Entropías e IPR como marcadores para una Transición de Fase Cuántica en un modelo de dos niveles para la coexistencia de átomo-diátomo

Autores: Ignacio Baena, Pedro Pérez-Fernández , Manuela Rodríguez-Gallardo y José Miguel Arias

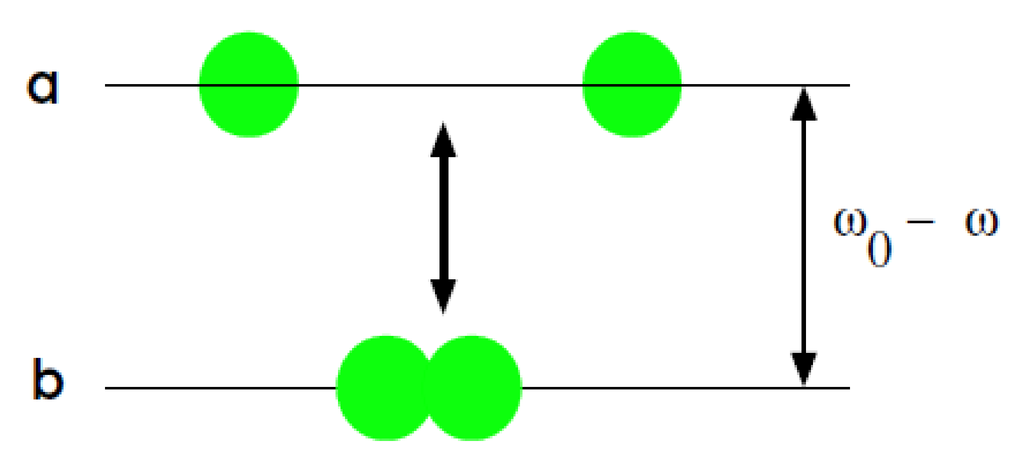
Entropías e IPR como marcadores para una Transición de Fase Cuántica en un modelo de dos niveles para la coexistencia de átomo-diátomo

1. Introducción
Transiciones de fase cuánticas

- Definición
  - Variación brusca de las propiedades de un sistema (parámetro de control, λ)
  - Markers: Energía, IPR, Entropías…
- Parámetro de orden
  - Normalmente es 0 en una fase y distinto de cero en otra
- Orden de la transición
  - Primer orden: entropía discontinua, $\frac{dE}{d\lambda}$ discontinua
  - Segundo orden: entropía continua, $\frac{d^2E}{d\lambda^2}$ discontinua

2. Modelo de dos niveles

- Suponemos un cierto sistema aislado de M núcleos (par) a temperatura absoluta cero, en el que coexisten átomos y diátomos. Los niveles accesibles serán



(2.) Hamiltoniano del modelo

- Sea λ un parámetro (control)

$$H = \underbrace{\frac{1}{2}\,\omega_0\, a^\dagger a}_{H_a} + \underbrace{\omega\, b^\dagger b}_{H_b} + \underbrace{\frac{\lambda}{\sqrt{2M}}\left(b^\dagger aa + ba^\dagger a^\dagger\right)}_{\lambda H_{ab}}$$

- $a^\dagger|n_a\rangle = \sqrt{n_a + 1}\,|n_a + 1\rangle$ $\qquad a\,|n_a\rangle = \sqrt{n_a}\,|n_a - 1\rangle$
- $b^\dagger|n_b\rangle = \sqrt{n_b + 1}\,|n_b + 1\rangle$ $\qquad$ b $|n_b\rangle = \sqrt{n_b}\,|n_b - 1\rangle$

(2.) Solución exacta del modelo

$$H\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$$

- Será necesario escribir el hamiltoniano en forma matricial
  - Base: $|n_a\rangle \times |n_b\rangle = |n_a n_b\rangle$
  - Para M partículas $\{|0\ (M/\,2)\rangle, |2\ (M/2-1)\rangle, |4\ (M/2-2)\rangle, \dots, |M\ 0\rangle\}$
    - $N \equiv \frac{M}{2} + 1$

(2.) Solución exacta del modelo

- Escribimos la matriz cuyos términos son $H_{ij} = \langle i|H|j\rangle$
- Ejemplo. Para $N = 6$, la base es $\{|0\ 3\rangle, |2\ 2\rangle, |4\ 1\rangle, |6\ 0\rangle\}$

$$H_a \leftrightarrow \frac{1}{2}\omega_0 \begin{pmatrix} \langle 0\ 3|a^\dagger a|0\ 3\rangle & \langle 0\ 3|a^\dagger a|2\ 2\rangle & \langle 0\ 3|a^\dagger a|4\ 1\rangle & \langle 0\ 3|a^\dagger a|6\ 0\rangle \\ \langle 2\ 2|a^\dagger a|0\ 3\rangle & \langle 2\ 2|a^\dagger a|2\ 2\rangle & \langle 2\ 2|a^\dagger a|4\ 1\rangle & \langle 2\ 2|a^\dagger a|6\ 0\rangle \\ \langle 4\ 1|a^\dagger a|0\ 3\rangle & \langle 4\ 1|a^\dagger a|2\ 2\rangle & \langle 4\ 1|a^\dagger a|4\ 1\rangle & \langle 4\ 1|a^\dagger a|6\ 0\rangle \\ \langle 6\ 0|a^\dagger a|0\ 3\rangle & \langle 6\ 0|a^\dagger a|2\ 2\rangle & \langle 6\ 0|a^\dagger a|4\ 1\rangle & \langle 6\ 0|a^\dagger a|6\ 0\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\ \omega_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}$$

$$\lambda\ H_{ab} \leftrightarrow \frac{\lambda}{\sqrt{2\cdot 6}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1}\,\sqrt{2}\,\sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{1}\,\sqrt{2}\,\sqrt{3} & 0 & \sqrt{4}\ \sqrt{2}\ \sqrt{3} & 0 \\ 0 & \sqrt{4}\ \sqrt{2}\ \sqrt{3} & 0 & \sqrt{1}\ \sqrt{5}\ \sqrt{6} \\ 0 & 0 & \sqrt{1}\ \sqrt{5}\ \sqrt{6} & 0 \end{pmatrix} = \frac{\lambda}{\sqrt{12}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ \sqrt{6} & 0 & 2\sqrt{6} & 0 \\ 0 & 2\sqrt{6} & 0 & \sqrt{30} \\ 0 & 0 & \sqrt{30} & 0 \end{pmatrix}$$

(2.) Solución exacta del modelo

- Resolviendo el problema, tenemos (en función de λ):
  - Valores de la energía
  - Autovectores
  - Número de partículas en cada nivel
    - $n_a = \langle\psi_0|\hat{n}_a|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|a^\dagger a|\psi_0\rangle = \frac{2}{\omega_0}\langle\psi_0|H_A|\psi_0\rangle$
- Nos interesa el estado fundamental

(2.) IPR

- "Inverse Participation Ratio". Medida de la deslocalización de un estado k
- $IPR = P^{(k)} = \frac{1}{\sum_i \left| c_i^{(k)} \right|^4}$
  - $IPR_{min} = \frac{1}{\sum_i \left| c_i^{(k)} \right|^4} = \frac{1}{0+\cdots+1^4+\cdots+0} = 1$
  - $IPR_{max} = \frac{1}{\sum_i \left| c_i^{(k)} \right|^4} = \frac{1}{\sum_i \frac{1}{N^2}} = \frac{1}{N \cdot \frac{1}{N^2}} = N$

(2.) Información

- Definición
  - Es la cantidad de comunicación necesaria para transmitir un mensaje
  - La información mide lo “sorprendente” que un mensaje es
- ¿Qué es la entropía?
  - Sea n_b una variable aleatoria discreta con distribución de probabilidad $\{p_i\}$

$$S = -\sum_{i=1}^{N} p_i \ln p_i$$

(2.) Entropía (cuántica)

- Entropía de Shannon $(\alpha \to 1)$

$$S = -\sum_{i=1}^{N} p_i \, \ln p_i$$

- Entropía de Rényi $\forall \alpha \in [0,1) \cup (1,\infty)$

$$R^{(\alpha)} = \frac{1}{1-\alpha} \ln \sum_{i=1}^{N} p_i^{\alpha}$$

(2.) Entropía (cuántica)

- Entropía de Shannon $(\alpha \to 1)$

$$S = -\sum_{i=1}^{N} p_i \ln p_i \qquad \begin{cases} S_{min} = 0 \\ S_{max} = -\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{N} \ln \frac{1}{N} = \ln N \end{cases}$$

- Entropía de Rényi $\forall \alpha \in [0,1) \cup (1, \infty)$

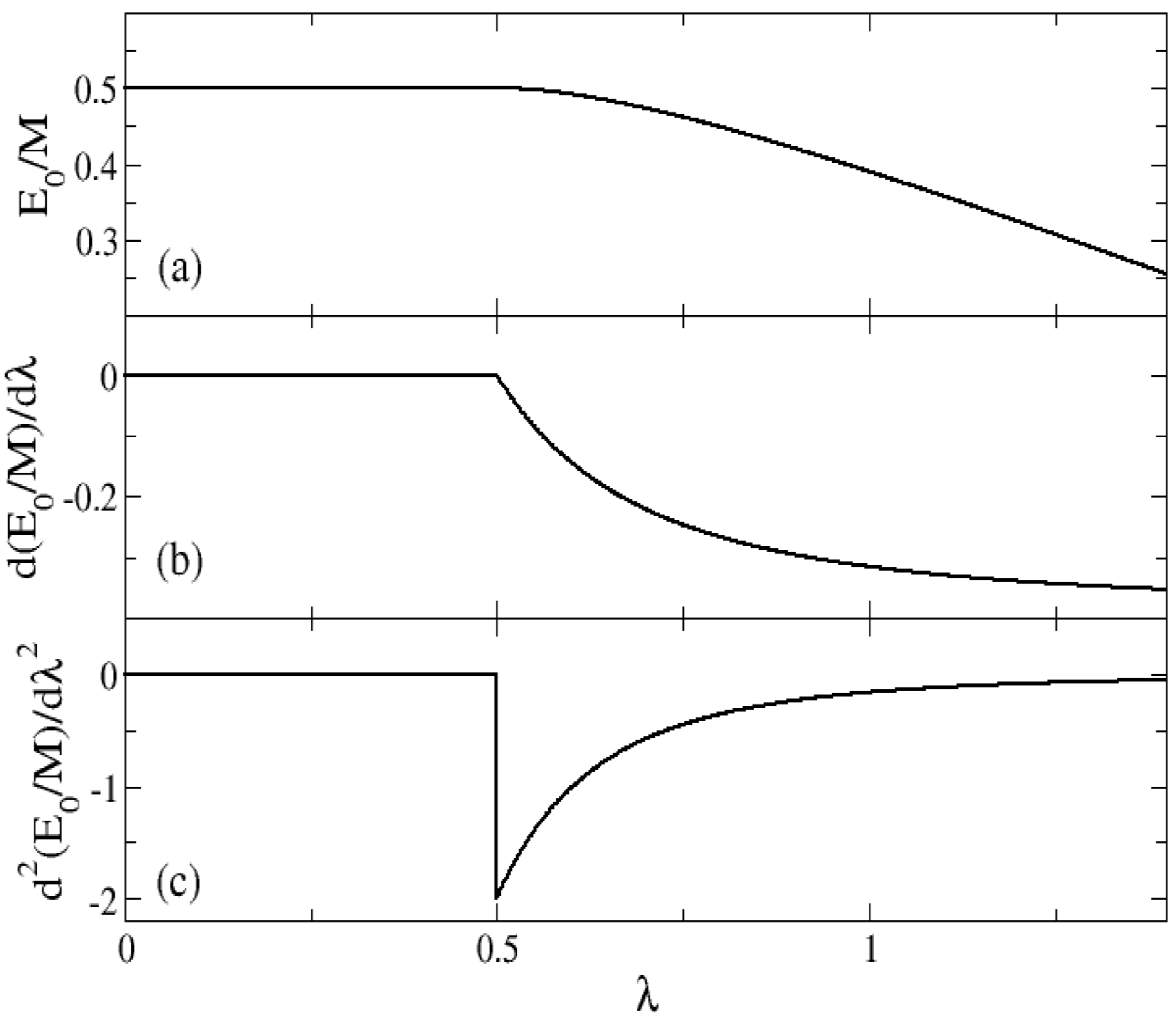
$$R^{(\alpha)} = \frac{1}{1-\alpha} \ln \sum_{i=1}^{N} p_i^{\alpha} \qquad \begin{cases} R_{min}^{(\alpha)} = 0 \\ R_{max}^{(\alpha)} = \frac{1}{1-\alpha} \ln N^{-(\alpha-1)} = \ln N \end{cases}$$

Teoría de Campo Medio (TCM)

- En la TCM, el efecto de cada uno de los elementos de un sistema es sustituido por la media de sus efectos.
- Reescritura hamiltoniano -> estado de prueba -> lím termodinámico-> energía por partícula

$$V_c(\lambda) = \frac{\omega}{2} + (\lambda_c + \lambda \operatorname{sen}\theta_c)\cos^2\theta_c\,, \qquad con\ \lambda_c = \frac{\omega_0 - \omega}{2}$$

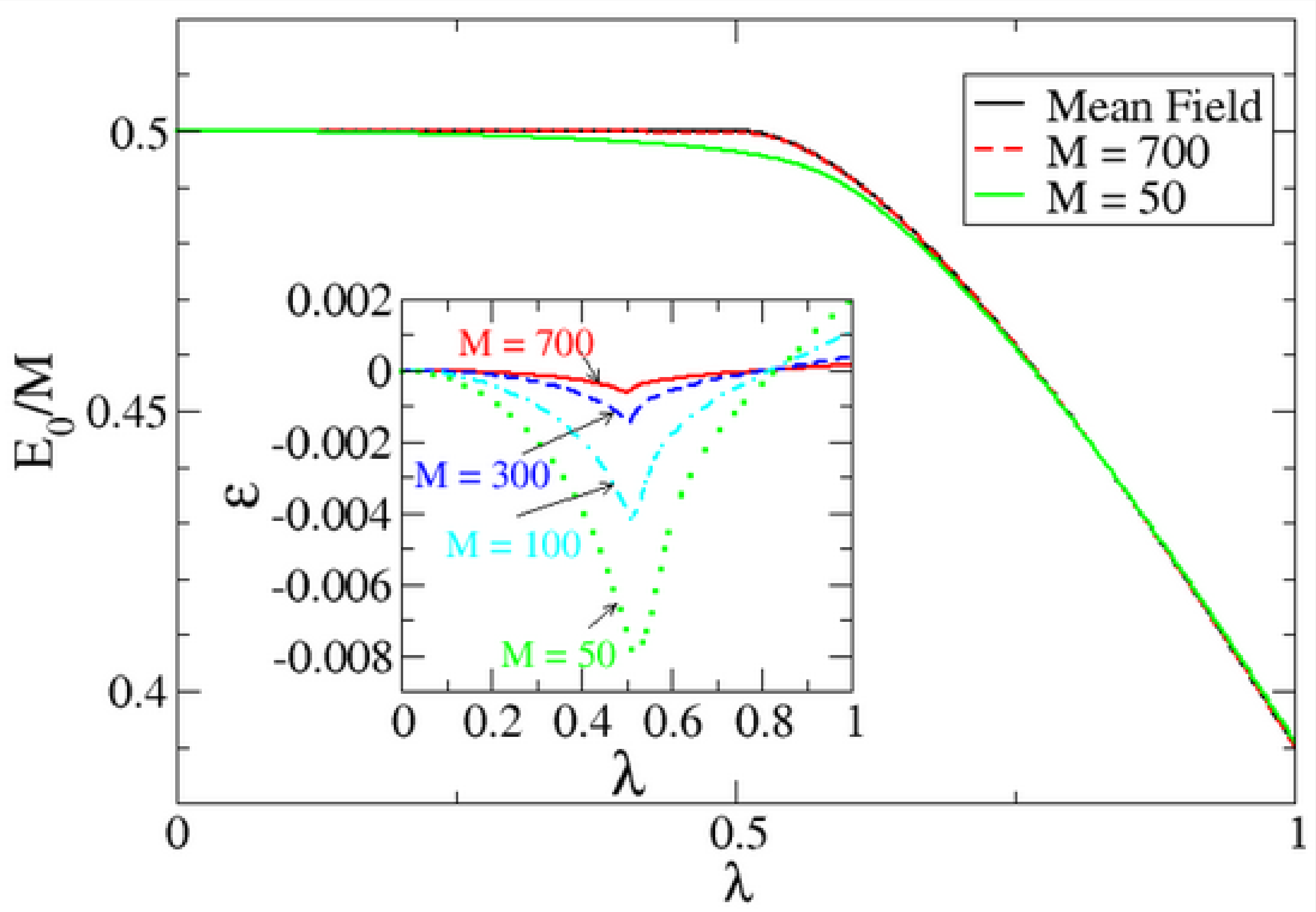
$$\theta_c(\lambda) = \begin{cases} (2k+1)\dfrac{\pi}{2}, & para\ \lambda \le \lambda_c \\ arcsen\left(\dfrac{-\Delta\omega \pm \sqrt{(\Delta\omega)^2 + 12\,\lambda^2}}{6\lambda}\right), & para\ \lambda \ge \lambda_c \end{cases}$$



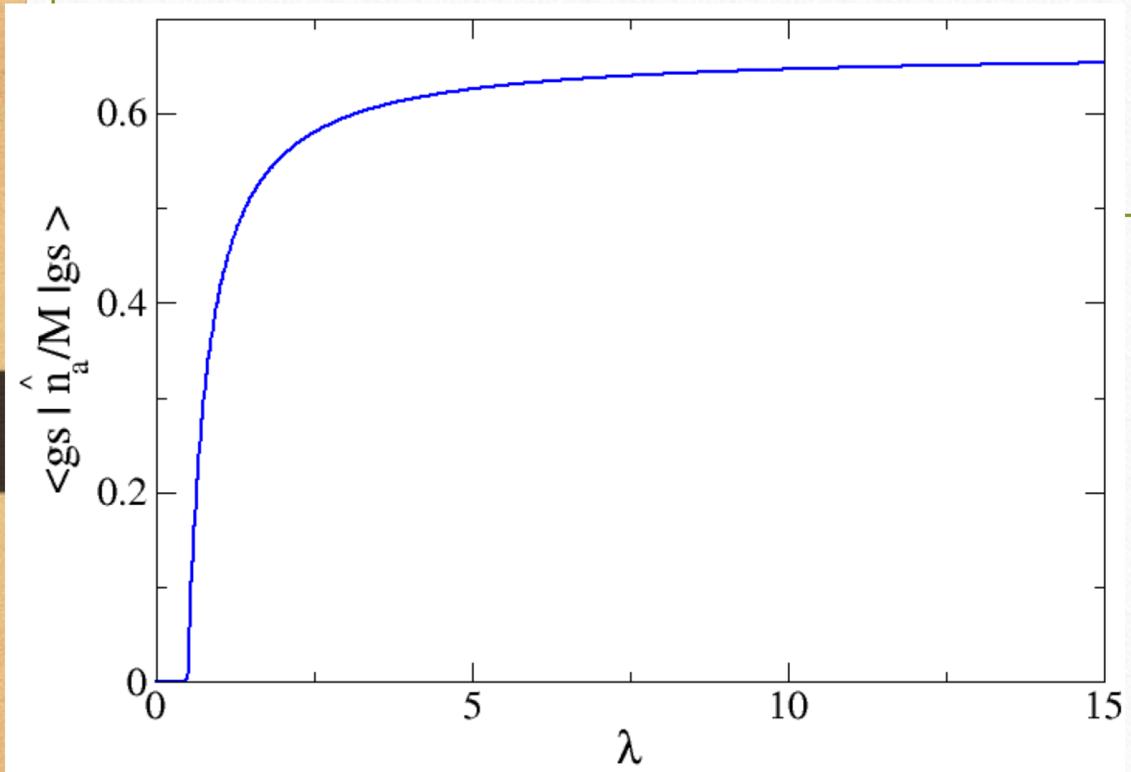
0.5
0.4
0.3
E_0/M
(a)
0
-0.2
$d(E_0/M)/d\lambda$
(b)
0
-1
-2
$d^2(E_0/M)/d\lambda^2$
(c)
0
0.5
1
λ

3. Resultados

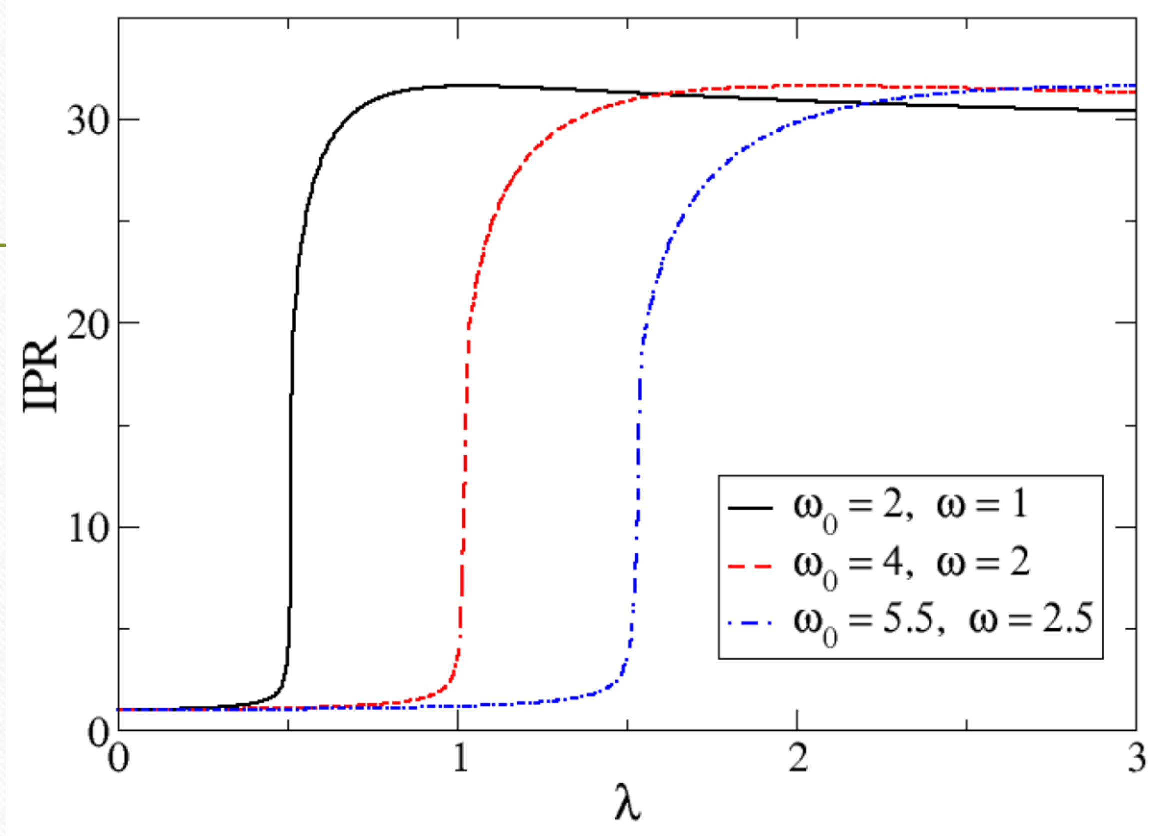
- $M = 700,\ \omega_0 = 2,\ \omega = 1 \ \longrightarrow\ \lambda_c = \frac{\omega_0 - \omega}{2} = 0.5$



Mean Field
M = 700
M = 50
0.5
0.45
0.4
E_0/M
0
0.5
1
λ
0.002
0
-0.002
-0.004
-0.006
-0.008
ε
M = 700
M = 300
M = 100
M = 50
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
λ



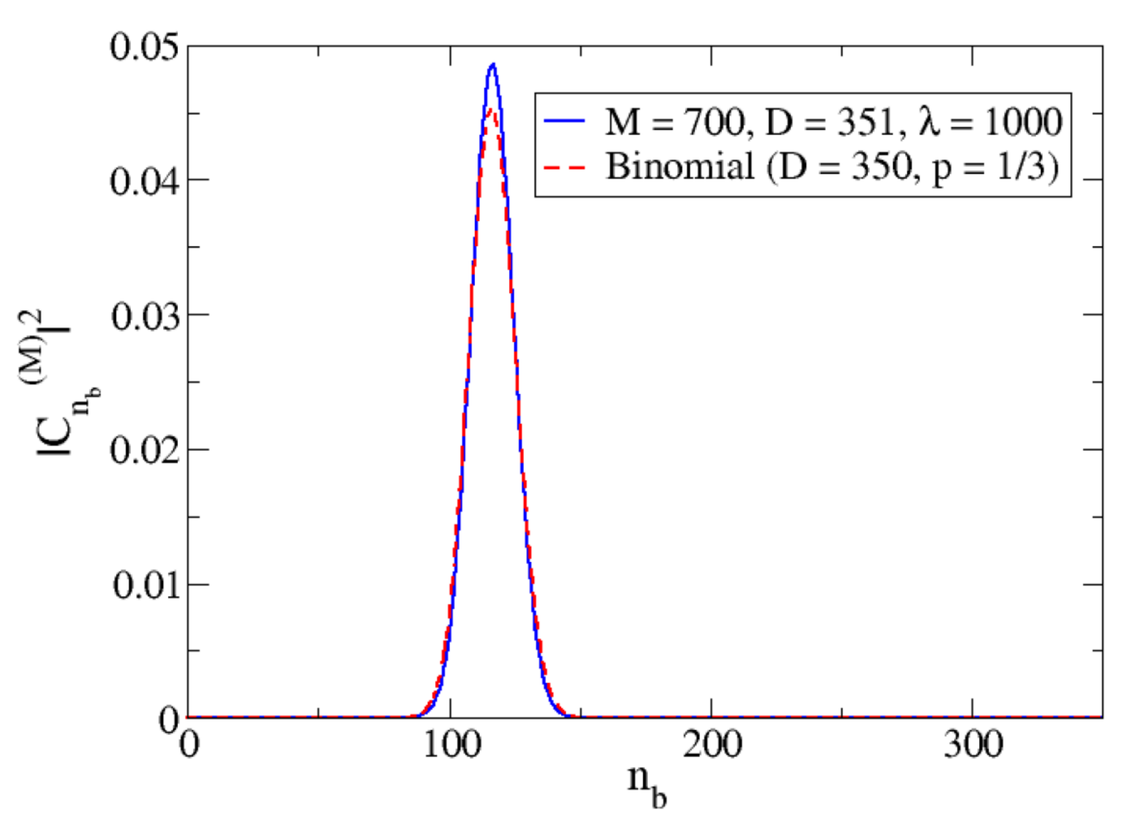
<gs | n̂_a/M |gs >
0.6
0.4
0.2
0
0
5
10
15
λ

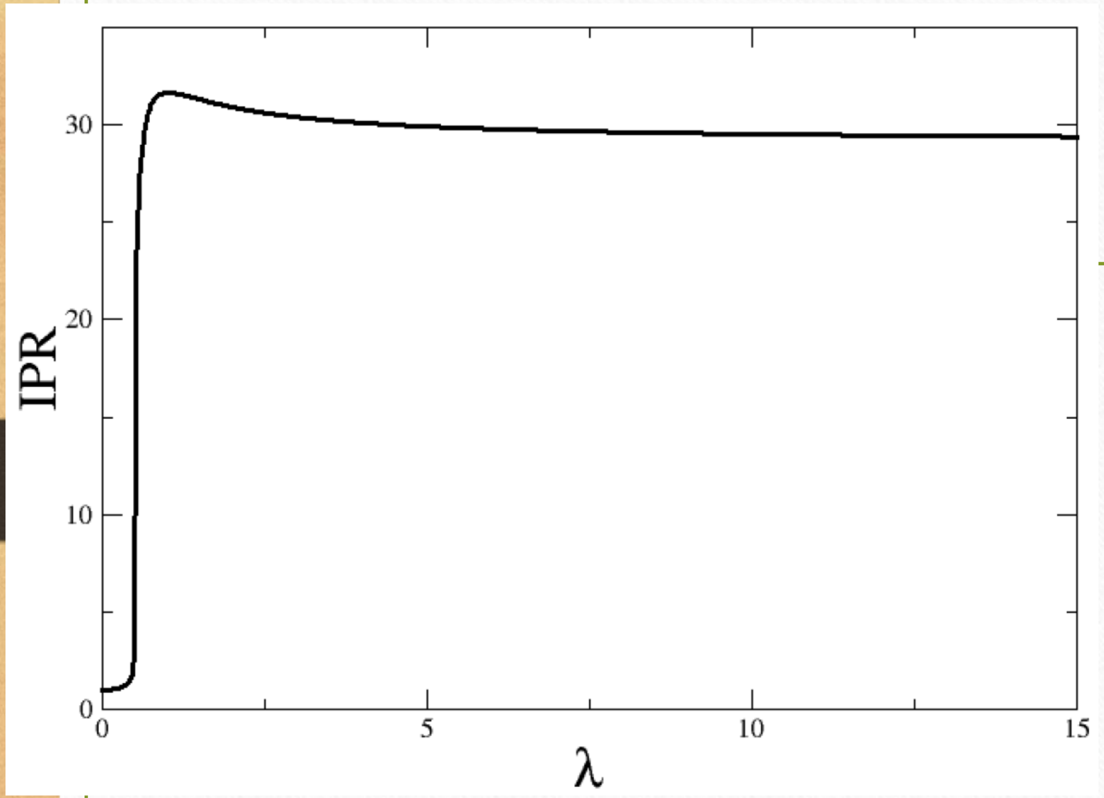


IPR
30
20
10
0
0
1
2
3
λ
ω0 = 2, ω = 1
ω0 = 4, ω = 2
ω0 = 5.5, ω = 2.5

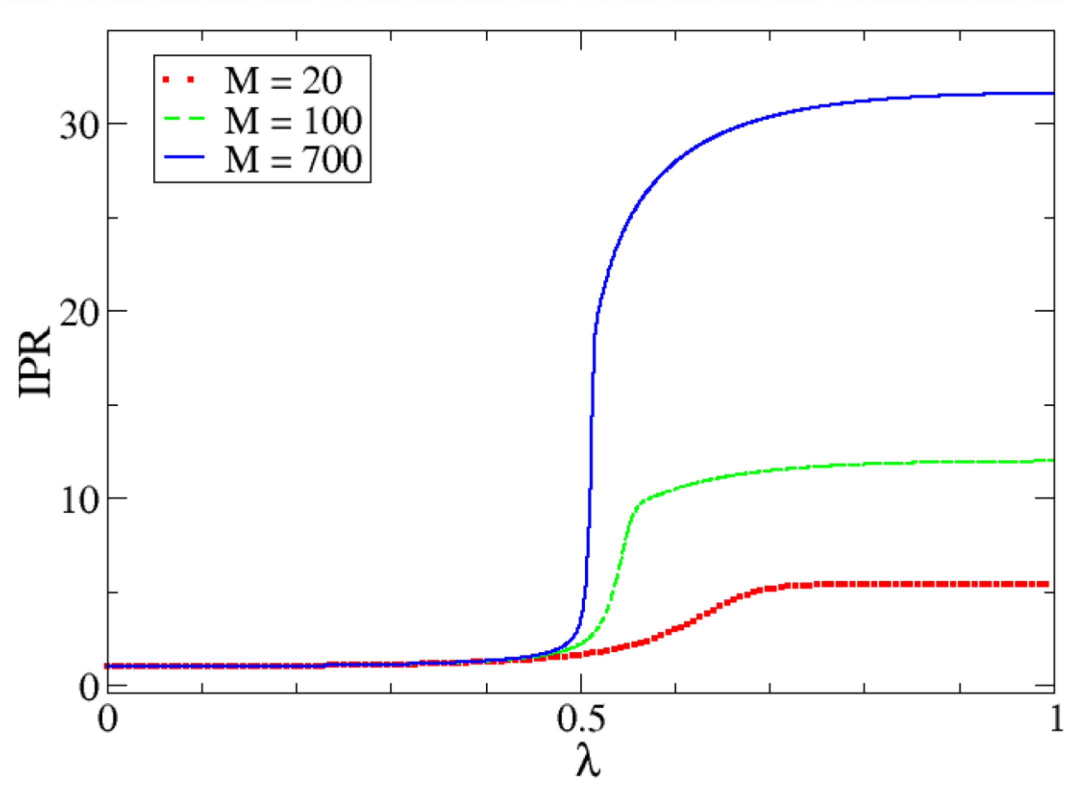
¿Por qué este valor del IPR?

- $M = n_a + 2\,n_b$
  - $n_a = 2M/3$
  - $n_b = M/6$

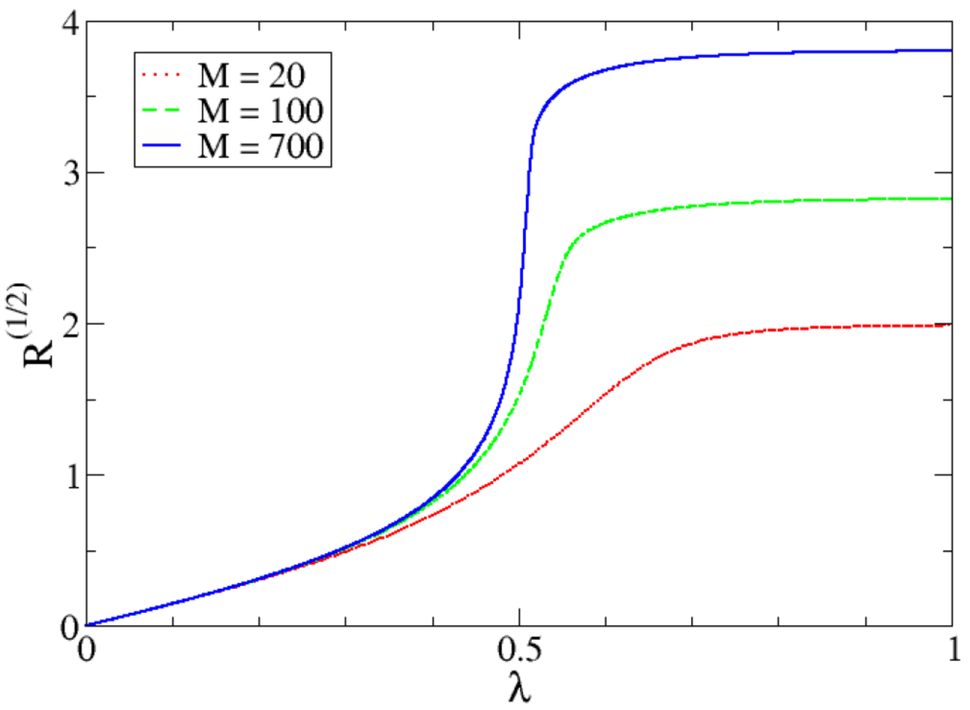


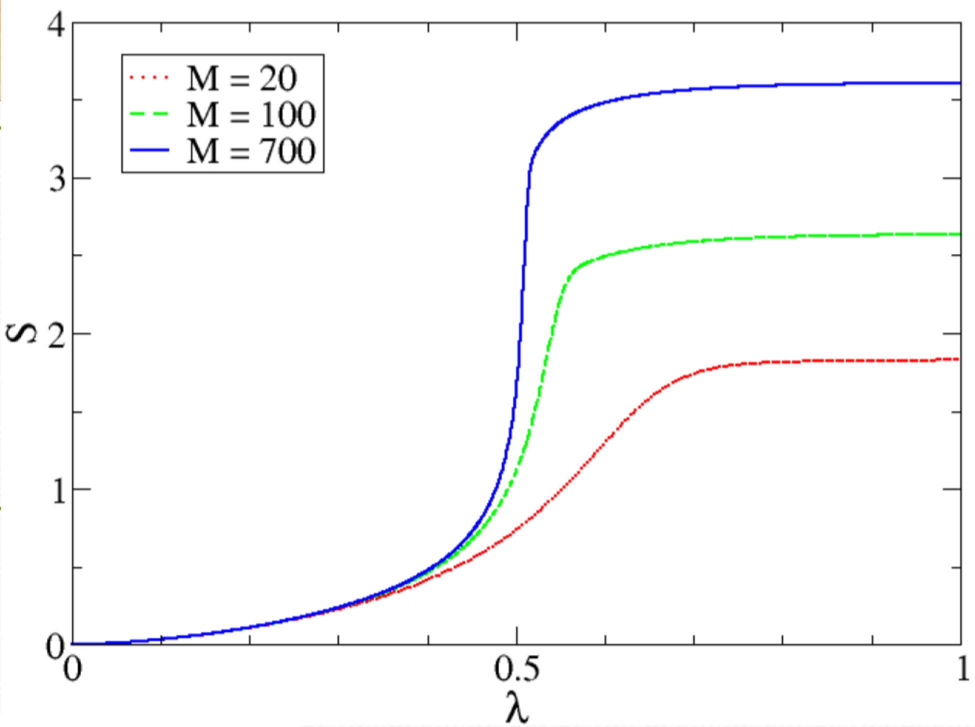


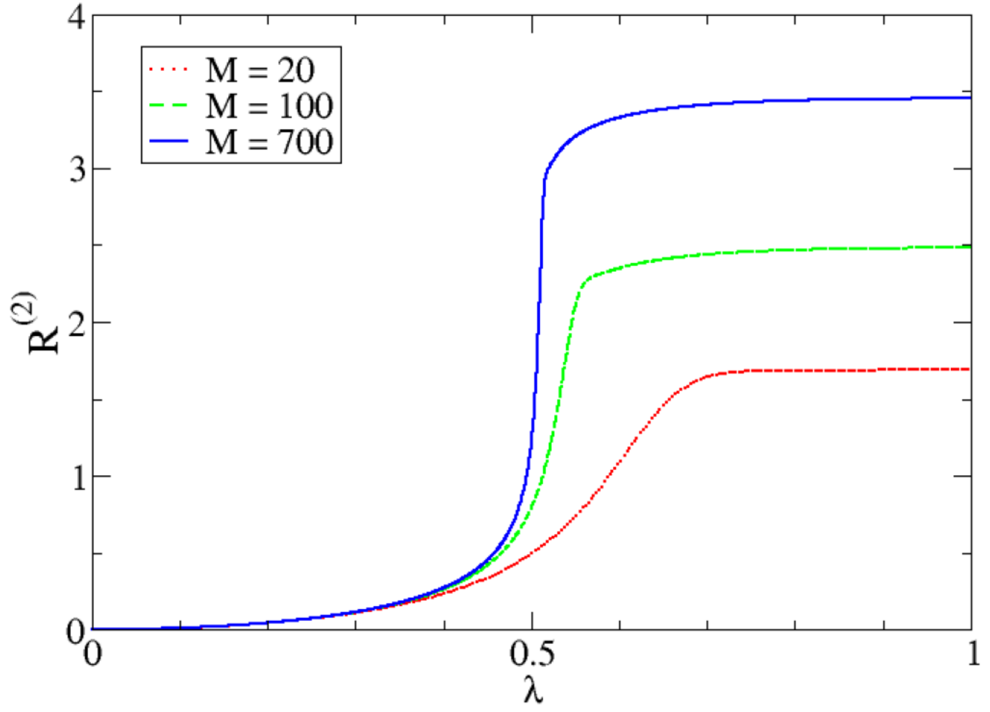
IPR
λ
0
10
20
30
5
15

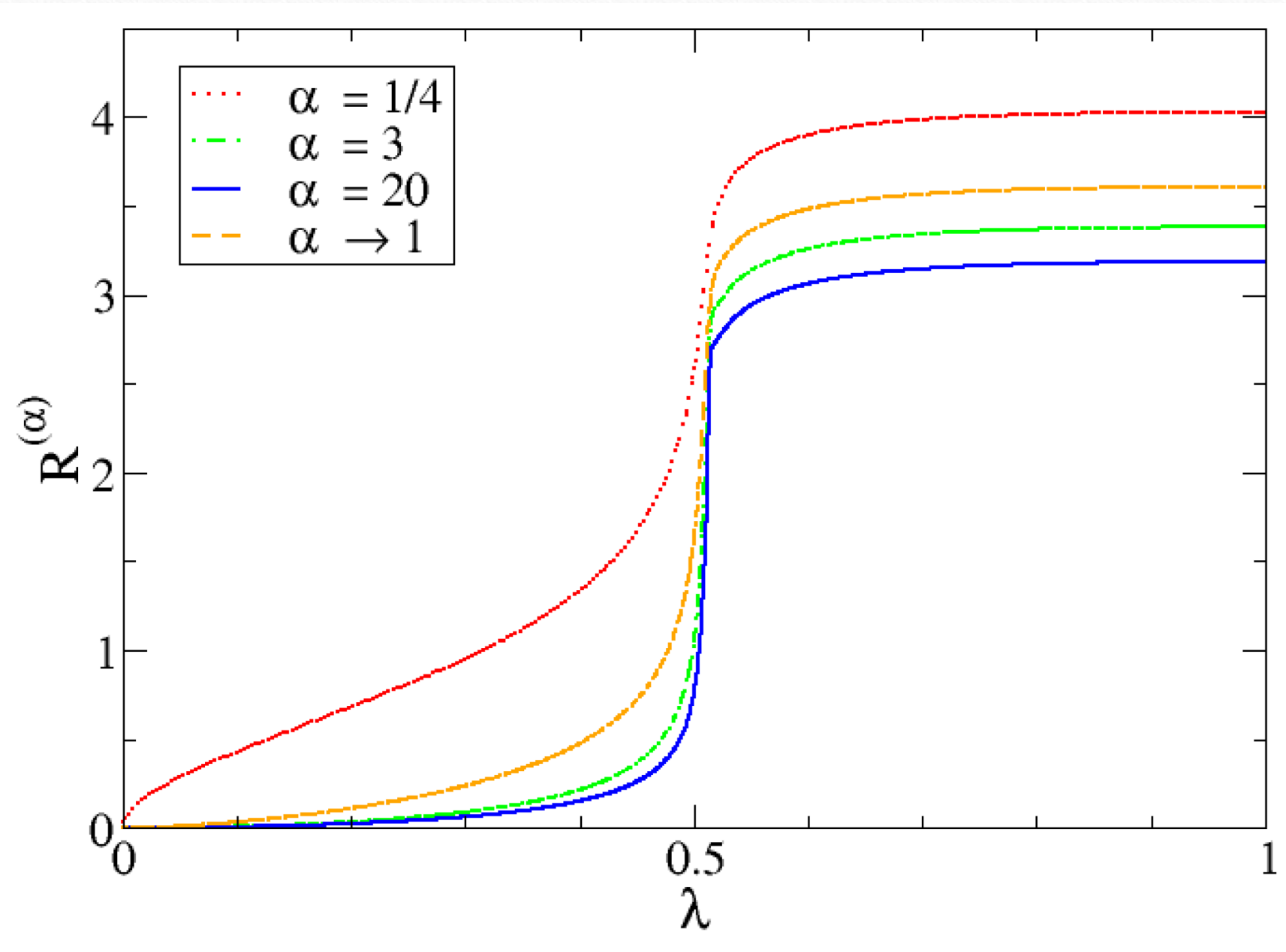


M = 20
M = 100
M = 700
IPR
λ
0
10
20
30
0.5
1


M = 20
M = 100
M = 700
$R^{(1/2)}$
λ


M = 20
M = 100
M = 700
S
λ


M = 20
M = 100
M = 700
$R^{(2)}$
λ


α = 1/4
α = 3
α = 20
α → 1
R^(α)
λ
0
0.5
1
0
1
2
3
4

4. Conclusiones

- ¿Qué hemos hecho?
  - Hemos estudiado un modelo de dos niveles para la coexistencia de átomos y diátomos
    - Evidenciado una TFC
    - Técnicas de campo medio
    - Resolución del problema exacto
- El IPR y la entropía como marcadores

Muchas gracias por vuestra atención

Estoy a vuestra disposición