)), (-NN (U0 + (Omega^2 / U0)) + Omega^2 / U0)]
        , 0]
      ];
    Hami1D[[k, j]] = Hami1D[[j, k]];

  , {j, 1, NFS1D}
  , {k, j, NFS1D}];
Hami1D
)
```

### Ground State

(First output: Overlap<sup>2</sup>, Second output: normalization eigenstate)

```

KetN[N_, LL_] :=
1/Sqrt[Binomial[LL, N]] Table[1, {i, Binomial[LL, N]}] (*Coboson ground state*)

In[30]= KetN[2, 4]
Out[30]= {1/sqrt(6), 1/sqrt(6), 1/sqrt(6), 1/sqrt(6), 1/sqrt(6), 1/sqrt(6)}

In[23]= NN = 2;
L = 4
KetN[NN, L];

ES1D = Eigensystem[N@Hamiltonian1D[NN, L, 1., 10]];
ESSorted1D = Sort[ES1D];
(*Normalization of a maximally entangled Twin Fock state*)
Abs[ESSorted1D[[1, 2]].KetN[NN, L]]^2
Abs[ESSorted1D[[1, 2]]].Abs[ESSorted1D[[1, 2]]]
(*norma=Abs[ESSorted1D[[1,2]]]^2*)

Out[24]= 4
Out[28]= 0.888889
Out[29]= 1.

ESSorted1D[[1, 1]] (*Energy*)
Out[31]= -20.3

In[32]= ESSorted1D[[1, 2]] (*Eigenstate*)
Out[32]= {-0.288675, -0.57735, -0.288675, -0.288675, -0.57735, -0.288675}

```

Para  $N = 3$  sólo debemos reemplazar en el *if* correspondiente por las siguientes condiciones:

```

If[j == k, Pos = Flatten[Position[FS1D[[j]], 1]];
Hami1D[[j, k]] = (Which[Pos[[2]] - Pos[[1]] > 1 && Pos[[3]] - Pos[[2]] > 1 &&
Pos[[3]] - Pos[[1]] > 1 && Pos[[3]] - Pos[[1]] < L - 1, -NN (U0 + (Omega^2/U0)),

Pos[[2]] - Pos[[1]] > 1 && Pos[[3]] - Pos[[2]] > 1,
(-NN (U0 + (Omega^2/U0)) + Omega^2/U0),
Pos[[3]] - Pos[[2]] > 1 && Pos[[3]] - Pos[[1]] > 1 && Pos[[3]] - Pos[[1]] < L - 1,
(-NN (U0 + (Omega^2/U0)) + Omega^2/U0),
Pos[[2]] - Pos[[1]] > 1 && Pos[[3]] - Pos[[1]] > 1 && Pos[[3]] - Pos[[1]] < L - 1,
(-NN (U0 + (Omega^2/U0)) + Omega^2/U0),

Pos[[2]] - Pos[[1]] > 1, (-NN (U0 + (Omega^2/U0)) + 2 * Omega^2/U0),
Pos[[3]] - Pos[[2]] > 1, (-NN (U0 + (Omega^2/U0)) + 2 * Omega^2/U0),
Pos[[3]] - Pos[[1]] > 1 && Pos[[3]] - Pos[[1]] < L - 1,
(-NN (U0 + (Omega^2/U0)) + 2 * Omega^2/U0)])

```

*Los abajo firmantes, miembros del Tribunal de Evaluación de tesis, damos Fe de que el presente ejemplar impreso se corresponde con el aprobado por este Tribunal.*