

Decoherencia y Transiciones de Fase en la Dinámica Cuántica en Sistemas de Espines

por Denise Bendersky

Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía y Física como parte de los requerimientos para obtener el título de Doctor en Física de la UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA



©FaMAF-UNC, Junio de 2016

Director: Horacio Miguel Pastawski



A mi familia.

Agradecimientos

En primer lugar, me gustaría agradecerle a mi director, Horacio, por darme la oportunidad de trabajar junto a él y su grupo, por transmitirme su entusiasmo por la Física y por estar siempre dispuesto a aprender cosas nuevas. Le agradezco por la infinita paciencia que me tuvo a lo largo de estos años y por respetar mis tiempos. Además, por formar un grupo de trabajo compuesto por gente de gran calidad humana.

A CONICET por el apoyo económico. A la Universidad Nacional de Córdoba, en particular al IFEG y a todos sus integrantes.

A Mario Castagnino, por su generosidad y por introducirme con dedicación a los temas que luego continué con Horacio y establecieron las bases de lo que más adelante tomó la forma de esta Tesis.

A Pablo Zangara, por su buena predisposición para ayudarme en todo, su alto grado de compromiso y solidaridad. Todos los temas desarrollados en esta tesis fueron discutidos con él y en todos los casos ha aportado sus ideas.

Gran parte de las simulaciones de espines han sido realizadas en el cluster MENDIETA. Hay un equipo de gente trabajando y ocupándose de la difícil tarea de que todo funcione cuando uno lo quiere utilizar. Por ese motivo, mi agradecimiento hacia ellos. A Axel Dente y Carlos Bederián por adaptar los programas para correr en las placas de video y optimizarlos al máximo. También agradezco a Nicolás Wolowick por su ayuda durante los últimos meses.

A toda la gente del LaNaIS por su buena onda, en especial al grupo de teóricos con los que me tocó trabajar diariamente, Axel, Pablo y Lucas.

A mi familia. A David por elegirme diariamente, por su cariño y comprensión, por hacerme intensamente feliz y por la hermosa familia que estamos construyendo juntos. A Flor y a Clara que llegaron para completar nuestras vidas, por llenarme de felicidad y ternura.

A mis hermanitos, Marcos y Federico, por estar a mi lado en las buenas y en las malas, sé que siempre puedo contar con Uds.

A mi mamá y a mi papá, por su generosidad y empatía, siempre hacen un poco más... Su apoyo incondicional y confianza me permitieron elegir libremente el camino. Gracias por el esfuerzo permanente para que la distancia no se sienta tanto. Esta tesis y, más aún, toda mi carrera, es también de Uds.

A mis tíos, Sarita y Manolo, por su optimismo infinito, son un ejemplo a seguir.

A mis abuelos y a mi tía Nora, que dejaron una fuerte impronta en mi y me enseñaron, con el ejemplo, acerca de valores, compromiso y humildad.

Los amigos siempre están, así que no puedo dejar de agradecerle a Lulu y Lula, Inca, Ariel, Emi, Pablo, Lucas, Eze, Fer, Gaby, Elo, Vir, Leo.

IV

A mi familia cordobesa, marplatense y mexicana, especialmente a mis suegros, a Alhely, a Maite y Soledad.

A los miembros del jurado, por sus valiosas críticas y discusiones, que me resultaron de mucha ayuda.

Resumen

Tal como establece la Segunda Ley de la Termodinámica, los eventos que ocurren en la Naturaleza son esencialmente irreversibles. Esta Tesis constituye una contribución al entendimiento de los mecanismos que conducen a la irreversibilidad.

Mediante técnicas de Resonancia Magnética Nuclear, es posible revertir una dinámica cuántica difusiva en un sistema de espines, cambiando el signo del Hamiltoniano espín-espín. La probabilidad de retornar al estado inicial luego de la reversión se denomina *Eco de Loschmidt (LE)*. La evaluación de este observable permite cuantificar la pérdida de coherencia cuántica o decoherencia, y por consiguiente, la irreversibilidad. Su observación en sistemas de espines sugiere la existencia de un régimen en el que el LE se degrada independientemente de las perturbaciones (conocido como régimen PID). Este podría tratarse de una propiedad emergente en el límite termodinámico bajo la forma de una Transición de Fase en la Dinámica Cuántica (QDPT).

En este trabajo hemos desarrollado y empleado métodos numéricos y analíticos para evaluar la decoherencia en modelos de diversa complejidad, donde podría tener lugar una QDPT. Un posible testigo de esta transición es la conductancia. Así, evaluamos las QDPT en el Modelo D'Amato-Pastawski para un doble punto cuántico interactuando con un ambiente que satisface el límite termodinámico. En este sistema sencillo, evaluamos exitosamente el LE en su rol de testigo dinámico para la QDPT.

El siguiente nivel de complejidad en los casos estudiados corresponde a un cambio de paradigma en el estudio de sistemas cuánticos abiertos. En particular, consideramos cómo la dinámica coherente de un oscilador armónico se degrada en presencia de un sistema de dos niveles (este último haciendo las veces de ambiente). Aquí, el estudio del LE demostró que estados superposición coherentes resultan ser más frágiles frente a perturbaciones en comparación con superposiciones incoherentes.

Finalmente, evaluamos el LE en sistemas de espines precisamente para buscar mecanismos emergentes en el límite termodinámico. El vínculo con sistemas experimentales es más concreto en estos casos. Estudiamos dos modelos con una diferencia conceptual importante respecto al rol del “ambiente”. En el primero de ellos, el sistema es cerrado y las perturbaciones están dadas por interacciones internas no controladas. Allí, mostramos que el sistema hace las veces de su propio ambiente. Más aún, identificamos mecanismos de interacciones efectivas que amplifican las perturbaciones. En el segundo modelo, el sistema de espines está acoplado a un ambiente externo explícito. En particular, consideramos dos cadenas XY que interactúan vía un Hamiltoniano Dipolar. Se observa aquí una escala de decaimiento asintótica independiente de la perturbación. Sin embargo, tal tiempo característico es demasiado

pequeño como para asimilarlo a un PID compatible con el experimental, y la razón que atribuimos radica en la integrabilidad de la cadena aislada.

Palabras Clave

Eco de Loschmidt; Decoherencia; Límite Termodinámico; Regla de Oro de Fermi; Irreversibilidad; Resonancia Magnética Nuclear; Transición de Fase de la Dinámica Cuántica; Dinámica Cuántica de Muchos Cuerpos; Paralelismo Cuántico.

Clasificación (PACS)

03.65.Yz; 05.30.Rt; 05.60.-k; 05.70.Ln; 75.10.Pq

Abstract

The Second Law of Thermodynamics states that events that occur in Nature are essentially irreversible. This thesis constitutes a contribution to the understanding of the mechanisms that lead to irreversibility. Nuclear Magnetic Resonance offers the opportunity to time-reverse the diffusive quantum dynamics in a spin system by changing the sign of its Hamiltonian. The Loschmidt Echo (LE) provides a measure of the revival occurring when an imperfect time-reversal procedure is applied to a complex quantum system. The LE allows to quantify the destruction of quantum coherence –or decoherence–, and thus, irreversibility. There is experimental evidence in spin systems that suggests the existence of a perturbation independent decay (PID). This PID could be an emergent phenomena in the thermodynamic limit, in the form of a Quantum Dynamical Phase Transition (QDPT).

In this work we developed numerical and analytical methods to evaluate decoherence in models of different complexity, in which a QDPT could take place. A possible witness for such a transition is the quantum conductance. Thus, we studied a QDPT in the D’amato-Pastawski model for a double quantum dot interacting with an environment that satisfies the thermodynamic limit. In this simple system, we successfully evaluated the LE, as playing the role of dynamical witness for the QDPT.

The next level of complexity corresponds to a paradigm shift in the study of open quantum systems. In particular, we address how the coherent dynamics of a harmonic oscillator degrades in the presence of a two level system playing the role of the environment. Here, the behaviour of the LE showed that coherent superposition states turned out to be more fragile against perturbations as compared to incoherent superpositions.

Finally, we evaluated the LE in spin systems in order to find emergent mechanisms in the TL. In this cases, the link with experimental systems is more natural. We studied two conceptually different models. In the first one, the system is closed and the perturbation is given by internal non-controlled interactions. In such a case, we showed that the system behaves as its own environment. Moreover, we identified mechanisms of effective interactions that amplify the effect of perturbations. In a second model, the spin system is coupled to an explicit external environment. In particular, we considered two XY rings that interact through a Dipolar Hamiltonian. In this case an intrinsic asymptotic decay rate was observed (i.e. perturbation independent). However, the characteristic time is too small to associate it with the experimental PID, and we attributed this fact to the integrability of the independent rings.

Índice general

Glosario	XIII
Lista de figuras	XV
1. Introducción	1
1.1. La paradoja de la irreversibilidad	2
1.2. El mundo cuántico	2
1.2.1. Sistemas abiertos: El ambiente como fuente de decoherencia	7
1.2.2. Hacia una formulación consistente de la decoherencia intrínseca.	9
1.3. Organización de esta Tesis.	10
1.4. Contribuciones personales originales	12
2. QDPT en el Transporte	15
2.1. Introducción.	15
2.2. QDPT en un Sistema de Dos Niveles	17
2.3. Transiciones de Fase en observables físicos	17
2.4. De lo más simple a lo más complejo	20
2.5. TLS en presencia de un Ambiente	22
2.6. Decoherencia en el transporte electrónico	25
2.6.1. Las ideas de Landauer	25
2.6.2. Fenomenología de la decoherencia en el transporte electrónico	29
2.7. Modelo DP	30
2.8. Conductancias en pozos cuánticos dobles	33
2.8.1. Pozo resonante acoplado a pozo lateral con ambiente quirál	33
2.8.2. Pozo con ambiente quirál acoplado a pozo resonante lateral	36
2.8.3. Pozo resonante acoplado a pozo lateral con ambiente no-quirál	39
2.8.4. Doble pozo resonante con ambiente quirál	40
2.8.5. Doble pozo resonante con ambiente no-quirál	42
2.9. Conclusiones	43
2.10. Apéndice I: Método de decimación	44
2.11. Apéndice II: La Regla de Oro de Fermi	46
2.12. Apéndice III: Formalismo de Keldysh	48
3. Eco de Loschmidt y QDPT	51
3.1. Introducción	51
3.2. El Eco de Loschmidt	52
3.3. Probabilidad de Supervivencia	54

3.4.	Ambiente Markoviano Quiral	54
3.5.	Ambiente no-Markoviano (con memoria)	57
3.5.1.	Cadena <i>tight-binding</i> finita	59
3.6.	Conclusiones	62
4.	Modelo Espín-Bosón o Bosón-Espín?	65
4.1.	Introduction	65
4.2.	El modelo Bosón-Espín	66
4.3.	Estados iniciales	68
4.4.	Loschmidt Echo	69
4.5.	Resultados	71
4.5.1.	La descripción de Landau-Zener	71
4.6.	Decoherencia y <i>fragilidad</i>	75
4.7.	Conclusiones	77
5.	Sistemas de espines	79
5.1.	Introducción.	79
5.2.	LE en sistemas de espines.	80
5.3.	El modelo <i>todos contra todos</i>	83
5.4.	FGR en sistemas de espines.	86
5.5.	Hacia una FGR Efectiva	87
5.6.	Evaluación numérica del LE	89
5.7.	Conclusiones.	92
5.8.	Apéndice I: El sistema de tres niveles.	93
5.8.1.	Teoría de perturbaciones de orden infinito.	93
5.8.2.	Teoría de Hamiltonianos Promedio.	95
6.	Decoherencia en anillos de espines	99
6.0.3.	Introducción	99
6.0.4.	La escalera de espines	100
6.1.	Evaluaciones previas del eco de Loschmidt	102
6.2.	Aumentando el tamaño del sistema	103
6.2.1.	Conclusiones	108
7.	Paralelismo cuántico	109
7.1.	Introducción	109
7.2.	La polarización local y el paralelismo cuántico	110
7.3.	Polarización global y paralelismo cuántico.	111
7.4.	Comentarios acerca de la Física	113
7.5.	Simulaciones numéricas	114
7.5.1.	Caso 1. Reversionando el eco de Loschmidt	114
7.5.2.	Caso 2. Coherencias múltiples	116
7.6.	Conclusión	121
8.	Comentarios Finales	123
8.1.	Conclusiones	123
8.2.	Perspectivas futuras	127

Glosario

DQ: Cuantos Dobles

DP: D'Amato-Pastawski

FGR: Regla de Oro de Fermi

GF: Función de Green

GLBE: Ecuaciones Generalizadas de Landauer-Büttiker

HO: Oscilador Armónico

JWT: Transformación de Jordan-Wigner

LDOS: Densidad Local de Estados

LE: Eco de Loschmidt

LZ: Landau-Zener

MQC: Coherencias entre Cuantos Múltiplos

NMR: Nuclear Magnetic Resonance

PID: Decaimiento Independiente de Perturbaciones

QDPT: Transición de Fase en la Dinámica Cuántica

SBM: Modelo Espín-Bosoón

SC-FGR: Regla de Oro de Fermi autoconsistente

SP: Probabilidad de Supervivencia

TL: Límite Termodinámico

TLS: Sistema de Dos Niveles

RMT: Teoría de Matrices Aleatorias

Índice de figuras

1.1. Comportamiento de una excitación que se propaga en una cadena de 5 espines.	5
1.2. Valores experimentales de la tasa de decaimiento del LE como función de la tasa característica de la perturbación.	6
1.3. Tasa de decaimiento y frecuencia de oscilación en un experimento de polarización cruzada.	9
2.1. Representación de las partes real e imaginaria de los polos de la GF. .	18
2.2. Representación pictórica de la transformación de Jordan-Wigner entre sistemas de espines y partículas fermiónicas no-interactuantes.	21
2.3. Probabilidad de supervivencia de un estado inicial en función del tiempo para el TLS aislado y perturbado	24
2.4. Representación pictórica de un conductor ideal conectado a dos reservorios.	26
2.5. Representación pictórica del sistema considerado por Fisher y Lee. .	29
2.6. Transmitancia efectiva en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para un pozo resonante acoplado a pozo lateral con ambiente quiral	34
2.7. Transmitancia coherente o directa en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para un pozo con ambiente quiral acoplado a pozo resonante lateral	37
2.8. Transmitancia efectiva en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para un pozo con ambiente quiral acoplado a pozo resonante lateral.	38
2.9. Transmitancia directa y efectiva en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para un pozo resonante acoplado a pozo lateral con ambiente no-quiral.	39
2.10. Transmitancia coherente para e un doble pozo resonante con ambiente quiral.	41
2.11. Transmitancia efectiva en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para un doble pozo resonante con ambiente quiral. . .	42
2.12. Transmitancia efectiva en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para un doble pozo resonante con ambiente no-quiral. .	43
2.13. Representación pictórica de los niveles de energía del sistema y del ambiente en la descripción FGR.	47
3.1. Evolución del LE, la SP, la tasa de decaimiento del LE y su valor medio. .	55

3.2.	Imagen pictórica de la evolución de una excitación en un TLS.	56
3.3.	Comportamiento de la tasa de decaimiento del LE como función del tiempo y de la intensidad del acoplamiento con el ambiente	58
3.4.	Tasa de decaimiento del LE y parte imaginaria de los polos de la GF para un ambiente Markoviano.	59
3.5.	Ilustración de la Probabilidad de Supervivencia de una excitación localizada inicialmente en un sitio de TLS.	60
3.6.	Parte imaginaria de los polos físicos correspondientes al TLS acoplado a una cadena semi-infinita de enlaces fuertes con acoplamientos a primeros vecinos.	62
3.7.	Tasa de decaimiento del LE y parte imaginaria de los polos de la GF para un ambiente no-Markoviano.	63
4.1.	Representación del modelo Espín-Bosón en el espacio de Fock y en términos de la coordenada canónica del HO.	67
4.2.	Evolución perturbada y no-perturbada del estado inicial semiclásico y del no-local con la misma energía en función de la coordenada armónica.	69
4.3.	Eco de Loschmidt de un estado inicial semiclásico.	72
4.4.	Comparación entre el LE evaluado en la primera caída y la probabilidad de LZ, para diferentes energías de los paquetes de ondas.	73
4.5.	Comportamiento del LE correspondiente a un estado inicial no-local y a una mezcla incoherente.	76
4.6.	$\Delta\bar{M}$ como función de ΔE	77
5.1.	Representación pictórica de la evolución de una excitación local y posterior reversión.	81
5.2.	Representación pictórica de la LDOS del Hamiltoniano $\hat{H}_{dip} + \hat{H}_Z$	85
5.3.	Dependencia temporal del LE para distintos valores de $(J^{dq})^2/(\hbar\omega_1)$	89
5.4.	Asíntota del LE $M_{1,1}(t \rightarrow \infty)$ en función de $(J^{dq})^2/(\hbar\omega_1)$	90
5.5.	Tasas de decaimiento $1/\tau_\phi$ del LE en función de la perturbación efectiva $\Sigma_{eff} = (J^{dq})^2/(\hbar\omega)$	91
6.1.	El sistema de espines considerado: Modelo de anillos.	100
6.2.	El LE local en función del tiempo de evolución para dos anillo de 5 espines acoplados	103
6.3.	Tasas de decaimiento del LE para acoples intercadena de tipo XY, Ising y Dipolar.	104
6.4.	LE local como función del tiempo total para diferentes tamaños del sistema.	105
6.5.	Comportamiento del LE local como función del tiempo total, distinguiendo los sistemas en los que cada anillo posee un número par o impar de espines.	106
6.6.	Tasas de decaimiento del LE en función del cuadrado del acoplamiento inter-cadena.	107

7.1. Polarización total como función del tiempo t para un sistema de $N = 12$ espines, mediante el cálculo exacto y el cálculo mediante el estado entrelazado.	115
7.2. Polarización total como función del tiempo t , para un sistema de $N = 25$ espines.	116
7.3. Polarización total como función del tiempo, de acuerdo con una evolución hacia adelante.	118
7.4. Polarización total como función del tiempo, para diferentes rotaciones.	119
7.5. Coherencias entre Cuantos Múltiplos de orden 0 y 2 para la hidroxipatita.	120

Capítulo 1

Introducción

Durante muchos años, se han propuesto diferentes ideas acerca de cómo explicar la obvia irreversibilidad que manifiestan los procesos que ocurren en la Naturaleza y que se sintetizan en la Ley Termodinámica de Crecimiento de la Entropía o desorden. En efecto, ésta entra en contradicción con la reversibilidad microscópica de las ecuaciones más fundamentales de la Mecánica y el Electromagnetismo. Nuestra experiencia cotidiana está en concordancia con dicha irreversibilidad. El sentido común nos permite imaginar cómo una gota de tinta se difundirá en un vaso de agua, pero difícilmente concebimos que el agua entintada evolucione de tal manera que se forme una única gota de tinta en la superficie. Por ello, surgen los interrogantes de por qué debería ser imposible observar la evolución inversa si las leyes fundamentales de la Física son simétricas con el tiempo? Cómo se puede reconciliar la dinámica reversible de átomos y moléculas con el comportamiento irreversible que observamos en el mundo macroscópico, compuesto por esos mismos átomos y moléculas?

Ya hace más de un siglo que, con el objeto de describir cómo los sistemas macroscópicos evolucionan irreversiblemente hacia el equilibrio, Ludwig Boltzmann sentó las bases de la teoría microscópica de la Segunda Ley de la Termodinámica. Boltzmann discutió acerca de cómo la irreversibilidad *emerge* de las leyes reversibles de la Mecánica. Mediante la formulación de su *teorema H* intentó reconciliar el comportamiento microscópico y el macroscópico. En su descripción inicial, el ingrediente esencial fue considerar que hay ciertos procesos dinámicos, las colisiones entre moléculas, que no pueden ser revertidos, es decir que luego de cada colisión no se preserva memoria o correlación del estado previo. Esto constituye su hipótesis de caos molecular, o *stosszhalansatz*, fundamental para su demostración. La consecuencia inmediata es una dinámica irreversible que determina una dirección temporal, definiendo así una flecha del tiempo bien definida. Al proponer que el resultado de una colisión es aleatorio, Boltzmann fue el primero en introducir el concepto de probabilidad en las leyes de la Física. Según Lebowitz [Leb93]:

Dado el éxito del enfoque estadístico de Boltzmann < ... > Resulta sorprendente que haya aún tanta confusión sobre el problema de la irreversibilidad. Atribuyo esta confusión a la originalidad de las ideas de Boltzmann: Fueron difíciles de entender para algunos de sus contemporáneos.

1.1. La paradoja de la irreversibilidad

En ese tiempo, Joseph Loschmidt señaló una aparente paradoja, basada en el hecho de que la simetría temporal de la Mecánica Clásica excluiría la irreversibilidad macroscópica. Loschmidt argumentó que las trayectorias individuales son deterministas, y que *por cada trayectoria colectiva que lleva al sistema a su estado de equilibrio, existe otra, igualmente posible, que lleva al sistema nuevamente al estado inicial de baja entropía*. Así, la Segunda Ley perdería su validez, ya que existirían procesos que evolucionan estados de alta entropía hacia otros de entropía más baja. Bastaría tomar el sistema de partículas que colisionan, considerado por Boltzmann en su descripción, y revertir las velocidades de todas ellas para que el sistema regrese al estado inicial de menor entropía.

Como respuesta, Boltzmann hizo algunas mejoras en su teoría, transformando su descripción probabilística en términos de la ocupación del espacio de fases. Boltzmann estableció una conexión directa entre cantidades definidas microscópicas y propiedades extensivas, macroscópicas y medibles de los sistemas macroscópicos en equilibrio. En consecuencia, la irreversibilidad emerge en la transición entre el dominio microscópico y el macroscópico.

Boltzmann hizo hincapié en la imposibilidad práctica de lograr la reversión temporal propuesta por Loschmidt, respondiendo: “*es Ud. el que invertirá las velocidades*”. La interpretación probabilística de Boltzmann constituye la base de la Mecánica Estadística moderna, una teoría con un éxito incuestionable [Leb93, Leb99].

La actual teoría del Caos en la Mecánica Clásica afirma que, en la mayoría de las situaciones de interés práctico, el volumen sobre el que se sustenta el espacio de fases es exponencialmente grande. Esto se debe a que cada una de las colisiones microscópicas tiende a ser *inestables* y, por lo tanto, amplifica exponencialmente las incertidumbres o errores de las partículas involucradas. Así, clásicamente, el caos se define como esa sensibilidad exponencial de las trayectorias a mínimos cambios en las condiciones iniciales. En el espacio de fases, la distancia d entre las trayectorias que corresponden a dos condiciones iniciales cuya distancia d_0 es muy pequeña aumenta exponencialmente a un ritmo $d_t = d_0 \exp(\lambda t)$, donde la tasa λ recibe el nombre de exponente de Lyapunov.

Por lo visto hasta aquí, el conflicto entre Boltzmann y Loschmidt pareciera resuelto en el campo de la Física Clásica. Sin embargo, la discusión sobre el origen de la irreversibilidad aún está abierta dado que la teoría apropiada para describir el comportamiento microscópico de la materia es la Mecánica Cuántica.

1.2. El mundo cuántico

En el dominio cuántico, la evolución hacia el equilibrio aún genera intensas controversias [PSSV11, GLTZ10, BCH11, EFG14, NH14], dado que cualquier sistema cuántico cerrado y finito involucra un espectro de energía discreto. En consecuencia, su evolución en el espacio de Hilbert es cuasi-periódica, es decir que está sujeta a recurrencias, del tipo sugeridas originalmente por Poincaré para sistemas mecánicos, e invocadas por Zermelo para debilitar los argumentos de Boltzmann.

En la Mecánica Cuántica, la descripción de los procesos irreversibles es una tarea compleja. Los estados de un sistema cuántico evolucionan de acuerdo con la ecuación determinista de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_0\rangle = \hat{H} |\psi_0\rangle. \quad (1.1)$$

Al igual que en la Mecánica Clásica, dado un estado inicial $|\psi_0\rangle$ y el Hamiltoniano \hat{H} que rige su evolución, es posible determinar el estado del sistema en todo tiempo a partir de la Ec. (1.1). Además, el solapamiento (*overlap*) entre dos funciones de onda, que es una medida natural de la distancia entre ellas, se conserva en el tiempo, es decir

$$\begin{aligned} \langle \psi_1(t) | \psi_0(t) \rangle &= \langle \psi_1 | \exp[i\hat{H}t/\hbar] \exp[-i\hat{H}t/\hbar] | \psi_0 \rangle \\ &\equiv \langle \psi_1 | \psi_0 \rangle \end{aligned}$$

Este hecho, que surge como consecuencia de la unitariedad de la Ec. (1.1), implica la reversibilidad de la dinámica. Por lo dicho, hay al menos dos cuestiones que han suscitado una atención especial en las últimas décadas. Por un lado, y en analogía con su contraparte clásica, la compatibilidad entre la simetría de reversión temporal de la Mecánica Cuántica y la flecha del tiempo inherente de los procesos irreversibles aún no ha sido claramente establecida [HPMZ96]. Por otra parte, la definición del Caos Clásico, ya implícita en los argumentos de Boltzmann, no puede extenderse directamente a la Mecánica Cuántica. Así, resultó necesario establecer una caracterización que resultara válida para sistemas cuánticos cuya contraparte clásica es caótica [JP01].

Los límites reales de la invariancia de la reversión temporal y la emergencia de la irreversibilidad han sido probados experimentalmente desde las primeras etapas de la Resonancia Magnética Nuclear (NMR por sus siglas en inglés: *Nuclear Magnetic Resonance*) [Hah50, RPW70, RPW71, WRP72, ZME92]. En efecto, la NMR ofrece la oportunidad de manipular la dinámica de conjuntos de momentos magnéticos individuales, los *espines* nucleares: Se prepara al sistema en un estado de equilibrio, se lo conduce fuera de equilibrio mediante un pulso de radiofrecuencia y éste evoluciona cuánticamente tendiendo a cierta “equilibración” durante un determinado tiempo. Luego, se revierte su dinámica consiguiéndose una considerable recuperación el estado de no-equilibrio. Recordemos que cada espín del núcleo es una magnitud binaria que tiene una polarización magnética con dos posibles orientaciones. Para enfatizar la correspondencia con el gas considerado por Boltzmann, podemos pensar que la orientación *hacia arriba* indica la presencia de una partícula cuántica y el estado *hacia abajo* representa su ausencia. Esta analogía, a veces denominada “gas en la red” tiene una formulación matemática precisa, que se discutirá más adelante. En ese sentido, un estado de polarización local es equivalente a un exceso en la concentración de partículas.

El primer experimento de reversión en NMR fue realizado en 1950 por Erwin Hahn [Hah50]. El procedimiento, conocido como *eco de espín*, consistió en revertir la dinámica de precesión de cada uno de los espines alrededor del campo magnético local. Esto se logra al invertir el signo de la energía Zeeman efectiva. Como no se invierten las interacciones espín-espín, el eco observado decae como función de la

demora en aplicar la reversión. La escala temporal T_2 de este decaimiento, caracteriza la difusión debida a las interacciones espín-espín (no revertidas).

Unos 20 años más tarde, Kessemeier y Rhim y luego Rhim, Pines y Waugh, en un experimento que se denominó *eco mágico*, lograron revertir la dinámica inducida por la interacción Dipolar (espín-espín) [RPW71, RK71]. En este caso, se invierte la interacción de muchos cuerpos induciendo una rotación simultánea de 90° de los 10^{22} dipolos interactuantes. Así, desde una configuración en la que se alternan aleatoriamente entre paralelo y anti-paralelo al campo externo, se pasa hacia otra donde los dipolos están alineados y anti-alineados en el plano perpendicular al campo, o viceversa. Ya en un arreglo de momentos magnéticos clásicos, esta rotación invierte los signos de las energías parciales y totales asociadas con la configuración de dipolos. Estas interacciones resultan en la degradación de la polarización total (pequeño exceso en una de las orientaciones), que no se conserva cuando yace en el plano perpendicular al campo externo. En este experimento, una fuerte señal de inducción electromagnética se detecta cuando la polarización colectiva (o *global*) se recupera, como consecuencia del procedimiento descrito.

Otras dos décadas después, en 1992, el grupo de Ernst [ZME92] fue capaz de observar el comportamiento de una *excitación local* sobre un cristal molecular de ferroceno. En su experimento, una polarización local inicial, orientada según el campo magnético efectivo, es inyectada desde un núcleo poco abundante, concretamente un ^{13}C , y se redistribuye en la red de ^1H , sin degradar su magnitud. Al revertir esta dinámica “difusiva”, es posible observar *localmente* su retorno hacia los mismos núcleos ^{13}C desde los cuales se había inyectado la polarización. Aquí, la irreversibilidad surge como una limitación para recuperar el estado inicial y, en principio, podría asociarse a parámetros dinámicos que no son controlados con precisión suficiente, ya sean grados de libertad internos o del ambiente, o bien no-idealidad de la secuencia de pulsos.

Una novedad, que surgió a partir de este último experimento, es que al describir una cantidad conservada (la magnetización) puede establecerse una analogía con la densidad de una función de onda. Esta analogía se vuelve una correspondencia precisa mediante la transformación de Jordan-Wigner (JWT por sus siglas en inglés: *Jordan-Wigner Transformation*) entre espines y partículas fermiónicas sin espín. En particular, cuando la interacción se limita a los procesos de intercambio entre primeros vecinos de una cadena lineal, los fermiones resultan no-interactuantes y entonces la polarización es *exactamente igual* al módulo de una función de onda. Ernst y colaboradores diseñaron experimentos con la finalidad de probar lo antedicho, como puede observarse en la Fig. 1.1, extraída de su artículo [MBSH⁺97]. Allí se muestra cómo la excitación se propaga en una cadena de 5 espines interactuantes y se puede apreciar la reflexión que ocurre en los extremos y que, según la mencionada predicción de Poincaré, dan lugar a una recurrencia denominada Eco Mesoscópico [JP01].

Inspirados en estas ideas, Pastawski y colaboradores definieron el Eco de Loschmidt (LE por sus siglas en inglés: *Loschmidt Echo*) [LUP98, JP01] como el resurgimiento que ocurre al aplicar un procedimiento de reversión temporal a una evolución cuántica [JP09, WGJP12]. El nombre se refiere a su conexión con el experimento ideal propuesto por Loschmidt para refrendar su argumento en contra del teorema

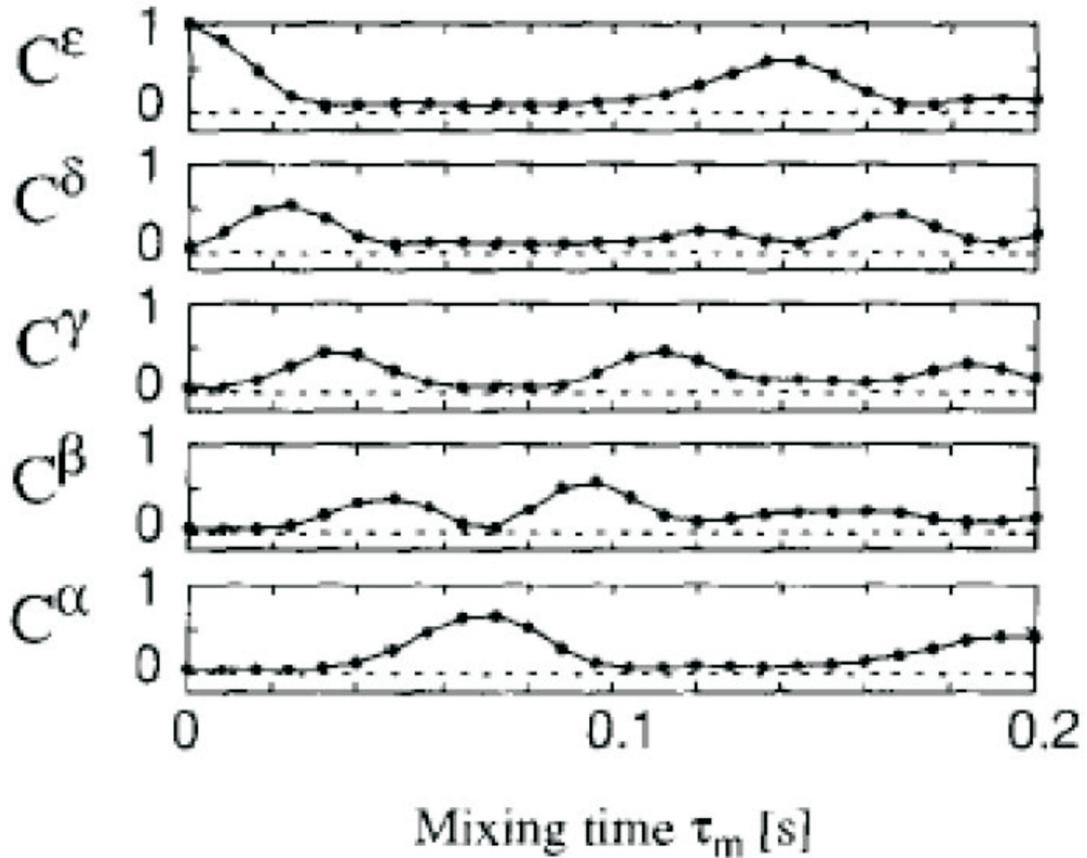


Figura 1.1: Comportamiento de una excitación que se propaga en una cadena de 5 espines. Adaptado de la Ref. [MBSH+97].

H de Boltzmann. En consonancia con la descripción convencional de la decoherencia en sistemas cuánticos abiertos [CDPZ03b, PJ06, ZDLP12], la presencia de grados de libertad no controlados degrada el LE.

En las condiciones de la cadena lineal de espines estudiada por Ernst y colaboradores, el LE podría ser escrito como:

$$M(2t_R) = \left| \langle \psi_0 | \exp[i\hat{H}_{(-)}t_R/\hbar] \exp[-i\hat{H}_{(+)}t_R/\hbar] | \psi_0 \rangle \right|^2, \quad (1.2)$$

donde

$$\hat{H}_{(\pm)} = \hat{H}_0 \pm \hat{\Sigma}, \quad (1.3)$$

son Hamiltonianos que sólo difieren en un término perturbativo $\hat{\Sigma}$. Al igual que en los experimentos de NMR descritos, se prepara al sistema en un estado inicial de no-equilibrio, se deja que evolucione durante un tiempo t_R y luego se revierte su dinámica para que arribe nuevamente hacia el estado de no-equilibrio inicial al instante $2t_R$. La irreversibilidad se pone de manifiesto en la degradación del LE con t_R . En este contexto, la hipótesis más obvia para explicar la atenuación del LE observada en los experimentos, sería la limitación para controlar precisamente todos los parámetros dinámicos del sistema, contenida en $\hat{\Sigma}$. Sin embargo, estudios

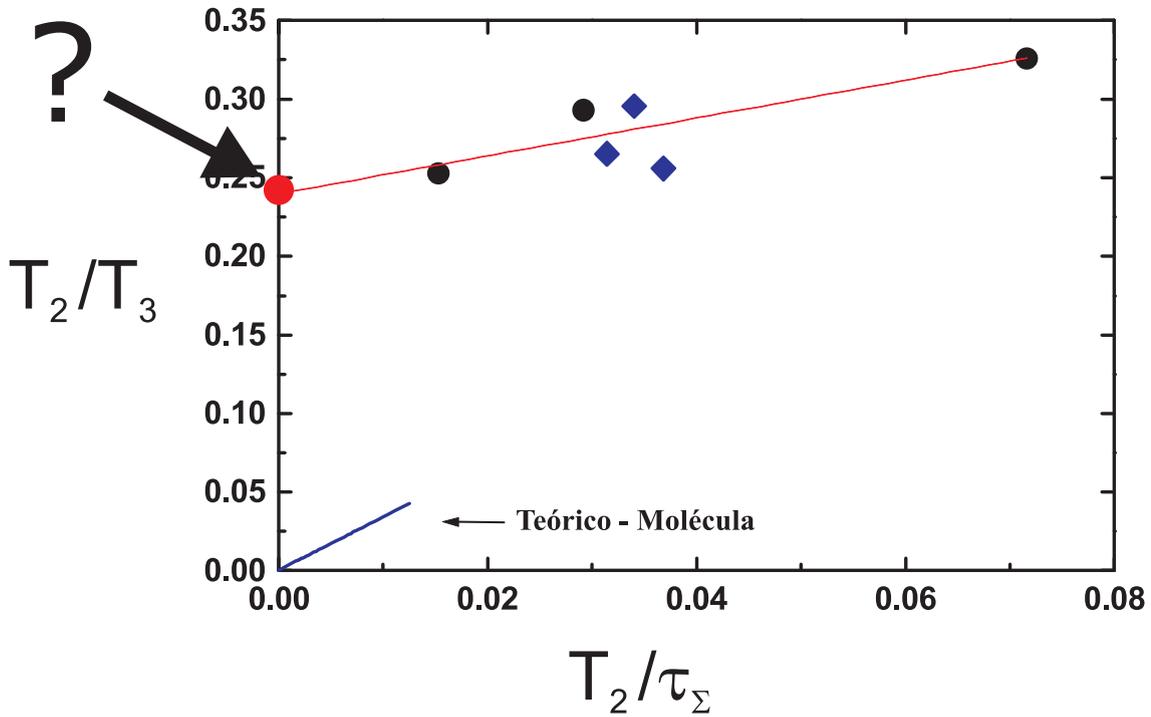


Figura 1.2: Valores experimentales de la tasa de decaimiento $1/T_3$ del LE como función de la tasa característica de la perturbación $1/\tau_\Sigma$. Ambas cantidades se multiplican por la escala de tiempo T_2 , que corresponde a las interacciones reversibles. Adaptado de la Ref. [Usa99].

posteriores mostraron que la tasa de decaimiento excede las estimaciones razonables de estos errores, y no resulta demasiado dependiente de estos.

En efecto, la evidencia experimental recolectada en Córdoba muestra que en sistemas con suficiente complejidad interna, aún cuando las posibles perturbaciones sean mínimas, el LE se degrada rápidamente, con una escala de decaimiento que parece ser controlada por \hat{H}_0 , es decir, intrínseca. Sorprendentemente, esta escala de decaimiento no está asociada a la que determina la perturbación, τ_Σ , como podría esperarse, sino que aparece asociada a la dinámica revertida, digamos T_3 , siendo que $T_3 \simeq 4T_2 \ll \tau_\Sigma$. En otras palabras, estaríamos frente a un decaimiento independiente de perturbaciones (PID por sus siglas en inglés: *Perturbation Independent Decay*) [PLU+00, UPL98], que revelaría cómo dicha complejidad conduce a la irreversibilidad. Si fuera confirmada, esta observación tendría implicaciones profundas tanto en los aspectos fundamentales que hemos discutido, como en situaciones prácticas, como el grado de controlabilidad de dispositivos cuánticos.

El comportamiento asintótico del solapamiento entre dos estados que evolucionan en presencia de pequeñas perturbaciones difiere según se trate de sistemas cuya versión clásica es integrable o caótica. Esto se muestra en un artículo de Peres [Per84], reproducido también en la Ref. [Haa13]. Peres observó que para $t_R \gg 1$, $M(2t_R)$ se mantiene cercano a la unidad en el caso regular y alcanza un valor reducido, asociado con el solapamiento de funciones de onda estocásticas, cuando el Hamiltoniano

clásico correspondiente es caótico.

Desde un punto de vista matemático, la definición del LE permite estudiar la sensibilidad extrema ante pequeñas perturbaciones en la dinámica, en lugar del usual estudio de la sensibilidad ante pequeñas perturbaciones en las condiciones iniciales. Esto resultaría en un criterio alternativo para evaluar los efectos del Caos en la Mecánica Cuántica. La sensibilidad ante perturbaciones en la dinámica pudo ser cuantificada finalmente mediante el decaimiento del LE por Jalabert y Pastawski [JP01]. Estos autores establecieron que, para un sistema clásicamente caótico, y en tanto la perturbación exceda cierto umbral, el LE decae con una tasa igual al exponente de Lyapunov del sistema clásico,

$$M(2t_R) \simeq \exp[-\gamma 2t_R], \quad \gamma = \min[1/\tau_\Sigma, \lambda]$$

Una perturbación muy pequeña, produciría un decaimiento del eco en una escala determinada por la Regla de Oro de Fermi (FGR por sus siglas en inglés: *Fermi Golden Rule*):

$$1/\tau_\Sigma = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \hat{\Sigma} \right|^2 N_1(\varepsilon).$$

Aquí $N_1(\varepsilon)$ describe la densidad de autoestados del Hamiltoniano directamente conectados por la perturbación. Es decir, si la perturbación excede cierto valor crítico, el LE está controlado por el exponente de Lyapunov clásico. Por lo expuesto, el LE parece ser una herramienta poderosa para capturar la física fundamental de los sistemas cuánticos cuyo análogo clásico es caótico [WGJP12] con la ventaja adicional de que también resulta aplicable a la Mecánica Clásica.

1.2.1. Sistemas abiertos: El ambiente como fuente de decoherencia

Hemos mencionado que en un sistema finito cerrado una dinámica en el espacio de Hilbert es unitaria, e incluso recurrente en el sentido de Poincaré, y, por consiguiente, reversible. Pareciera que la única forma de introducir un comportamiento irreversible en un sistema finito \mathcal{S} es remover la restricción de sistema cerrado, considerando dinámicas no-Hamiltonianas. Una forma de hacerlo es postular una interacción entre \mathcal{S} y un reservorio \mathcal{E} , como un baño o un instrumento de medición. Como consecuencia, surge una escala de irreversibilidad, a través de la FGR

$$1/\tau_{\mathcal{S}\mathcal{E}} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\mathcal{S}\mathcal{E}}|^2 N_{1\mathcal{E}},$$

como resultado de este acople con un gran número de grados de libertad externos sobre los cuales no se tiene control [Lin76]. Como los sistemas macroscópicos nunca están aislados de su entorno, la Ec. (1.1) queda expresada en términos de un Hamiltoniano no-Hermítico. Como consecuencia, la norma de un estado se pierde [Zur81, Zur82], limitando progresivamente una descripción que se limite a considerar sólo la dinámica de \mathcal{S} . El proceso resultante se conoce como *decoherencia*. Lo interesante de este enfoque es que enfatiza el rol del ambiente, el cual aparece inevitablemente debido a que la evolución unitaria de la Mecánica Cuántica establece

progresivas correlaciones y entrelazamiento entre las variables de \mathcal{S} y de \mathcal{E} . Así, la estrategia usual para abordar tanto procesos de decoherencia como de disipación de energía, consiste en definir un sistema simple \mathcal{S} cuya dinámica se vuelve no-unitaria debido a la interacción con un ambiente \mathcal{E} complejo [PB02, Sch07]. En este contexto, los observables pasan a ser descritos mediante una Ecuación Maestra Cuántica, que preserva la positividad en caso de poder expresarse como forma de Lindblad.

En el contexto de la decoherencia en sistemas abiertos, la dinámica de \mathcal{S} sufre alguna forma de degradación debido a la interacción con \mathcal{E} . El gráfico 1.2 sugiere, sin embargo, que un ambiente podría originar un cambio más drástico. En efecto, si consideramos que $1/\tau_{\Sigma}$ representa un acoplamiento con un ambiente, vemos que su reducción mantiene una irreversibilidad finita. Esto es muy diferente a lo que se observaría en un sistema finito (como una molécula). Es decir, sugiere que la interacción con el ambiente podría producir discontinuidades analíticas en un dado observable.

Una remarcable evidencia de que la interacción con un reservorio \mathcal{E} puede producir una discontinuidad analítica en un observable, lo constituye el experimento de polarización cruzada entre ^{13}C y ^1H en NMR, hecho por P. R. Levstein, G. Usaj y H. M. Pastawski [LUP98]. En este experimento, se observa un cambio drástico en el comportamiento de la frecuencia de oscilación y en la tasa de relajación cuando la interacción alcanza un valor crítico. Este fenómeno, que se muestra en la Fig. 1.3, motivó un análisis más profundo, ya que la divergencia en el período de oscilación a partir de una dada intensidad del parámetro de control es un indicativo de una no-analiticidad del observable [ÁDLP06]. Es decir, tiene las características de un fenómeno crítico. Típicamente, cuando un sistema \mathcal{S} está en contacto con un reservorio \mathcal{E} , éste último perturba al sistema, degradando suavemente las interferencias dinámicas, con una tasa de decoherencia $1/\tau_{\phi}$, que es proporcional a la interacción con el ambiente $1/\tau_{S\mathcal{E}}$. Sin embargo, cuando las interacciones con \mathcal{E} son más fuertes, la respuesta del sistema puede cambiar radicalmente. En general, esto se vincula al hecho de que el número N de grados de libertad del ambiente puede considerarse infinito. Este tipo de transiciones serán discutidas a lo largo de esta Tesis. Partiendo de modelos simples que poseen soluciones analíticas exactas, avanzaremos hacia descripciones más complejas de estos sistemas de espines, que requieren de cálculos numéricos.

En consonancia con estos hallazgos, se produjo un cambio de paradigma que ha recibido gran atención últimamente [HPK13, AKOS14] y se conoce como transición de fase en la dinámica cuántica (QDPT por sus siglas en inglés: *Quantum Dynamical Phase Transition*). Tal como las transiciones de fase de equilibrio estándar, una QDPT resulta posible porque el sistema fuera del equilibrio evoluciona en el límite termodinámico (TL por sus siglas en inglés: *Thermodynamic Limit*) de infinitos grados de libertad, en este caso, del ambiente. Luego, es posible que alguna variable o magnitud dinámica que presentará un comportamiento no-analítico [Sac11]. En el caso de la irreversibilidad, pareciera que el LE constituye un observable o testigo dinámico que brinda detalles de una transición de fase, desde una decoherencia controlada por la perturbación a una decoherencia intrínseca (para el caso de un partícula), o incluso de una dinámica reversible que en TL se transforma en una dinámica irreversible.

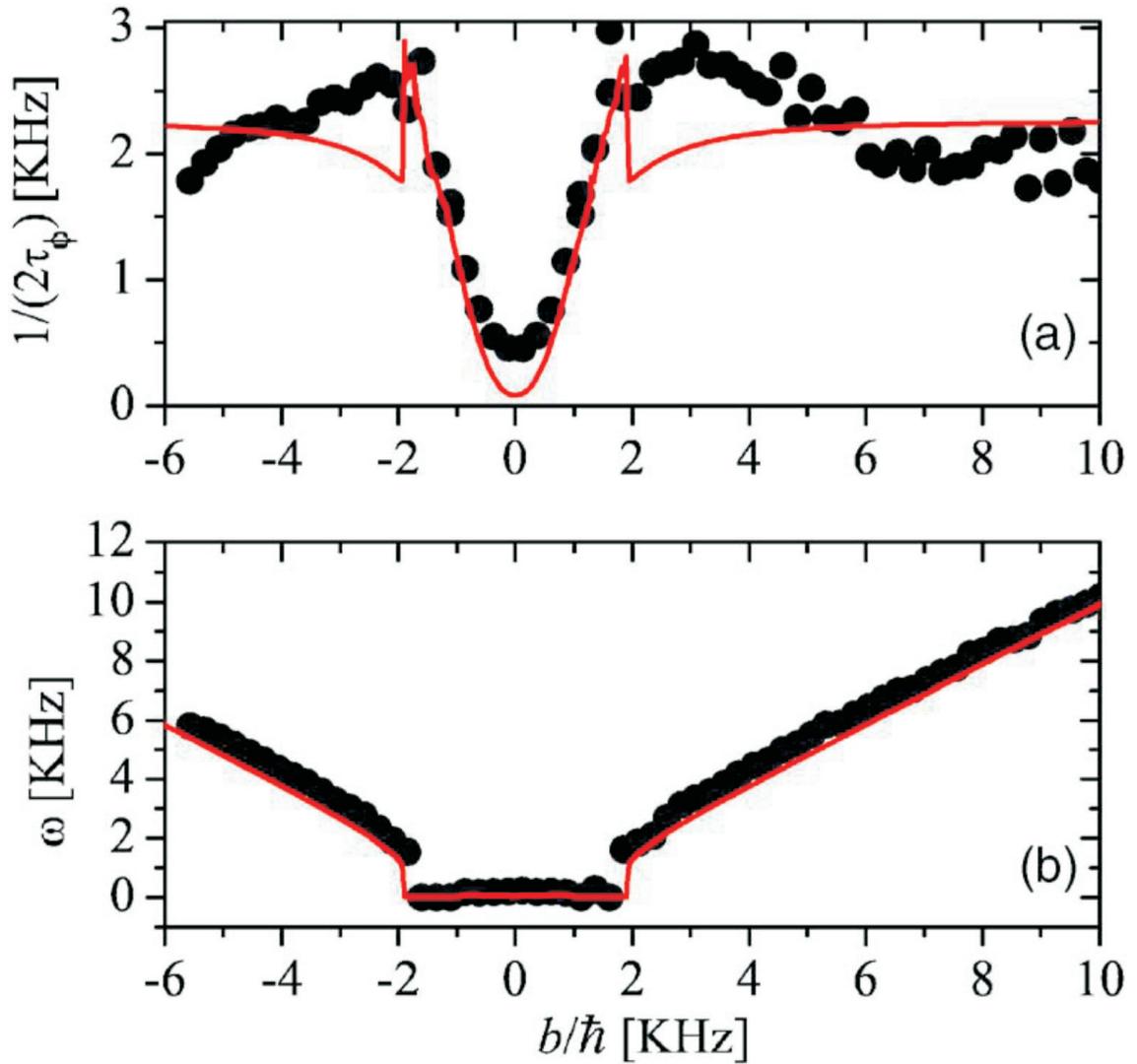


Figura 1.3: Tasa de decaimiento $1/2\tau_\phi$ y frecuencia ω de oscilación en un experimento de polarización cruzada entre ^{13}C y ^1H . Adaptado de la Ref. [LUP98].

1.2.2. Hacia una formulación consistente de la decoherencia intrínseca.

En 1925, Werner Heisenberg formuló una de las relaciones más celebradas de la Mecánica Cuántica, su principio de incertidumbre. Éste establece que el producto de las incertezas de la posición y el momento no pueden ser menores que el límite impuesto por la constante de Planck, $\hbar/2$. Suele pensarse que esto implica que no son posibles estructuras del espacio de fases asociadas a escalas sub-Planck ($\ll \hbar$) [Zur01]. Por este motivo, no ha sido fácil aceptar que puedan desarrollarse estructuras de escala sub-Planck a partir de la evolución cuántica de una función de onda suave. Y aún aceptando que éstas existan, a partir del principio de incertidumbre, podríamos asumir que no poseerán consecuencias observables [JAB02]. Entonces, en principio, ignoraríamos las estructuras sub-Planck ya que serían un artefacto de la

representación de la matriz densidad en el espacio de fases (función de Wigner), pero sin contenido físico alguno. Sin embargo, es particularmente interesante la afirmación de Zurek [Zur01], según la cual las estructuras de escala sub-Planck en la función de Wigner manifiestan sensibilidad de un estado cuántico frente a perturbaciones. Esta observación debería ser equivalente a la demostración de Jalabert y Pastawski [JP01], de que la complejidad propia de un determinado sistema determina la escala de decoherencia. Éste fue efectivamente el resultado que puede encontrarse en la Ref. [CPJ04], convalidado en la Ref. [CDPZ03a]. Es más, en los sistemas clásicamente caóticos, la dinámica conduce a superposiciones altamente no-locales, que ya han sido relacionadas con las estructuras de escala sub-Planck y que promueven la decoherencia [JAB02, KJZ02]. En suma, este planteo es fundamentalmente diferente a la concepción usualmente aceptada de decoherencia inducida por el ambiente. En este nuevo enfoque el rol principal lo tendría la complejidad interna del sistema, y no la del ambiente.

Un resultado asombroso *sugerido por los experimentos* es que, aún en presencia de perturbaciones infinitesimales, los sistemas caóticos de muchos cuerpos pueden volverse su propio ambiente [PLU+00]. Cuando se grafica la tasa de decaimiento $1/T_3$ en función de la intensidad del término no revertido, se observa que ésta satura en un valor finito [Usa99], que es aproximadamente $T_3 \sim 4T_2$, como puede verse en la Fig. 1.2. Si uno pensara que la decoherencia sólo surge como consecuencia de la interacción con un ambiente, entonces esperaríamos que a perturbación nula la curva se vaya a cero, pero esto no ocurre. En el límite de perturbación nula, T_3 parece ligado a la escala de tiempo que caracteriza a la interacción revertida. En esta observación se basa la *hipótesis central de irreversibilidad*, que es la idea principal sostenida por el grupo de Córdoba y que está presente a lo largo de esta Tesis. Según esta hipótesis, la dinámica cuántica de un sistema de muchos cuerpos es altamente inestable y su propia complejidad amplifica el efecto de cualquier perturbación, conduciendo al *fracaso* del procedimiento de reversión.

La hipótesis central de la irreversibilidad impulsó el estudio de la dinámica cuántica de sistemas de una partícula cuya contraparte clásica es caótica, en los cuales se puede estudiar el LE sistemáticamente. Sin embargo, en sistemas de muchos cuerpos, aún cuando sean finitos, encontrar numéricamente el TL que convalide la hipótesis central de la irreversibilidad ha sido una tarea que eludió los anteriores intentos del grupo de Córdoba. En esta Tesis se intentarán pasos en esta dirección, específicamente explorando condiciones para estudiar sistemáticamente el TL, con especial énfasis en identificar posibles QDPT.

1.3. Organización de esta Tesis.

A lo largo de esta Tesis hemos explorado diferentes mecanismos que conducen a la irreversibilidad y la decoherencia, mostrando cómo el ambiente es capaz de producir transiciones de fase en la dinámica cuántica. En el Capítulo 2 estudiamos la emergencia de una QDPT en un sistema simple de dos niveles mediante el estudio del transporte electrónico. Usamos como observable relevante la conductancia electrónica estacionaria entre una fuente de corriente y un sumidero, para anali-

zar si puede ser capturado un comportamiento crítico. En el contexto de sistemas abiertos, presentamos un estudio analítico y numérico del transporte electrónico de estado estacionario, tomando como parámetro de control la intensidad de la interacción \mathcal{SE} . Este tratamiento nos permite realizar un análisis profundo de la emergencia de una transición de fase en una dinámica cuántica como función de un parámetro de control, que resulta la intensidad del acoplamiento entre el sistema y el ambiente. En este primer Capítulo incluimos también un breve análisis de las energías que resultan de un Hamiltoniano que describe un sistema abierto. Es decir, de los polos de la función de Green. Estos son interpretados en términos de la FGR, que describe el decaimiento de una excitación debido a la presencia de un ambiente cuyo espectro de energías es cuasi-continuo. El modelo estudiado, una simplificación del modelo de D'Amato y Pastawski, encuentra su justificación mediante el formalismo de Keldysh, sintetizado en las Ecuaciones Generalizadas de Landauer-Büttiker. Asimismo, presentamos, en el Apéndice 2.10, un método de suma utilidad que permite la reducción progresiva del número de variables del sistema, conocido como decimación. En el Apéndice 2.11, obtenemos la expresión de la tasa de decaimiento en la aproximación FGR. Por último, en el Apéndice 2.12, exponemos brevemente algunas nociones del formalismo de Keldysh.

En el Capítulo 3 introducimos el Eco de Loschmidt, es decir el observable que nos permite cuantificar la decoherencia y que constituye el eje de este trabajo. Aquí, combinamos herramientas analíticas con soluciones numéricas para estudiar nuevamente la emergencia de una QDPT en un sistema de dos niveles mediante el análisis del decaimiento del eco de Loschmidt. Derivamos una ecuación diferencial simple para el eco de Loschmidt, que resulta exacta para sistemas finitos abiertos en una aproximación Markoviana en la cual la interacción con el ambiente está bien representada por una FGR. Escribimos explícitamente la tasa de decaimiento como una magnitud que depende del tiempo y la empleamos para evaluar la transición dinámica.

Hemos mencionado que la estrategia teórica usual para abordar el proceso de decoherencia y disipación consiste en definir un sistema simple \mathcal{S} que interactúa con un ambiente \mathcal{E} complejo. Mientras que el primero posee unos pocos grados de libertad, el último típicamente posee un espectro denso. Esto asume tiempos experimentales más cortos que el tiempo de recurrencia de Poincaré (tiempo de Heisenberg) en el que aparecen los ecos mesoscópicos, condición en la que el espectro no puede ser resuelto en sus componentes. En el Capítulo 4 mostramos que podemos levantar esta restricción de ambiente complejo, ya que la coherencia puede ser degradada debido a un \mathcal{E} simple, con pocos grados de libertad. Estudiamos la degradación de un paquete de ondas Gaussiano en un oscilador armónico en presencia de un ambiente dado por un único sistema de dos niveles. Analizamos cómo el grado de libertad binario perturba la evolución libre del paquete de ondas, produciendo decoherencia. Ésta es cuantificada mediante el LE, que permite evaluar la *fragilidad* relativa de superposiciones coherentes (*a la manera del gato de Schrödinger*) con respecto a superposiciones incoherentes.

Dado que nuestro propósito subyacente es el de explicar los fenómenos que han sido observados en los experimentos de NMR, en el Capítulo 5 definimos el LE como una función de auto-correlación en sistemas multi-espín. En este Capítulo abordamos

la pregunta de cómo perturbaciones débiles, que son aparentemente inefectivas, pueden conducir a la decoherencia, y luego a la irreversibilidad. Esta pregunta está en el corazón de los mencionados experimentos de irreversibilidad en la NMR del estado sólido. En el modelo estudiado, una polarización inicial local se extiende sobre todo el sistema debido a las interacciones espín-espín, que conservan la proyección de espín total, culminando en la equilibración de la polarización. En principio, esta dinámica cuántica puede revertirse cambiando el signo del Hamiltoniano. Analizamos detalladamente el régimen más destacado del decaimiento del LE, que ocurre cuando la perturbación induce interacciones efectivas que, si bien son pequeñas, proliferan debido a la altísima degeneración del espacio de Hilbert. El rango de validez de este régimen aumenta con el tamaño N del sistema, convirtiéndose en el mecanismo principal para el decaimiento del LE en el TL.

En el Capítulo 6, nos situamos en la descripción usual de la decoherencia inducida por un ambiente. Para cuantificarla, estudiamos el decaimiento del LE de un anillo de espines acoplado a un ambiente con las mismas características. Al igual que en el Capítulo 5, analizamos los diferentes regímenes de decaimiento del LE, con especial énfasis en el régimen de decaimiento exponencial. Las tasas de decaimiento del LE comienzan a superponerse a medida que N aumenta. Para el modelo estudiado, encontramos que se alcanza un régimen de decoherencia independiente de perturbaciones. Sin embargo, éste es muy débil, posiblemente, debido a que la interacción que gobierna la dinámica de $\mathcal{S} - \mathcal{E}$ no posee la complejidad suficiente.

El estudio de la dinámica de un sistema de N espines requiere de un promedio sobre ensamble, por lo cual encuentra rápidamente limitaciones en los cálculos numéricos. En el Capítulo 7, desarrollamos un método para superar esta limitación, construyendo un estado puro entrelazado que imita un estado con polarización equidistribuida. La evolución de este único estado reemplaza el cálculo serial completo que requiere la evolución de cada una de las componentes del ensamble. El procedimiento, que explota el paralelismo implícito en las superposiciones cuánticas, es utilizado para reproducir la dinámica de ensamble del observable magnetización total, del mismo modo que ha sido estudiado en la Ref. [ADLP08] para observables locales. Convalidamos el método propuesto considerando dos casos de particular interés experimental. El primero de ellos es una variante del Eco Mágico descrito anteriormente. El segundo es una secuencia de Coherencias entre Cuantos Múltiplos en una cadena lineal con interacción de primeros vecinos, que tienen solución analítica en términos de la JWT. Los resultados obtenidos en ambos casos muestran un excelente acuerdo con los del ensamble completo.

Finalmente, en el Capítulo 8 presentamos una síntesis de los principales resultados obtenidos y detallamos algunas posibles extensiones del trabajo realizado.

1.4. Contribuciones personales originales contenidas en esta Tesis.

En el Capítulo 1 presentamos una introducción general y repasamos los resultados más sobresalientes en lo que refiere al tema central de la Tesis. Este Capítulo no contiene ningún material original.

En el Capítulo 2 exponemos la teoría estándar del transporte electrónico de estado estacionario y el modelo de decoherencia en el transporte de D'Amato y Pastawski que utilizaremos. Luego describimos un estudio propio de las Transiciones de Fase en la Dinámica Cuántica para diferentes modelos de pozos cuánticos dobles y puntos cuánticos acoplados, que aún no ha sido publicado.

En el Capítulo 3 derivamos una ecuación diferencial exacta para el decaimiento del Eco de Loschmidt y la aplicamos exitosamente en dos modelos. Este trabajo constituye un aporte original, aunque no ha sido publicado aún.

En el Capítulo 4 mostramos un modelo de decoherencia, que abordamos desde una perspectiva diferente a la usual. Este trabajo dio lugar a un artículo publicado en *Physical Review A* en el que aparezco como primera autora.

En el Capítulo 5 estudiamos el Eco de Loschmidt en un modelo de espines en estrecha colaboración con Pablo Zangara. Este trabajo dio lugar a una publicación en *Physical Review A* en el que me encuentro como segunda autora. Mi principal aporte en dicho artículo consistió en el cálculo de los Hamiltonianos Promedio. Algunos de esos cálculos se detallan en el Apéndice de dicho Capítulo. En esta misma línea de trabajo, fui coautora de un artículo publicado en *Philosophical Transactions*, que no ha sido incluido en la tesis porque mi rol fue secundario.

En el Capítulo 6 estudiamos la escala de decaimiento del Eco de Loschmidt para el caso de dos anillos acoplados, uno de ellos actúa como sistema mientras que el otro representa el ambiente. El aporte original es el aumento progresivo del tamaño del sistema, este trabajo se encuentra en etapa de elaboración y aún no ha sido publicado.

En el Capítulo 7 introducimos un método de cálculo de suma utilidad para sobrellevar las limitaciones computacionales que acarrea el tratamiento de sistemas de muchos cuerpos interactuantes. El mismo representa un trabajo original que aún no ha sido publicado.

Capítulo 2

Transiciones de Fase en la Dinámica Cuántica en el Transporte Electrónico

2.1. Introducción.

La capacidad de controlar y manipular sistemas cuyas propiedades fundamentales se encuentran en la nano-escala se ha convertido en un gran desafío, tanto para la Física fundamental como para la aplicada. Uno de los principales obstáculos radica en la limitación práctica de aislar por completo un sistema real, cuya evolución cuántica deja de ser unitaria. Esta interacción entre un sistema \mathcal{S} y un ambiente \mathcal{E} destruye progresivamente los fenómenos de interferencia cuántica [Zur03], como hemos discutido en la Introducción. Sin embargo, no todo es negativo. En efecto, la interacción con el ambiente puede también proveer de física nueva y por lo tanto abrir una ventana de oportunidades para manipular sistemas cuánticos. En particular, si las reglas de selección de esta interacción lo permiten y si su intensidad supera cierto valor, pueden ocurrir cambios abruptos en la dinámica de un sistema, dando origen a una QDPT.

Una muestra contundente de la manifestación de una QDPT ya estaba presente en uno de los experimentos pioneros del grupo de Córdoba, en el intento de manipular un dímero de espines. En su experimento, Levstein, Usaj y Pastawski [LUP98], consideraban dos espines nucleares de especies diferentes, ^{13}C y ^1H , que intercambian polarización a una determinada frecuencia. Sus observaciones mostraron un cambio abrupto en la frecuencia de oscilación y en la tasa de relajación para un valor crítico de la interacción entre \mathcal{S} y \mathcal{E} . La dinámica oscilatoria de la polarización entre los dos espines se *congela* cuando la interacción \mathcal{SE} excede ese valor crítico. En su versión de estado estacionario, este tipo de fenómeno tiene un amplio campo de aplicación en lo que se conoce como angostamiento por intercambio (*exchange narrowing*), que aparece cuando dos líneas de resonancia colapsan en una única, que se hace cada vez más angosta a medida que se acentúa la interacción de intercambio entre dos espines equivalentes [And54]. Aunque la fundamentación del fenómeno es aún oscura, una analogía puede encontrarse al considerar dos osciladores clásicos acoplados, cuando uno de los modos resultantes interactúa débilmente con el ambiente mientras que el

otro, el simétrico, concentra casi toda la disipación del conjunto [Wei78].

La aparición de una QDPT en un sistema debido a la interacción con su entorno ha sido puntualizada en el contexto de Hamiltonianos no-Hermíticos, en particular aquellos que resultan de la Física Nuclear [RS04, RS05, Rot09a]. En este tipo de Hamiltonianos, la posibilidad de una discontinuidad analítica en sus autovalores está habilitada por la no-Hermiticidad, y ésta es a su vez consecuencia del número infinito de grados de libertad del ambiente \mathcal{E} . Así, la presencia de una QDPT no sólo podría ocurrir en sistemas de espines y osciladores que sino que también se ha predicho en el contexto de la dinámica de electrones. En efecto, ya hemos mencionado que la justificación formal de la equivalencia entre un sistema de espines y uno de partículas fermiónicas no-interactuantes en la misma topología, está dada por la JWT. Allí, la transferencia de polarización entre dos núcleos magnéticos interactuantes se mapea, en el contexto del transporte electrónico, a un sistema de dos niveles (TLS por sus siglas en inglés: *Two Level System*). En general, un TLS consiste en dos estados $|A\rangle$ y $|B\rangle$ acoplados. En particular, podemos pensar que el estado inicial $|A\rangle$ representa un electrón, confinado en pozo cuántico A, que oscila entre A y B cuando se activa la interacción de tunelamiento V_{AB} entre los pozos. En notación matricial, el Hamiltoniano del TLS está representado por:

$$H_S = \begin{bmatrix} E_A & V_{AB} \\ V_{BA} & E_B \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

La necesidad de considerar *Hamiltonianos efectivos* aparece cuando un dado sistema, descrito por el Hamiltoniano H_S , interactúa mediante $V_{S\mathcal{E}}$ con un ambiente de dimensión infinita, descrito por $H_{\mathcal{E}}$. En algún grado de aproximación, la interacción está representada por una FGR, que corrige H_S en un segundo orden de la perturbación:

$$H_{eff} = H_S + V_{S\mathcal{E}} \frac{1}{\varepsilon_S I - H_{\mathcal{E}}} V_{S\mathcal{E}}. \quad (2.2)$$

De esta manera, la Ecuación de Schrödinger del sistema aislado resulta

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{\psi} = H_S \vec{\psi}, \quad (2.3)$$

que se soluciona en términos de los autovalores reales del Hamiltoniano Hermítico H_S . Al considerar la interacción con el ambiente, la Ec. (2.3) pasa a ser descripta por una ecuación de Schrödinger efectiva, que tiene la forma:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{\psi} = H_{eff} \vec{\psi} = [H_S + \Delta - i\Gamma] \vec{\psi}. \quad (2.4)$$

Aquí, hemos usado una notación que hace explícita la posibilidad de que el producto matricial, de dimensión infinita, de la Ec. (2.4) de por resultado un número complejo. Es precisamente esta ecuación la que en ciertas condiciones de simetría e intensidad puede presentar discontinuidades analíticas. Nótese, sin embargo, que la posible aparición de contribuciones no-Hermíticas destruye la conservación de la probabilidad.

2.2. Transiciones de Fase en la Dinámica de un sistema de dos niveles

En el caso en que los dos niveles $|A\rangle$ y $|B\rangle$ que conforman un TLS interactúan homogéneamente con un ambiente, el Hamiltoniano efectivo toma la forma:

$$H_{eff}^{(1)} = \begin{bmatrix} E_A - i\Gamma_\phi & V_{AB} \\ V_{AB} & E_B - i\Gamma_\phi \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

y sus autovalores ε resultan,

$$\varepsilon_{\pm}^{(1)} = i\Gamma_\phi \pm |V_{AB}|,$$

es decir, simplemente se desplazan al plano complejo, debido a los procesos de decaimiento al ambiente (parte imaginaria Γ_ϕ). Precisamente, un corrimiento imaginario infinitesimal es usual para regularizar integrales y sumas en las que las energías aparecen en el denominador. En consecuencia, las energías no-perturbadas se corrigen $E_i \rightarrow E_i - i\Gamma_\phi$ y la dinámica impuesta por el Hamiltoniano prácticamente no se modifica, con la excepción de atenuaciones en la escala \hbar/Γ_ϕ . En efecto, esta perturbación uniforme se corresponde con la regularización usual de los polos, cotidiana en la física-matemática, donde cada polo o autovalor se desplaza hacia el plano complejo.

Ciertamente, en un estudio previo de la ecuación de Schrödinger efectiva se ha reportado una QDPT cuando un único nivel del TLS interactúa con una cadena semi-infinita, que actúa como ambiente [DBMP08]. En este caso, la QDPT ya está presente en el Hamiltoniano total (no-Hermítico), como una no-analicidad en sus autoenergías. El Hamiltoniano no-Hermítico que representa esta situación, en notación matricial, puede escribirse como:

$$H_{eff}^{(2)} = \begin{bmatrix} E_A & V_{AB} \\ V_{AB} & E_B - i\Gamma_\phi \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

donde Γ_ϕ es un número real positivo y representa los procesos de decaimiento al ambiente. Como consecuencia, las autoenergías resultan:

$$\varepsilon_{\pm}^{(2)} = \pm \frac{\sqrt{4V_{AB}^2 - \Gamma_\phi^2}}{2} + \frac{i\Gamma_\phi}{2}.$$

Luego, la dinámica del estado inicial $|A\rangle$ sufrirá una transición desde un régimen oscilatorio atenuado ($4V_{AB}^2 > \Gamma_\phi^2$) a uno sobreamortiguado ($4V_{AB}^2 < \Gamma_\phi^2$), donde la atenuación representa una pérdida en la densidad descripta.

2.3. Transiciones de Fase en observables físicos

No obstante, una situación física real debe ser descripta por una ecuación que conserve la probabilidad. En la literatura, hay dos opciones de complementar la Ec (2.1) para contemplar la positividad de la evolución. Una de ellas consiste en resolver

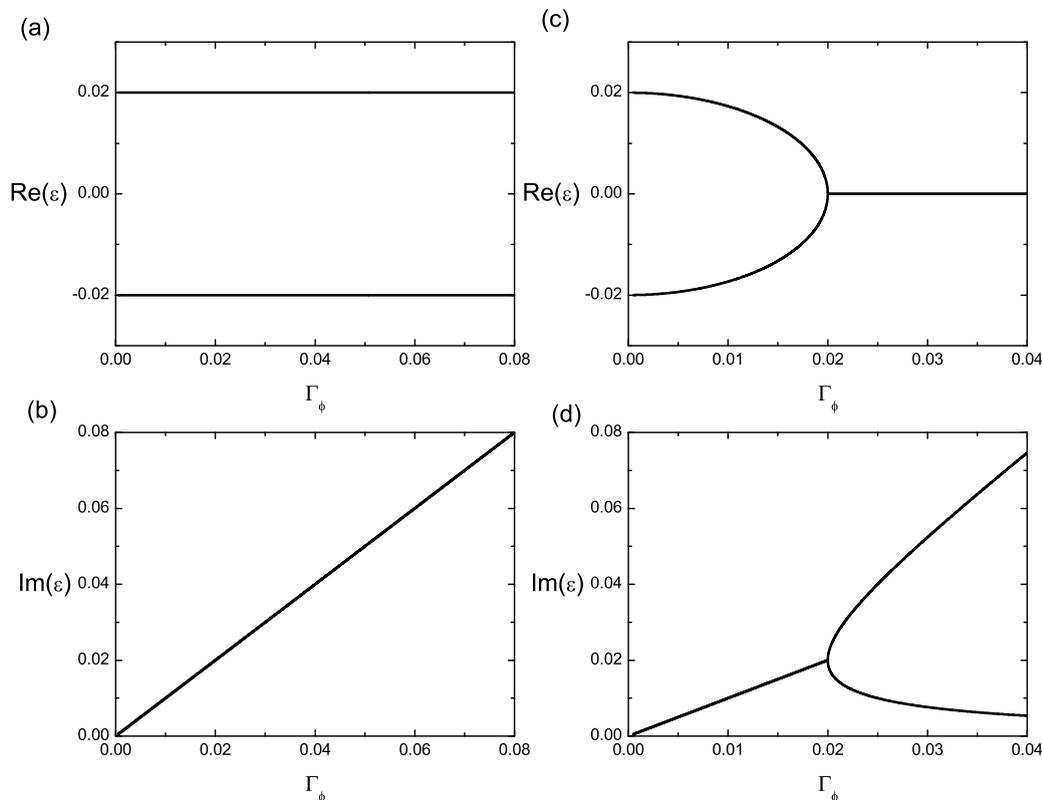


Figura 2.1: Partes real (arriba) e imaginaria (abajo) de los polos de la GF en función de la intensidad de la interacción con el ambiente, con $V_{AB} = 0,02$.

la dinámica completa del sistema mediante la Ecuación Maestra de Lindblad. Así, la evolución del sistema cerrado resulta,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = i\hbar [H_S, \rho] \quad (2.7)$$

$$= \mathcal{L}_S [\rho], \quad (2.8)$$

En este caso, los autovalores de la Ec. (2.7) están dados por cantidades imaginarias puras, que resultan ser las autofrecuencias $i\omega_{\alpha\beta} = i(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)/\hbar$. Para incluir la interacción con el ambiente, se requiere de una descripción más general, que recupere la probabilidad en la misma proporción en que es perdida por la FGR impuesta al Hamiltoniano efectivo. En este contexto, la evolución resulta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho &= i\hbar [H_{eff}, \rho] + \Gamma \rho \\ &= \tilde{\mathcal{L}} [\rho] \end{aligned}$$

donde el super-operador lineal $\tilde{\mathcal{L}}$, que se conoce como operador de Lindblad, ha incluido los términos necesarios para asegurar la positividad y conservar la traza. Al considerar sistemas abiertos, $i\tilde{\mathcal{L}}$ se vuelve no-Hermítico, por lo que los autovalores

de $\tilde{\mathcal{L}}$ adquieren componentes reales $\Gamma_{\alpha\beta}$, que describen los procesos de decaimiento hacia el ambiente. En otras palabras, los autovalores $i\omega_{\alpha\beta}$ de \mathcal{L}_S pasan ahora a ser $i(\omega_{\alpha\beta} + \Delta_{\alpha\beta}) + \Gamma_{\alpha\beta}$. Nótese que, a diferencia del caso anterior, en este escenario las componentes reales de los autovalores son las que describen la relajación y decoherencia. Así, nuevamente podemos esperar que el espectro de autovalores de $\tilde{\mathcal{L}}$ contenga discontinuidades analíticas. De hecho, es muy probable que esto ocurra si el espectro de H_{eff} las contiene.

Una segunda alternativa para contemplar sistemas abiertos, manteniendo la positividad de la evolución, resulta el tratamiento de la dinámica cuántica de tal sistema mediante el formalismo de Keldysh. Este formalismo emplea la teoría de campos para hallar ecuaciones diferenciales e integrales de la función densidad:

$$\rho(t) \equiv i\hbar \lim_{t' \rightarrow t} \mathbb{G}^<(t, t').$$

Sorprendentemente, se han encontrado QDPT en la $\rho(t)$ asociada al Hamiltoniano efectivo dado por la Ec. (2.6). En efecto, comportamientos drásticos han sido observados en la dinámica cuántica de electrones cuando ambos estados de un TLS son perturbados uniformemente por un ambiente. Este caso ha sido resuelto mediante las Ecuaciones Generalizadas de Landauer-Büttiker [Pas07a] (GLBE por sus siglas en inglés: Generalized Landauer-Büttiker Equations), que corresponden a una simplificación del complejo formalismo de Keldysh [Pas91, Pas92], en un modelo en el que la carga electrónica es una cantidad conservada. En la aproximación GLBE [Pas91, Pas92, ÁDLP06],

$$\begin{aligned} \mathbb{G}^<(t) &= \exp[-iH_{eff}t/\hbar] \mathbb{G}^<(0) \exp[iH_{eff}t/\hbar] \\ &\quad + \int_0^t \exp[-iH_{eff}(t-t_i)/\hbar] \Gamma^<(t_i) \exp[iH_{eff}(t-t_i)/\hbar] dt \\ &= \mathbb{G}_{coh}^<(t) + \mathbb{G}_{incoh}^<(t). \end{aligned}$$

Esto significa que toda partícula que decae según la descripción coherente, o escapa hacia ambiente debido a las energías imaginarias aportadas por H_{eff} , representadas por el primer término de la derecha, es reinyectada nuevamente en el sistema por $\Gamma^<$ (calculado autoconsistentemente) en el segundo término de la derecha. Las GLBE pudieron ser resueltas analíticamente en varios casos paradigmáticos. En su versión de estado estacionario, en cambio, han sido ampliamente utilizadas por la comunidad internacional para resolver problemas de transporte electrónico, ya que encuentran su implementación en el llamado modelo D'Amato-Pastawski (DP) [DP90].

En efecto, en la Ref. [DP90] se introdujo un modelo de decoherencia y disipación, en el cual se incluye la interacción de un sistema con un ambiente en situaciones en las que la carga se conserva estrictamente. No obstante, en este escenario aún no está claro si la QDPT debe aparecer en observables estacionarios. A raíz de esto, surge el interrogante, será posible que tal transición se ponga de manifiesto en el transporte electrónico de estado estacionario? Para responderlo, presentamos un estudio sistemático del transporte electrónico usando como parámetro de control la interacción \mathcal{SE} . Usamos el formalismo DP [DP90], que provee una enorme simplificación a la compleja formulación del transporte de Keldysh y permite el tratamiento de

estados fuera de equilibrio. Analizamos un TLS conectado a procesos que conservan la carga, tales como sondas de voltaje u otras interacciones conservativas (Coulomb, electrón-fonón, etc).

2.4. De lo más simple a lo más complejo: El sistema de dos niveles

En Mecánica Cuántica aparece una nueva variable, el espín, que constituye una propiedad intrínseca de los núcleos atómicos y se asocia a sus momentos magnéticos. Estos pueden estar orientados *hacia arriba* (\uparrow) respecto de alguna dirección que tomamos como referencia o en la dirección opuesta (\downarrow), *hacia abajo*, e interactúan entre sí, por ejemplo, vía interacción Dipolar. Consideremos un sistema de dos espines nucleares $1/2$ idénticos, en presencia de un campo magnético intenso en la dirección arbitraria \hat{z} , $\hat{\mathbf{B}}_0 = B_0 \hat{z}$. Cada núcleo adquiere una energía que viene dada por el Hamiltoniano Zeeman [Mun88] $\hat{H}_{Zeeman} = -\hbar\gamma(\hat{S}^z)$, donde γ es el factor giromagnético y $\hat{S}^z = \hat{S}_1^z + \hat{S}_2^z$ es el operador de espín total. Luego, hay cuatro posibles estados producto Zeeman, $|m_{S_1} m_{S_2}\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$, tales que $\hat{S}_i^z |m_{S_i}\rangle = m_{S_i} |m_{S_i}\rangle$, donde $m_{S_i} = \pm 1/2$. Resulta atractivo que hay un tipo de interacción que rompe con la degeneración entre los estados $|\uparrow\downarrow\rangle$ y $|\downarrow\uparrow\rangle$. Esta interacción, conocida como *flip-flop* o XY, está dada por el Hamiltoniano:

$$H_{XY} = J_{XY} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+),$$

donde S_i^+ y S_i^- son los operadores de ascenso y descenso de espines, $\hat{S}_i^\pm = \hat{S}_i^x \pm i\hat{S}_i^y$. Si se prepara al sistema en uno de los estados degenerados, digamos $|\uparrow\downarrow\rangle$, la probabilidad intercambiar polarización y encontrarlo en $|\downarrow\uparrow\rangle$, a un tiempo t tendrá un comportamiento oscilatorio periódico, que se conoce como oscilaciones de Rabi. En 1974, el grupo de Ernst logró observar estas oscilaciones mediante un experimento de transferencia de polarización, en el que dos espines de especies diferentes son acoplados de tal forma que se comportan como si fueran de una misma especie. Nótese que la situación cambia si la interacción en juego es de otro tipo, como Isotrópica o Dipolar. Tras aplicar una JWT [LSM61a], el sistema de espines se mapea a un sistema de electrones no-interactuantes que se propagan en una cadena lineal. La excitación de carga (electrón) puede ocupar dos estados degenerados $|A\rangle$ y $|B\rangle$, acoplados vía una amplitud de salto V_{AB} . Así, luego de la JWT, se obtiene el Hamiltoniano de un TLS:

$$\hat{H}_0 = E_A \hat{c}_A^\dagger \hat{c}_A + E_B \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_B - V_{AB} (\hat{c}_A^\dagger \hat{c}_B + \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_A), \quad (2.9)$$

donde E_i , $i = A, B$, son las energías no-degeneradas del electrón en el estado i y \hat{c}_i^\dagger (\hat{c}_i) representan los operadores estándar de creación (destrucción) en el estado i . La expresión dada por la Ec. (2.9) es completamente equivalente a la Ec. (2.1) en notación matricial. La magnitud de la interacción flip-flop J_{XY} , responsable de la deslocalización de la polarización, juega el papel de la amplitud de salto V_{AB} , que produce la propagación del electrón en la red.

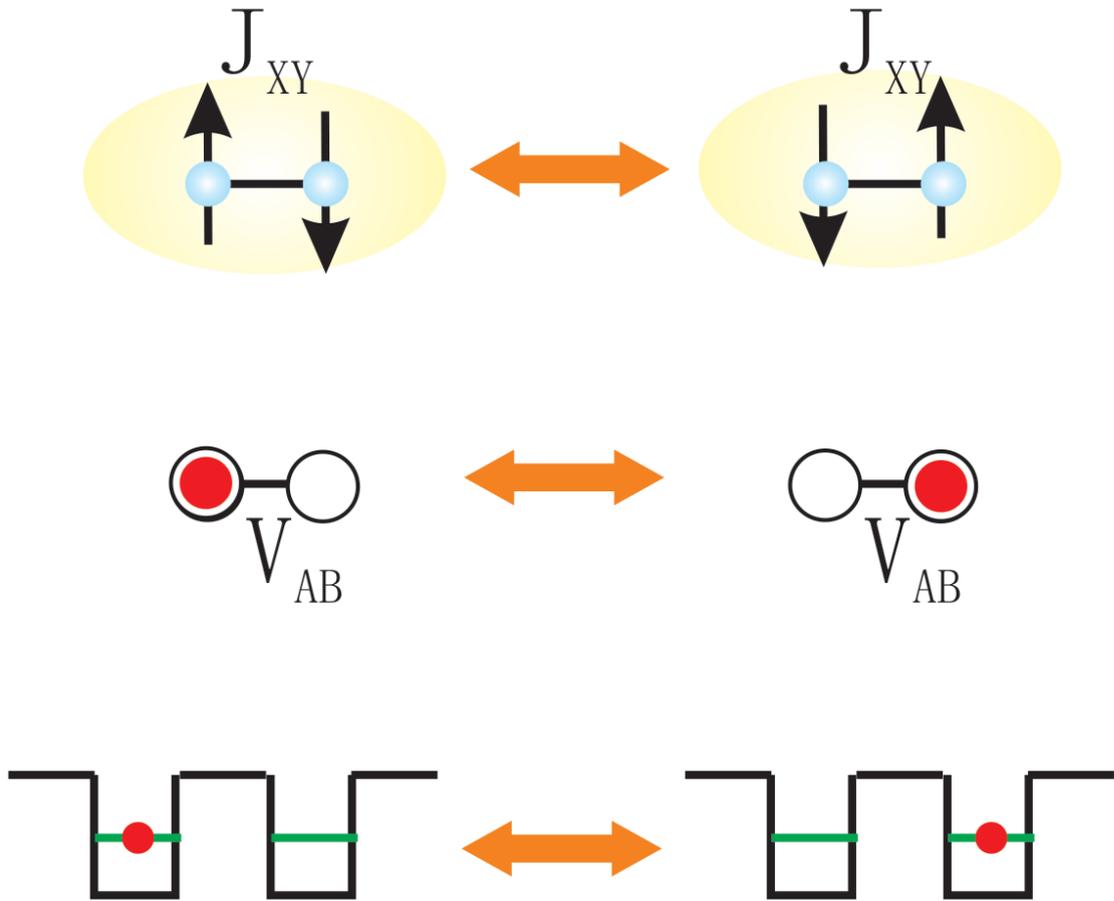


Figura 2.2: Representación pictórica de la transformación de Jordan-Wigner entre sistemas de espines y partículas fermiónicas no-interactuantes.

La JWT garantiza que ambos escenarios sean equivalentes, el sistema lineal de espines con interacción XY y el problema de electrones no interactuantes en la misma topología, por lo que en este Capítulo estudiaremos este último caso.

En primer lugar, describimos el comportamiento dinámico de una excitación de carga inicial localizada en el sitio A , $|\psi_0\rangle = |A\rangle$, considerando que el sistema está aislado de su entorno. En este caso, la probabilidad de supervivencia (SP por sus siglas en inglés: Survival Probability), es decir, la probabilidad de retornar al estado inicial luego de una evolución durante un tiempo t , está dada por el solapamiento entre el estado inicial y el evolucionado:

$$P_{AA}^{(0)}(t) = |\langle \psi_0 | \psi(t) \rangle|^2 \equiv \left| \langle \psi_0 | \hat{U}_0(t) | \psi_0 \rangle \right|^2, \quad (2.10)$$

donde $\hat{U}_0(t) = \exp\{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\}$. En este caso particular,

$$P_{AA}^{(0)}(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(\omega_0 t),$$

donde $\omega_0 = 2V_{AB}/\hbar$ corresponde a la frecuencia característica de oscilación de Rabi.

Los autovalores del Hamiltoniano coinciden con los polos de su resolvente o función de Green (GF por sus siglas en inglés: Green Function), por ejemplo:

$$\begin{aligned}\mathbb{G}_{AA}^{(0)} &= \langle A | (\varepsilon I - H_S)^{-1} | A \rangle \\ &= \frac{1}{\varepsilon - E_A - \frac{V_{AB}^2}{\varepsilon - E_B}}\end{aligned}$$

brindan las energías ligante y anti-ligante $E_{1,2} = \pm V_{AB}$.

En la Introducción, hemos mencionado que un sistema \mathcal{S} , en este caso un TLS, nunca está completamente aislado de su entorno. Hay casos en los que el ambiente \mathcal{E} produce el decaimiento de las oscilaciones y hay otros en los que es capaz que producir cambios drásticos en la dinámica del sistema. Dado que nuestro grupo ha sido capaz de observar una QDPT en la dinámica oscilatoria de la transferencia de polarización entre dos núcleos de ^{13}C y ^1H , nos interesa conocer si tal transición puede obtenerse analizando las propiedades de transporte del sistema perturbado.

2.5. Sistema de Dos Niveles en presencia de un Ambiente

El sistema \mathcal{S} considerado es un TLS, que está acoplado a un ambiente \mathcal{E} , responsable de la pérdida de control sobre \mathcal{S} . El Hamiltoniano total que contiene todos los procesos físicos es

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes \hat{I}_\mathcal{E} + \hat{I}_S \otimes \hat{H}_\mathcal{E} + \hat{V}_{S\mathcal{E}}, \quad (2.11)$$

donde el primer término representa \mathcal{S} , el segundo \mathcal{E} y el tercero la interacción entre ambos. La GF toma la forma,

$$\begin{aligned}\mathbb{G}_{AA} &= \langle A | (\varepsilon I - H_S - V_{S\mathcal{E}} - H_\mathcal{E})^{-1} | A \rangle \\ &= \langle A | (\varepsilon I - H_S - V_{S\mathcal{E}} [\varepsilon I - H_\mathcal{E}]^{-1} V_{S\mathcal{E}})^{-1} | A \rangle \\ &= \langle A | (\varepsilon I - H_S - \Sigma_S)^{-1} | A \rangle \\ &= \mathbb{G}_{AA}^{(0)} + \mathbb{G}_{AA'}^{(0)} \Sigma_S \mathbb{G}_{A''A}\end{aligned}$$

donde el potencial efectivo que introduce el ambiente sobre el sistema puede calcularse fácilmente en la base de autoestados α de ambiente.

$$\Sigma_{AA'} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{\substack{\nu \\ \text{autoestados de } \mathcal{E}}} \frac{V_{A,\nu} V_{\nu A'}}{\varepsilon - [E_\nu - i\eta]} = \Delta(\varepsilon) - i\Gamma(\varepsilon)$$

Notemos que si el espectro del ambiente es continuo, aparece una parte imaginaria finita, que representa el escape o decaimiento irreversible hacia el ambiente. Aquí, el infinitésimo η utilizado para regularizar la divergencia, se interpreta como un decaimiento adicional de cada uno de los estados E_ν del ambiente. Consistentemente,

consideramos que \mathcal{E} puede llevar al decaimientos de uno o ambos estados del TLS, también representado por una corrección imaginaria finita Γ en su energía .

En primer lugar, estudiamos el caso de una perturbación no-uniforme, es decir que sólo corrige uno de los estados del TLS. Si el sitio que sufre el proceso de decoherencia es B , la perturbación toma la forma:

$$\hat{\Sigma}^{(1)} = -i\Gamma_\phi \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_B, \quad (2.12)$$

en donde Γ_ϕ es un número real y positivo. Este tipo de ambiente produce un escape de probabilidad desde \mathcal{S} hacia \mathcal{E} y no conlleva ningún tipo de retorno coherente desde \mathcal{E} hacia \mathcal{S} . Por este motivo, una excitación difundirá casi instantáneamente y se dice que el ambiente es Markoviano. La tasa de decaimiento de un estado inicial estará dada por la FGR, que está descrita en el Apéndice 2.11.

La dinámica de un sistema cuántico puede estudiarse mediante el cálculo de las auto-energías del Hamiltoniano total, que en este caso es $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{\Sigma}^{(1)}$ y está escrito explícitamente en forma matricial en la Ec. (2.20), o equivalentemente mediante el cálculo de los polos de la GF. Por simplicidad, tomamos $E_A = E_B = 0$, y los polos pueden calcularse fácilmente, tomando la forma,

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{i\Gamma_\phi}{2} \pm \frac{\sqrt{4V_{AB}^2 - \Gamma_\phi^2}}{2}. \quad (2.13)$$

De la Ec. (2.13), podemos ver que hay un punto excepcional cuando $4V_{AB}^2 - \Gamma_\phi^2$ cambia de signo ($V_{AB} = \Gamma_\phi/2$), lo que produce un colapso (o bifurcación) de líneas, como puede observarse en la Fig. 2.1 (c) (o (d)).

Es notable que la parte real de los polos colapsa para un valor crítico Γ_C , a partir del cual se produce un quiebre en el que la parte real se anula y los polos (imaginarios puros) se separan. Uno de ellos crece con la interacción con el ambiente mientras que el otro decrece, y es justamente este último el que controla el comportamiento a tiempos largos. La no-analiticidad de los polos de la GF surge como consecuencia de la asimetría de la perturbación, que sólo afecta a la energía de uno de los estados del TLS. Esta no-analiticidad marca la presencia de una QDPT, que se pone de manifiesto claramente cuando estudiamos la dinámica de una excitación, dada por la SP, $P_{AA}(t)$. Para valores $V_{AB} > \Gamma_\phi/2$, observamos una dinámica oscilatoria cuya amplitud se degrada respecto de la oscilación típica de Rabi del TLS aislado, como muestra en la Fig. 2.3 (a), mientras que para $V_{AB} < \Gamma_\phi/2$ se manifiesta un régimen sobreamortiguado, como está representado en la Fig. 2.3 (b).

En segundo lugar, consideramos una perturbación simétrica, es decir que \mathcal{E} corrige las energías de ambos estados del TLS en la misma magnitud. El operador que representa esta situación puede escribirse como

$$\hat{\Sigma}^{(2)} = -i\Gamma_\phi (\hat{c}_A^\dagger \hat{c}_A + \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_B). \quad (2.14)$$

El cálculo de los polos de la GF, o equivalentemente de las auto-energías del Hamiltoniano total $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{\Sigma}^{(2)}$, que está escrito en forma matricial en la Ec. (2.6), resulta en,

$$\varepsilon_{1,2} = i\Gamma_\phi \pm |V_{AB}|. \quad (2.15)$$

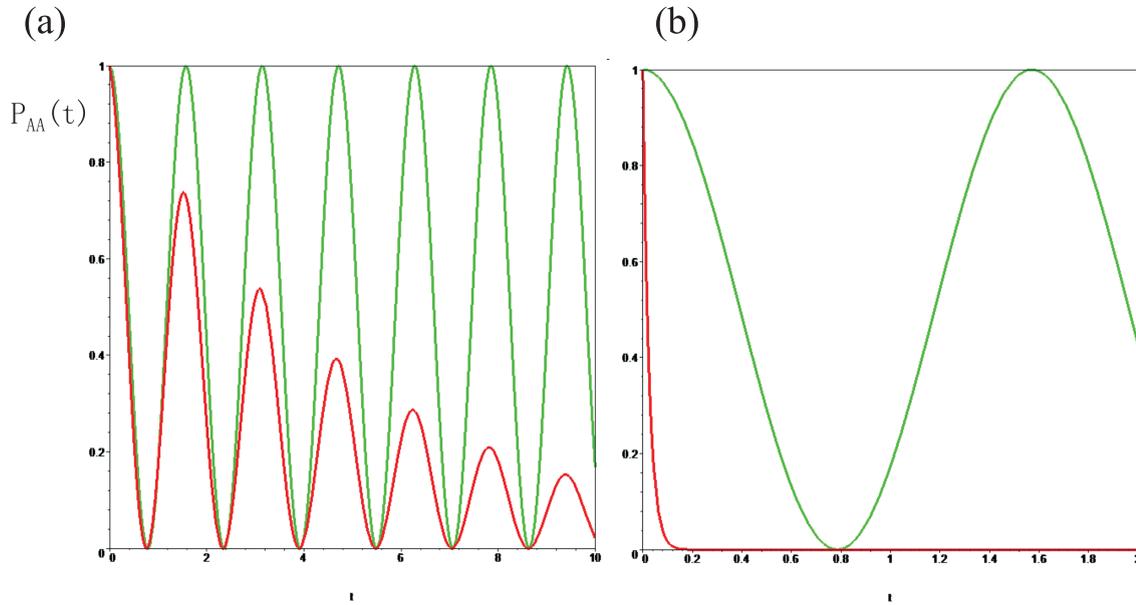


Figura 2.3: Probabilidad de supervivencia de un estado inicial $|\psi_0\rangle$ en función del tiempo (en unidades de \hbar/V_{AB}) para el TLS aislado (verde), superpuesto con la probabilidad de supervivencia del mismo estado para el TLS perturbado (rojo) en (a) el régimen oscilatorio y (b) el régimen sobreamortiguado.

Su comportamiento suave y analítico, que se muestra en la Fig. 2.1 (a) y (b), pareciera deberse justamente a la simetría de la perturbación. Su efecto es el de un corrimiento al plano complejo de los polos de la GF respecto de los del sistema no-perturbado. En principio, uno podría pensar que, dado que una singularidad en algún observable es una característica de un comportamiento crítico, la no-analiticidad de los polos de la GF en función de la intensidad Γ_ϕ implicaría la presencia de una transición dinámica. Siguiendo este razonamiento, si la perturbación fuera homogénea no se observaría transición alguna. De hecho, no se observa transición en la dinámica correspondiente a un TLS perturbado según la Ec. (2.14) al nivel de su Hamiltoniano. Sin embargo, en este sistema ha sido reportada una QDPT cuando se considera una linealización del formalismo de Keldysh [Pas07b]. Un TLS perturbado homogéneamente, con la restricción de conservación de carga, efectivamente presenta una QDPT en el espacio de las frecuencias [Pas91, Pas92]. El estudio del transporte electrónico permite considerar el caso en el que la carga se conserva, reinyectando una partícula al sistema por cada una que lo abandona. Estudiamos sistemáticamente la transmitancia, es decir la conductancia cuántica adimensional, en un TLS perturbado por un ambiente no-homogéneo, dado por la Ec. (2.12), y uno homogéneo, dado por la Ec. (2.14), con el objetivo de dilucidar si constituye un buen testigo para observar la presencia de una QDPT.

2.6. Decoherencia en el transporte electrónico

El tratamiento del transporte cuántico ha sido una pieza fundamental de la física de la materia condensada a partir de mediados del siglo pasado. El formalismo más utilizado actualmente para tratar problemas de transporte de estado estacionario se basa en las ideas pioneras de Landauer [Lan57, IL99], quien en 1957 propuso su célebre fórmula que vincula la conductancia, una magnitud esencialmente macroscópica, con la transmitancia cuántica, una magnitud intrínsecamente microscópica [Lan57]. Según el enfoque de Landauer, las terminales conectadas a la muestra tienen un papel fundamental. Esto se contrapone a las descripciones semiclásicas basadas en la Ecuación de Boltzmann y la cuántica de Kubo-Greenwood que, por abocarse a sistemas macroscópicos, tradicionalmente las dejan de lado.

Tiempo después, Büttiker extendió el enfoque de Landauer al considerar sistemas con muchas terminales (reservorios). En particular, Büttiker notó que conectar la muestra a un voltímetro implica una medición clásica sobre los electrones, con el correspondiente colapso de la función de onda. De este modo es posible dar cuenta de la decoherencia [B86]. Posteriormente, D'Amato y Pastawski, extendiendo la idea de Büttiker, establecieron una equivalencia entre el escape de los electrones hacia un ambiente y el efecto de la decoherencia introducido por un voltímetro [DP90]. Mediante el uso de la teoría cuántica de campos en el formalismo de Keldysh, Kadanoff y Baym para el transporte electrónico, Pastawski formalizó un modelo que permite incluir la decoherencia en el transporte electrónico [Pas91, Pas92]. A continuación, revisamos las ideas que dan origen a este modelo, conocido como modelo D'Amato-Pastawski, con el objetivo final de establecer si es posible hallar consecuencias de una posible QDPT en el transporte electrónico estacionario en dispositivos basados en pozos cuánticos acoplados.

En la actualidad, el término decoherencia es ampliamente utilizado en el ámbito de la información cuántica. Sin embargo, evaluar el efecto de la decoherencia en el transporte electrónico resulta un problema no-trivial y de actual interés, por la posibilidad de aprovechar las interacciones con un ambiente, que inducen la decoherencia, para controlar memorias cuánticas [SKV⁺14].

Muchas veces, en el contexto del transporte de excitaciones, las fuentes de desfase más relevantes pueden ser identificadas adecuadamente. Algunos ejemplos de esto pueden ser las interacciones electrón-fonón, electrón-electrón, acoplamientos inter-cadena, etc. Sin embargo, en general es posible analizar el rol del ambiente \mathcal{E} cuando la interacción con el sistema \mathcal{S} puede ser descrita en una aproximación Markoviana, dada por la FGR.

2.6.1. Las ideas de Landauer

En la visión de Landauer, un ingrediente fundamental para la descripción del transporte es considerar que, además de la muestra, se deben incorporar explícitamente las terminales que la conectan con los reservorios de electrones, como se muestra en la fig. 2.4 para un canal de conducción ideal sin irregularidades [PM01]. En el caso más simple, podemos considerar dos reservorios, uno que actúa como fuente de electrones (al que etiquetamos L) y otro como sumidero (al que llama-

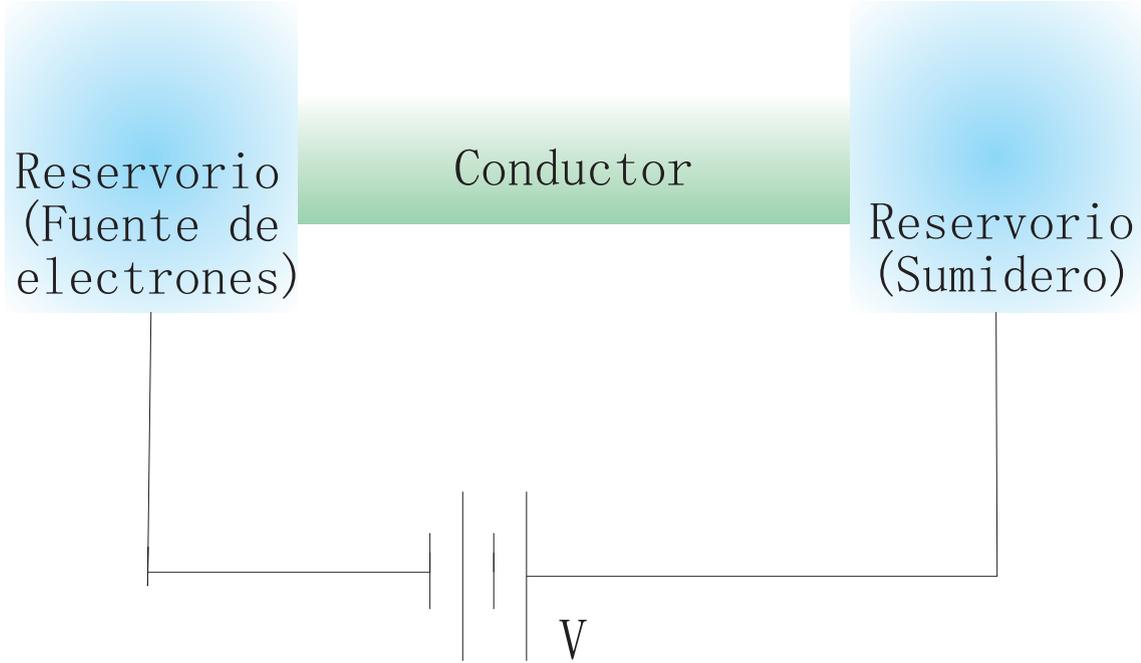


Figura 2.4: Representación pictórica de un conductor ideal conectado a dos reservorios, uno que actúa de fuente y el otro de sumidero.

remos R). La diferencia de potencial entre ambos es fijada externamente y toma el valor eV . Esto se traduce en una diferencia entre los potenciales químicos de los reservorios μ_i , $i = L, R$, y, por tanto, en la ocupación de los estados, que está dada por la función distribución de Fermi

$$f_i = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu_i}{k_B T}\right)},$$

donde ε es la energía del estado y $k_B T$ es la energía térmica.

En los reservorios, los electrones sufren interacciones que ocasionan la pérdida de su correlación de fase. En consecuencia, los electrones que provienen de diferentes terminales son incoherentes entre sí, por lo que no producen interferencias. Es por ello que el transporte electrónico ocurre de modo análogo al problema de radiación de cuerpo negro. Cada reservorio emite electrones, de acuerdo a su función de ocupación, hasta una energía conocida como energía de Fermi. Por lo tanto, el transporte resulta una consecuencia de un desbalance entre el flujo de electrones que entra y el que abandona cada reservorio a través de la muestra.

La corriente neta a través de una terminal se expresa en términos del número de electrones disponibles, es decir, la densidad de estados $N_i(\varepsilon)$ del reservorio i , la velocidad v_i de los electrones en el cable y la probabilidad de transmisión T_{RL} de que un electrón efectivamente se propague a través de la muestra desde L hacia R . Por tanto, la corriente evaluada en la terminal de la izquierda, L , es

$$I_L = e \int \left[T_{RL}(\varepsilon) v_L \frac{1}{2} N_L(\varepsilon) f_L(\varepsilon) - T_{LR}(\varepsilon) v_R \frac{1}{2} N_R(\varepsilon) f_R(\varepsilon) \right] d\varepsilon. \quad (2.16)$$

La Ec. (2.16) representa un balance de corriente. Cada reservorio i emite electrones con una energía disponible dada por la función de distribución de Fermi. La densidad de estados que corresponden a electrones que "salen" de los reservorios con velocidad v_i es la mitad del total, $\frac{1}{2}N_i(\varepsilon)$. Esto se refiere a los estados $+k$ que se propagan hacia la derecha del reservorio L y los $-k$ que escapan hacia la izquierda de R . El primer término de la Ec. (2.16) representa la fracción de electrones que salen de L y se dirigen a R a través de la muestra, mientras que el segundo la fracción de electrones que toman el camino inverso, es decir, salen de R y se dirigen a L . Entonces, la corriente neta se debe a los estados no-compensados, es decir, aquellos estados con ocupación mayor en un reservorio que en otro. Luego, la corriente neta es una consecuencia del desbalance entre las ocupaciones de los estados en los cables, que se origina por la diferencia de potencial o voltaje fijado externamente, y el flujo de corriente se debe a los electrones con energías entre μ_L y μ_R .

En la formulación de Landauer, los alambres son considerados unidimensionales, por lo cual la densidad de estados N_i es inversamente proporcional a la velocidad de grupo correspondiente,

$$N_i \equiv \frac{2}{v_i \hbar}. \quad (2.17)$$

Asumiendo bajas temperaturas, simetría de reversión temporal para el proceso de transmisión, lo que implica $T_{RL} = T_{LR}$, y respuesta lineal, es decir $\delta\mu_i = \mu_i - \varepsilon_F \ll \varepsilon_F$, la integral de la Ec. (2.16) puede ser aproximada evaluando la transmitancia en la energía de Fermi,

$$I = \frac{e}{\hbar} T_{RL}(\varepsilon_F) (\delta\mu_L - \delta\mu_R), \quad (2.18)$$

donde $\delta\mu_L - \delta\mu_R = eV$ y no hemos incluido el factor 2 debido a la degeneración de espín. A partir de la Ec. (2.18) se obtiene la conductancia para un sistema de dos terminales,

$$G_{RL} = \frac{e^2}{\hbar} T_{RL}. \quad (2.19)$$

La Ec. (2.19) es una de las relaciones más conocidas del transporte, en la cual la respuesta lineal de la conductancia está expresada en término de la probabilidad de transmisión de los electrones a través del conductor. De aquí surge la célebre frase de Landauer, *conductancia es transmitancia*. La importancia de la Ec.(2.19) reside en el hecho de relacionar dos cantidades de escalas diferentes, la conductancia macroscópica, que puede ser medida experimentalmente, con la probabilidad de transmisión del electrón que es una cantidad de naturaleza inherentemente cuántica.

Hasta aquí hemos repasado algunos conceptos sobre la teoría del transporte electrónico coherente [PM01]. El siguiente paso es conectar la transmitancia con las propiedades electrónicas de la muestra y los electrodos. Una gran parte de la comunidad científica ha optado por modelar el transporte electrónico mediante matrices de dispersión (*scattering*). Sin embargo, hay casos en los que se pone de manifiesto que las características específicas de la estructura electrónica son relevantes, como los sistemas moleculares, por lo cual resulta imperativo al menos una descripción aproximada de estas propiedades mediante modelos Hamiltonianos.

La mayor parte de los problemas de la Física del Estado Sólido involucran estructuras internas complejas, con un número enorme grados de libertad, por lo que su estudio requiere de simplificaciones. Es común mapear sistemas reales a otros más simples, de tal forma que las propiedades del sistema original no se vean alteradas. Esto puede lograrse mediante procedimientos de renormalización, que permiten la decimación de aquellos grados de libertad que no son relevantes para el estudio del sistema de interés. Dentro de este contexto, es posible incluir el efecto de las terminales en la formulación Hamiltoniana mediante una corrección imaginaria a la energía del sitio conectado a la terminal. Los detalles del procedimiento de renormalización se encuentran en el Apéndice 2.10.

Una alternativa al estudio de las soluciones de la ecuación de Schrödinger la provee la GF, que constituye una herramienta fundamental para estudiar las propiedades del transporte electrónico. Hay una íntima relación entre la estructura electrónica de un sistema, y su GF correspondiente, con las propiedades de transporte, contenidas en la función transmitancia. La primera demostración de la conexión entre la probabilidad de transmisión y la GF está basada en propiedades de la matriz de dispersión en un modelo continuo [FL81]. Una demostración simplificada en el continuo se encuentra en el libro de Datta [Dat97] o, alternativamente, una demostración basada en Hamiltonianos efectivos para un sistema discreto (tight-binding o LCAO) se desarrolla en el artículo didáctico de Pastawski y Medina [PM01].

Consideremos el modelo esquematizado en la Fig. 2.5, en el que el conductor está representado por una cadena *tight binding* a primeros vecinos y está acoplado a las terminales. Éstas, como hemos mencionado, deben ser incorporadas explícitamente de acuerdo con la formulación de Landauer. Dado que están representadas por cadenas unidimensionales semi-infinitas, deben ser incorporadas como auto-energías $\Sigma = \Delta - i\Gamma$ que corrigen a las energías de sitio. Estas auto-energías contienen componentes imaginarias (ver Ec. (2.35) en el Apéndice 2.10), que se asocian a incertezas en la energía y están representados por corrimientos al plano complejo de las auto-energías. En otras palabras, luego de la decimación de los grados de libertad del ambiente, se obtiene un Hamiltoniano efectivo \hat{H}_{eff} , no-Hermítico [Rot09b] que está dado por

$$\hat{H}_{eff} = (\hat{H}_S - i\eta\hat{\mathbf{I}}) + \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N \hat{\Sigma}_{\alpha i} \quad (2.20)$$

procesos sitios

donde $\hat{\Sigma}_i$ está dado por la Ec. (2.35) del Apéndice 2.10, el índice α indica el mecanismo de interacción con el ambiente (colisión inelástica o escape hacia las terminales) y el i representa el sitio sobre el cual actúa.

La fórmula de Fisher y Lee para la transmitancia está dada por

$$T_{\beta j \alpha i}(\varepsilon) = [2\Gamma_{\beta j}(\varepsilon)] G_{ji}^R(\varepsilon) [2\Gamma_{\alpha i}(\varepsilon)] G_{ij}^A(\varepsilon), \quad (2.21)$$

donde $2\Gamma_{\alpha i}$ es proporcional a la velocidad de escape hacia la terminal conectada al sitio i debido al proceso de decoherencia α y corresponde a la parte imaginaria de $\Sigma_{\alpha i}$ (Ec. (2.37)), y $G_{ij}^{R(A)}$ es el elemento i, j de la función de Green retardada (avanzada), dada por la Ec. (2.42) del Apéndice 2.12. De la Ec. (2.21) podemos notar que sólo

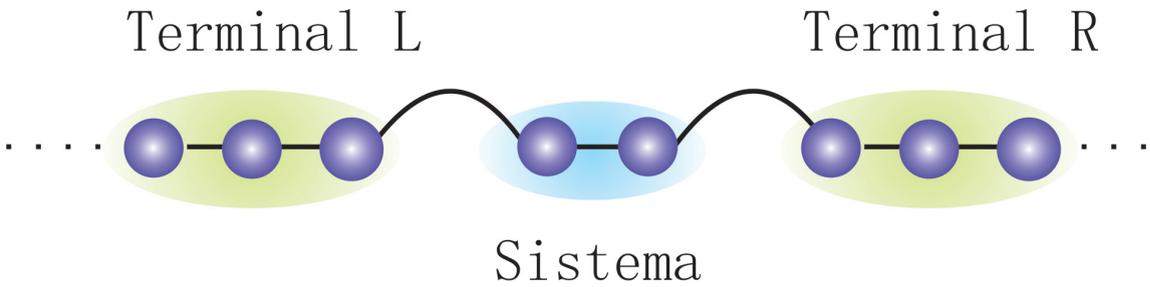


Figura 2.5: Representación pictórica del sistema considerado por Fisher y Lee. El conductor está representado por una cadena *tight binding*. Éste está acoplado a las terminales, que son incorporadas explícitamente como cadenas unidimensionales semi-infinitas.

contribuyen los elementos de la GF que están directamente conectados a procesos de decoherencia. Como la interacción entre los electrones y el ambiente degrada la coherencia de estos, la conductancia real difiere de la muy idealizada Ec. (2.21).

2.6.2. Fenomenología de la decoherencia en el transporte electrónico

Como resultado de los límites experimentales para la descripción coherente del transporte que hemos visto, es esperable que se observen diferencias notables de las predichas por Landauer. Sin embargo, sus ideas inspiraron a M. Büttiker [Büt86], quien desarrolló un modelo fenomenológico para incluir la decoherencia en el transporte cuántico. En su visión, electrones provenientes de distintos reservorios no preservan relación de fase alguna entre ellos, ya que en estos las interacciones que sufren son de carácter irreversible. Por este motivo se dice que los reservorios conectados a cada terminal son la última fuente de irreversibilidad y decoherencia. Büttiker [Büt88] tuvo la original idea de que cada voltímetro es un fuente de decoherencia. En efecto, un voltímetro actúa dispersando partículas inelásticamente y no debe extraer partículas de la muestra, así que por cada una que sale, inyecta otra. Así, las corrientes pueden ser descritas mediante el formulación de Landauer junto con las ecuaciones de balance de Kirchoff, en lo que se denominan ecuaciones de Landauer-Büttiker [Büt86]. En notación matricial, cuando la muestra está conectada a un único voltímetro, se tiene

$$\begin{pmatrix} I_L \\ I_\phi \\ I_R \end{pmatrix} = \frac{e^2}{h} \begin{pmatrix} -[T_{RL} + T_{\phi L}] & T_{L\phi} & T_{LR} \\ T_{\phi L} & -[T_{R\phi} + T_{L\phi}] & T_{\phi R} \\ T_{RL} & T_{R\phi} & -[T_{\phi R} + T_{LR}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_L \\ V_\phi \\ V_R \end{pmatrix},$$

donde las incógnitas son I_L , I_R y voltajes $V_\phi = \delta\mu_\phi/e$. La segunda ecuación debe resolverse considerando que en el voltímetro se satisface la condición de corriente nula, $I_\phi \equiv 0$:

$$0 = \frac{e}{h} T_{\phi L} (\delta\mu_\phi - \delta\mu_L) + \frac{e}{h} T_{R\phi} (\delta\mu_\phi - \delta\mu_R),$$

que nos da $\delta\mu_\phi$ y que, al reemplazar su valor en la tercera ecuación nos da

$$I_R = \frac{e}{\hbar} T_{RL} (\delta\mu_L - \delta\mu_R) + \frac{e}{\hbar} T_{R\phi} (\delta\mu_L - \delta\mu_\phi),$$

para obtener la corriente

$$I_R = \frac{e}{\hbar} \tilde{T}_{RL} (\delta\mu_L - \delta\mu_R).$$

Es decir, se han decimado las ecuaciones de Kirchoff para obtener una conductancia efectiva $\tilde{\mathcal{G}}_{RL} = (e^2/h) \tilde{T}_{RL}$ en donde

$$\tilde{T}_{RL} = T_{RL} + \frac{T_{R\phi} T_{\phi L}}{T_{R\phi} + T_{\phi L}} \quad (2.22)$$

El primer término en la Ec. (2.22) puede identificarse con la parte coherente, ya que representa la probabilidad de que un electrón viaje desde L hacia R , como si el voltímetro no estuviera. Contrariamente, el segundo término se asocia con la parte incoherente, dado que representa la contribución a la corriente de aquellas partículas que han interactuado con el ambiente (en la versión de Büttiker habrían sido inyectadas por el voltímetro).

El siguiente paso sería conectar estas cantidades con un modelo Hamiltoniano. Esto ha sido hecho explícitamente por DP [DP90]. En su modelo, el escape de electrones hacia los voltímetros está identificado con procesos de dispersión de los electrones por interacción con el ambiente \mathcal{E} . Estos procesos ocurren a una tasa dada por la FGR.

2.7. Modelo D'Amato Pastawski

Extendiendo la idea de Büttiker de considerar voltímetros ficticios para modelar los eventos de desfase local de electrones, DP [DP90] desarrollaron el tratamiento de la decoherencia en el transporte mediante modelos Hamiltonianos, considerando una distribución arbitraria de N procesos de interacción con el ambiente. Cada uno de estos procesos puede ser tratado como si fuera voltímetro local. En el límite de respuesta lineal, estos no alteran la energía ni la densidad de los electrones, pero sí modifican sus fases aleatoriamente y pueden ser representadas como partes imaginarias en la energía de sitio. Esto produce una incertidumbre en la energía y por ese motivo los denominamos eventos de desfase. Clave en el modelo DP fue aprovechar el resultado de Fisher y Lee, que las transmitancias pueden ser escritas en términos de las partes imaginarias de las autoenergías. Precisamente, esta conexión es la que le permitió a Pastawski desarrollar una linealización de las ecuaciones de campo en el formalismo de Keldysh, que se reduce a un sistema de ecuaciones Landauer y Büttiker. Este material, contenido en los artículos [Pas91, Pas92, PM01, ÁDLP06] se compendia en el Apéndice 2.12. En lo que sigue, continuaremos la discusión usando la versión simplificada GLBE.

Consideremos que la muestra está modelada por una cadena unidimensional *tight binding*, puede escribirse en términos de los operadores estándar de creación (destrucción) \hat{c}_i^\dagger (\hat{c}_j) en segunda cuantización:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N E_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i - \sum_{i=1(i \neq j)}^N V_{ij} \left(\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i \right), \quad (2.23)$$

donde E_i es la autoenergía del estado $|i\rangle$ y V_{ij} es la magnitud del acople entre los sitios i y j .

En el modelo DP, tanto las terminales de corriente como los conductores conectados a voltímetros ficticios, están representadas por cadenas unidimensionales semi-infinitas *tight binding*, acopladas a primeros vecinos, que están conectadas a la muestra y que representan los grados de libertad del ambiente. La tasa de decaimiento de las partículas que escapan hacia los voltímetros está dada por la FGR $1/\tau_{SE} = 2\Gamma_\phi/\hbar$ (Ver Ec. (2.41) del Apéndice 2.11), donde Γ_ϕ se asocia a una incerteza en la energía, producida por las interacciones \mathcal{SE} , que en este caso están representadas por las terminales conectadas a los voltímetros ficticios. Las incertezas en la energía se asocian con el corrimiento de los autovalores del Hamiltoniano efectivo hacia al plano complejo, que sólo modifican las energías de sitio del Hamiltoniano *tight binding* de la muestra. Así, los eventos de desfase local, eventualmente calculados mediante la FGR, están representados por

$$\hat{\Sigma}_\phi = \sum_{i=1}^N -i\Gamma_{\phi i} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i, \quad (2.24)$$

donde $\Gamma_{\phi i}$ representa esa incerteza debido a que las interacciones con ϕ mezclan los estados electrónicos locales con los grados de libertad del ambiente. Cada sitio i puede estar conectado a diferentes procesos de decaimiento, aquellos procesos de desfase debido a la presencia de voltímetros ficticios ϕ , y aquellos procesos que surgen del acople con las terminales de la fuente de corriente, identificados por los reservorios L y R . Estos últimos podrían ser representados también por cadenas semi-infinitas. En cualquier caso, el resultado tendrá la forma

$$\hat{\Sigma}_\phi^{term} = -i \left(\Gamma_L \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1 + \Gamma_R \hat{c}_N^\dagger \hat{c}_N \right) \quad (2.25)$$

Notemos que el sitio 1 está conectado a los dos procesos, el escape hacia las terminales (Γ_L) y el escape, y eventual reinyección, hacia el “voltímetro” ($\Gamma_{\phi 1}$). Para simplificar la notación, se define la transmitancia total como:

$$\frac{1}{g_i} \equiv \sum_{j=1}^{N+1} T_{ji}.$$

Luego, la ecuación de balance, al imponer la restricción de corriente neta nula a través de los N canales de decoherencia, $I_{\phi i} \equiv 0$, tiene la forma:

$$I_i \equiv 0 = - \left(\frac{1}{g_i} \right) \delta\mu_i + \sum_{\alpha} \sum_{j=1}^N T_{ij} \delta\mu_j, \quad (2.26)$$

procesos sitios

donde el primer término representa a los electrones cuya última colisión decoherente se produjo en el sitio i . El segundo término representa a los electrones cuya última

colisión con el proceso α se produjo en el sitio j y de ahí se propagaron coherentemente hacia el sitio i donde. En la suma están incluidos los electrones que provienen del reservorio que actúa como fuente de electrones ($T_{iL}\delta\mu_L$) y los que provienen del reservorio que actúa como drenaje ($T_{iR}\delta\mu_R$). Sin embargo, como hemos tomado como referencia el reservorio L , entonces $T_{iR}\delta\mu_R \equiv 0$.

$$I_L \equiv -I = -\left(\frac{1}{g_i}\right)\delta\mu_L + \sum_{j=0}^N T_{ij}\delta\mu_j,$$

$$I_R \equiv I = -\left(\frac{1}{g_i}\right)\delta\mu_i + \sum_{j=0}^{N+1} T_{ij}\delta\mu_j.$$

Para hallar los potenciales químicos conviene utilizar una notación más compacta, definiendo la matriz \mathbb{W} como

$$\mathbb{W} = \begin{bmatrix} T_{11} - \frac{1}{g_1} & T_{12} & T_{13} & \cdots & T_{1N} \\ T_{21} & T_{22} - \frac{1}{g_2} & T_{23} & \cdots & T_{2N} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} - \frac{1}{g_3} & \cdots & T_{3N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{N1} & T_{N2} & T_{N3} & \cdots & T_{NN} - \frac{1}{g_N}. \end{bmatrix}$$

Luego, los potenciales pueden ser calculados como

$$\delta\mu_i = \sum_{j=1}^N [\mathbb{W}]_{ij}^{-1} T_{j0}\delta\mu_0.$$

Es decir:

$$I_R = \frac{e}{h} T_{RL}(\delta\mu_L - \delta\mu_R) + \frac{e}{h} T_{R\phi} \sum_{j=1}^N [\mathbb{W}]_{ij}^{-1} T_{j0}(\delta\mu_L - \delta\mu_R),$$

En el apéndice mostramos brevemente cómo, en la aproximación GLBE, $I_R = V_{N,N+1}G_{N+1,N}^< - V_{N+1,N}G_{N,N+1}^<$ y a su vez la función densidad se desdobra en un término coherente y uno incoherente. Es claro que la transmitancia efectiva entre las terminales R y L , que se obtiene al reemplazar esta expresión en la Ec. (2.26):

$$\tilde{T}_{RL} = T_{RL} + \sum_{i,j} T_{L,i} [\mathbb{W}^{-1}]_{i,j} T_{j,R} \quad (2.27)$$

$$= T_{RL}^{(coh.)} + T_{RL}^{(inc.)}, \quad (2.28)$$

donde la suma se realiza sobre los N canales decoherentes. La Ec. (2.27) provee la probabilidad de transmisión efectiva del modelo DP de dos terminales [DP90]. Nuevamente, el primer término se identifica con la parte coherente, la transmitancia usual (sin reinyección), mientras que el segundo representa la contribución a la corriente de las partículas que sufrieron interacciones con el ambiente (término incoherente). Una extensión de la formulación matricial original del modelo DP de dos

terminales a un problema multi-terminal, implementada en forma de un algoritmo eficiente, puede hallarse en la Ref. [CFABM⁺14].

En lo que sigue, estudiaremos el transporte electrónico en un doble pozo cuántico, que se puede modelar como un TLS perturbado. Ya mostramos que éste puede representar una dinámica efectiva de dos espines en interacción con un ambiente de espines. Los efectos de la decoherencia están incluidos en el Hamiltoniano (por ejemplo, interacciones electrón-fonón o electrón-electrón), a través de una corrección imaginaria en las energías del sitio seleccionado.

2.8. Conductancias en pozos cuánticos dobles

En primer lugar, analizamos los casos en los que las terminales de corriente están acoplados a un único pozo cuántico el cual a su vez tiene un acoplamiento con un pozo cuántico lateral, como se muestra en la parte superior de la Fig. 2.6. La interacción con el ambiente puede actuar sobre cada uno de ellos individualmente, como en la Ec. (2.12), lo que llamamos ambiente quiral. Alternativamente el ambiente puede actuar con la misma magnitud sobre cada uno de ellos. Este último caso lo denominamos ambiente aquiral o simétrico.

Otra posibilidad es que las terminales de corriente estén conectados uno en cada pozo resonante. En ese caso solo los electrones que salten de uno a otro contribuirán al transporte. Por supuesto, el valor de la transmitancia dependerá de cómo se coloquen las terminales. Las transmitancias coherentes pueden ser calculadas a partir de la Ec. (2.21), mientras que las transmitancias efectivas requieren del cálculo de la Ec. (2.27), consistentemente con el formalismo de Keldysh-Kadanoff-Baym que se detalla en el apéndice.

Pueden resultar suficientemente representativos si consideramos que el acoplamiento de los contactos es $V_L = V_R = 0,1 \times V$ mientras que $V_{AB} = 0,04 \times V$. La interacción con los ambientes se tomará como variable paramétrica. La energía de Fermi ε también es considerada una variable paramétrica. En un diseño experimental podría controlarse con un potencial global de pistón (*plunger voltage*) controlado por un capacitor.

2.8.1. Pozo resonante acoplado a pozo lateral con ambiente quiral

Cuando ambos terminales se colocan en el sitio que no está interactuando directamente con el ambiente, el sitio A , como está esquematizado en la parte superior derecha de la Fig. 2.6

Como siempre, el cálculo comienza evaluando las GF G_{AA} y G_{AB} que en este caso están dadas por

$$G_{AA} = \frac{1}{\varepsilon - \tilde{E}_A + i(\Gamma_{A1} + \Gamma_{A2}) - \frac{V_{AB}^2}{\varepsilon - E_B + i\Gamma_\phi}},$$

$$G_{AB} = \frac{-V_{AB}}{(\varepsilon - E_B + i\Gamma_\phi) \left(\varepsilon - \tilde{E}_A + i(\Gamma_{A1} + \Gamma_{A2}) \right) - V_{AB}^2}.$$

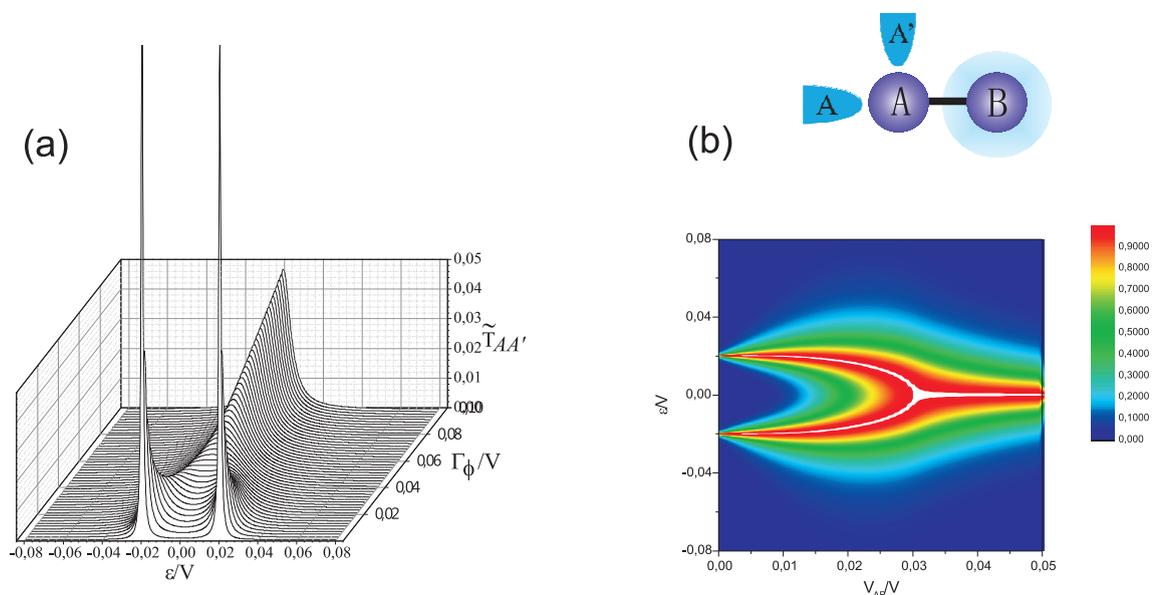


Figura 2.6: En (a) están representadas las curvas de transmitancia efectiva en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para el sistema esquematizado en la parte superior derecha de esta Figura (Pozo resonante acoplado a pozo lateral con ambiente quiral). En (b) se grafican las mismas curvas normalizadas a su máximo valor.

Aquí hemos definido $\tilde{E}_A = E_A - (\Delta_{A1} + \Delta_{A2})$.

La transmitancia efectiva resulta de sumar el término coherente y uno incoherente:

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{A1A2} &= 2\Gamma_{A1} |G_{AA}|^2 2\Gamma_{A2} + 2\Gamma_{A1} \frac{2\Gamma_{B\phi} |G_{AB}|^2}{(2\Gamma_{A1} + 2\Gamma_{A2})} 2\Gamma_{A2} \\ \tilde{T}_{A1A2} &= 4\Gamma_{A1} \left\{ \Gamma_{A1} |G_{AA}|^2 + \frac{\Gamma_{B\phi} |G_{AB}|^2}{2} \right\}. \end{aligned}$$

La notación se simplifica si suponemos que $\Gamma_{A1} \equiv \Gamma_{A2} = \Gamma_A$, y denotamos $\Gamma_{B\phi} \equiv \Gamma_\phi$ con lo que resulta:

$$\tilde{T}_{A1A2} = 2\Gamma_A \left\{ 2\Gamma_A |G_{AA}|^2 + \Gamma_\phi |G_{AB}|^2 \right\}, \quad (2.29)$$

En este caso encontramos que cuando se mueve la energía de Fermi ϵ hay una transición entre dos regímenes. La Fig. 2.6 (a) representa las curvas de transmitancia efectiva para diferentes valores de Γ_ϕ . Notemos que se pone de manifiesto una transición entre una región con dos picos bien resueltos cuya separación supera ampliamente su propio ancho y una región con un único pico cuya altura aumenta y su ancho disminuye con la tasa de decaimiento del proceso de decoherencia Γ_ϕ .

Cuando la tasa de decoherencia es pequeña, $\Gamma_\phi \approx 0$, se observan dos picos bien resueltos, centrados en las autoenergías del Hamiltoniano no-perturbado $\pm V_{AB}$. Estos picos tienen una forma aproximadamente Lorentziana y su ancho es $2\Gamma_A$. Esto

puede observarse al evaluar la expresión para la transmitancia efectiva en el límite $\Gamma_\phi \rightarrow 0$,

$$\tilde{T}_{A1A2} \approx \frac{(\Gamma_A \varepsilon)^2}{\left(\frac{\varepsilon + V_{AB}}{2}\right)^2 \left(\frac{\varepsilon - V_{AB}}{2}\right)^2 + (\Gamma_A \varepsilon)^2}. \quad (2.30)$$

Los picos de transmitancia unidad aparecen en $\pm V_{AB}$ y es posible recuperar la Lorentziana al evaluar la Ec. (2.30) en una energía ε dentro de un entorno pequeño alrededor de $\pm V_{AB}$. La transmitancia en $\varepsilon = 0$ se incrementa a medida que aumenta Γ_ϕ y la altura de los picos disminuye mientras experimentan un ensanchamiento. Este colapso ya está presente a nivel de los polos de la GF, como ya hemos mencionado. Para el caso en que la interacción con el ambiente es muy intensa, es decir $\Gamma_\phi \gg V_{AB}$, la transmitancia toma la forma

$$\tilde{T}_{A1A2} \approx \frac{2\Gamma_A \left(\Gamma_A + \frac{V_{AB}^2}{\Gamma_\phi}\right)^2}{\left(2\Gamma_A + \frac{V_{AB}^2}{\Gamma_\phi}\right)^2 + \varepsilon^2}. \quad (2.31)$$

La Ec. 2.31 es la expresión que corresponde a la transmitancia efectiva en la región con un único pico, que también toma forma de una Lorentziana centrada en $\varepsilon = 0$ y de ancho $2\Gamma_A + \frac{V_{AB}^2}{\Gamma_\phi}$. Este colapso de picos representa una situación en la cual la interacción entre el sitio B con \mathcal{E} es lo suficientemente intensa tal que el ambiente absorbe este segundo *punto cuántico* que en vez de ser un estado discreto pasa a comportarse, a través de la FGR con el ambiente, como un continuo. Es por ello que la interacción entre los sitios A y B se vuelve perturbativa respecto de la interacción dominante de B con \mathcal{E} . Su contribución al transporte resonante es ensancharlo a través de una FRG *anidada*, en que la incertidumbre de la FGR del segundo pozo es sensada por el primero a través del acoplamiento V_{AB}^2 . Como consecuencia, la transmitancia se muestra como una medición llevada a cabo sobre un sistema de un único nivel de energía efectivo perturbado ligeramente por la presencia del ambiente, que actúa a través del sitio B . Esta situación hace que se observe un único pico de transmitancia cuando la interacción con el ambiente aumenta.

Estos límites disímiles evidencian la presencia de una QDPT entre el régimen de dos sitios fuertemente acoplados, perturbados por un ambiente (dos picos de transmitancia), y el régimen de un único sitio efectivo que interactúa con un ambiente (un único pico de transmitancia). El colapso se pone de manifiesto claramente en la Fig. 2.6 (b). En ella se muestran curvas de transmitancia efectiva normalizadas a su máximo valor en función de la energía para diferentes valores de Γ_ϕ . La línea blanca representa el máximo de transmitancia y muestra el colapso de dichos máximos. Vemos que a medida que aumenta Γ_ϕ , el ancho del pico de transmitancia disminuye hasta alcanzar el mínimo ancho correspondiente a la resonancia aislada. Esto se observa por la región de color verde alrededor del máximo.

Sólo mostramos la transmitancia efectiva dado que la diferencia entre las transmitancias coherente e incoherente es meramente cuantitativa debido a que en este caso el término que asegura la conservación de la carga también está controlado por

la misma GF que controla la propagación coherente.

2.8.2. Pozo con ambiente quirral acoplado a pozo resonante lateral

El siguiente paso es analizar una situación en la que las terminales se conectan al sitio B , que está acoplado directamente al ambiente, como está esquematizado en la parte superior derecha de la Fig. 2.7. En este caso, la GF toma la forma

$$G_{BB} = \frac{1}{\varepsilon - \bar{E}_B + i(\Gamma_{B1} + \Gamma_{B2} + \Gamma_\phi) - \frac{V_{AB}^2}{\varepsilon - E_A}},$$

donde $\bar{E}_B = E_B - (\Delta_{B1} + \Delta_{B2})$.

Así, la transmitancia efectiva resulta:

$$\tilde{T}_{B1B2} = 2\Gamma_{B1} |G_{BB}|^2 2\Gamma_{B2} + \frac{(2\Gamma_{B1} |G_{BB}|^2 2\Gamma_{B\phi}) (2\Gamma_{B\phi} |G_{BB}|^2 2\Gamma_{B2})}{2\Gamma_{B1} |G_{BB}|^2 2\Gamma_{B\phi} + 2\Gamma_{B\phi} |G_{BB}|^2 2\Gamma_{B2}}.$$

La expresión se simplifica si consideramos que $\Gamma_{B1} = \Gamma_{B2} \equiv \Gamma_B$ y nuevamente $\Gamma_{B\phi} \equiv \Gamma_\phi$:

$$\tilde{T}_{B1B2} = 2\Gamma_B |G_{BB}|^2 \{2\Gamma_B + \Gamma_\phi\}. \quad (2.32)$$

A diferencia del caso anterior, aunque la GF tiene un punto crítico en su espectro, que involucra un colapso en la parte real de sus polos, en la *porción coherente del observable conductancia* no se evidencia ningún colapso de picos. Esta situación se muestra en la Fig. 2.7. A medida que Γ_ϕ aumenta, la altura de los picos disminuye, pero la distancia entre ellos se mantiene constante. Sin embargo, aparece un fenómeno muy peculiar y de naturaleza inherentemente cuántica. Cuando no hay decoherencia, los electrones que circulan por el sistema pueden tomar diferentes caminos. Un electrón que entra al sistema por una de las terminales conectadas al sitio B puede salir del sistema directamente a través de la otra terminal, sin pasar por el sitio A , pero también es posible que luego de ingresar al sistema por una terminal conectada a B , salte al sitio A y luego retorne a B , para finalmente abandonar el sistema. Este proceso puede repetirse de modo que el electrón puede oscilar entre A y B un cierto número de veces antes de abandonar la muestra. En consecuencia, los electrones que toman diferentes caminos pueden interferir, constructiva o destructivamente. Cuando $\varepsilon = 0$, el acoplamiento de los electrones en tránsito con el pozo lateral se vuelve divergente y los sustrae del estado de transporte. En este caso la transmitancia en $\varepsilon = 0$ se anula. Este mínimo en la conductancia no debe confundirse con la interferencia destructiva que puede aparecer entre electrones que han tomado distintos caminos. En tal caso, la dependencia de $1/T$ en ε podría aproximarse por una curva Lorenziana, lo que llevó a introducir el concepto de *antiresonancia* en la conductancia [LPD90, DPW89]. Actualmente, se suele denominar también resonancia de Fano, ya que se asocia con un mínimo en la sección eficaz de ionización, que Ugo Fano describió en términos interferencia de un proceso resonante con un

continuo [Fan61]. En el caso de la antiresonancia, la divergencia ocurre en uno de los términos que contribuyen a un propagador y que asegura su interferencia destructiva [MFK10]. Por el contrario, en nuestro caso la divergencia ocurre en el denominador del propagador. Esta particularidad indica una *interferencia autodestructiva*, cuando el electrón salta hacia el punto cuántico lateral con la energía adecuada, que asegura $\tilde{T}_{(\varepsilon=E_A)} = 0$. En este sentido, sería apropiado adoptar el nombre *antiresonancia fantasma*, en analogía con el concepto de *ghost Fano resonance* introducido por F. Claro y colaboradores [LCO03].

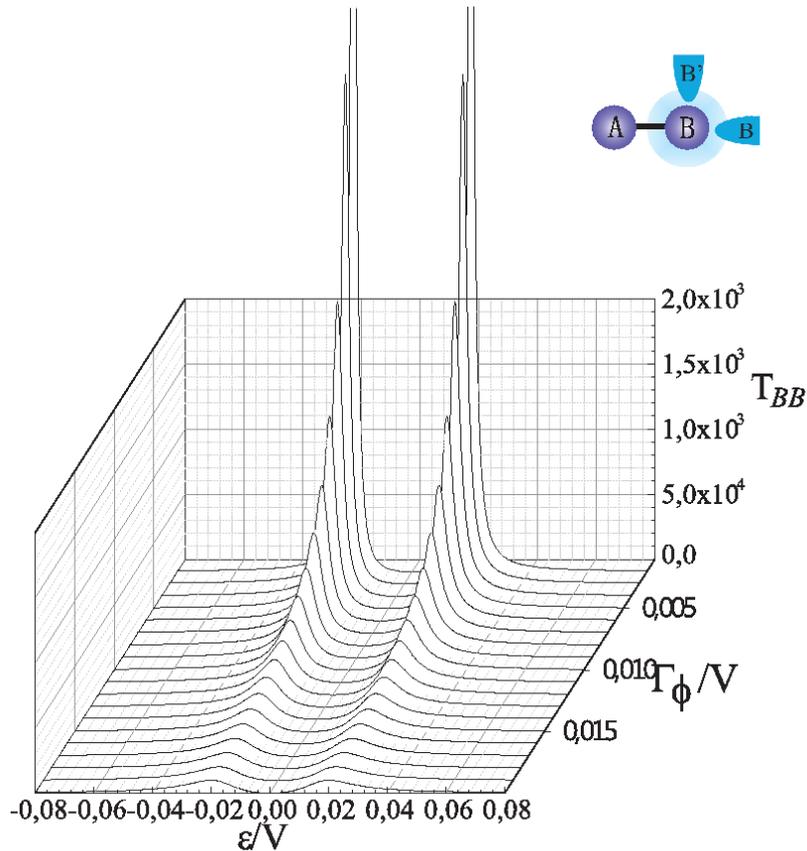


Figura 2.7: Transmitancia coherente o directa en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para el sistema esquematizado en la parte superior derecha de esta Figura (Pozo con ambiente quirál acoplado a pozo resonante lateral).

Uno podría esperar que la situación de antiresonancia descrita más arriba no sobreviva al considerar conservación de carga. Hemos mencionado que las terminales son una fuente de irreversibilidad y decoherencia. En este caso, el ambiente reinyecta un electrón por cada uno que se escapa en el sitio B , donde se conectan las terminales, lo que podría cambiar la situación. Por ello, uno podría pensar que la antiresonancia que se origina debido a la interferencia autodestructiva entre los electrones, desaparecerá cuando consideramos decoherencia, ya que los electrones reinyectados por el voltímetro no mantienen relación de fase alguna con los de la muestra. Sin embargo, el fenómeno de la antirresonancia fantasma sorprendente-

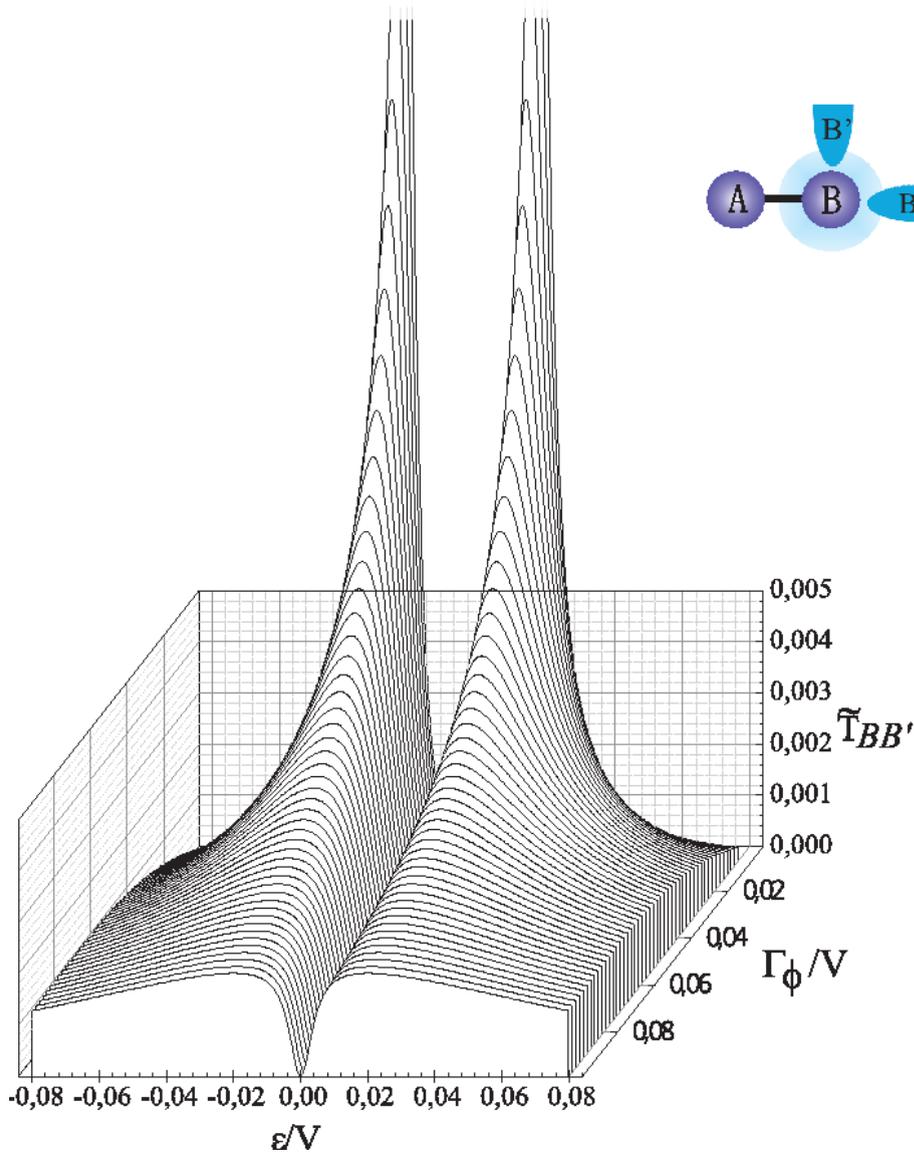


Figura 2.8: Curvas de transmitancia efectiva en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para el sistema esquematizado en la parte superior derecha de esta Figura (Pozo con ambiente quiral acoplado a pozo resonante lateral).

mente persiste, ya que la transmitancia efectiva aún se anula en $\epsilon = 0$, coincidente con una divergencia en el denominador la GF, como podemos ver en las curvas de la transmitancia efectiva de la Fig. 2.8.

Si bien estos electrones inyectados no guardan relación de fase con los del sistema, sí pueden interferir consigo mismos. La simetría particular que presenta el sistema hace que resulte irrelevante la terminal por donde el electrón ha sido inyectado, incluyendo los procesos de reinyección que ocurren en el voltímetro. En cualquier caso, siempre se presentan las interferencias destructivas debido a la superposición de los distintos caminos en $\epsilon = 0$, como se describió anteriormente. Luego, no hay

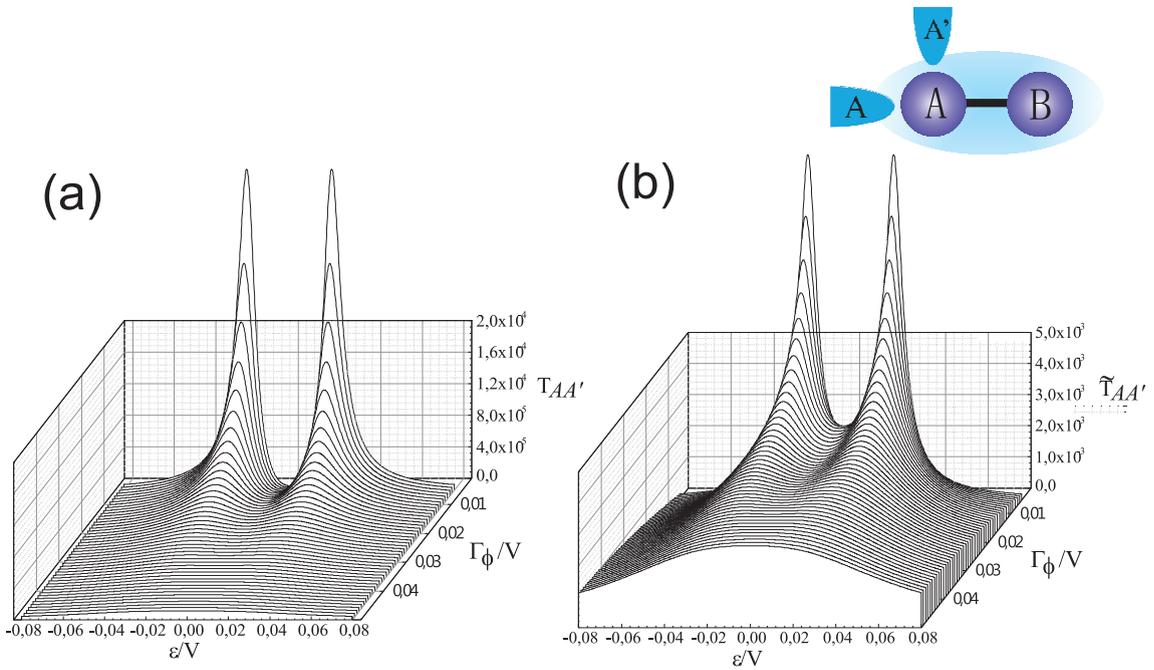


Figura 2.9: Curvas de transmitancia (a) directa y (b) efectiva en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para el sistema esquematizado en la parte superior derecha de esta Figura (Pozo resonante acoplado a pozo lateral con ambiente no-quiral).

ningún camino que permita transportar electrones a esta energía.

2.8.3. Pozo resonante acoplado a pozo lateral con ambiente no-quiral

Si la perturbación del ambiente es simétrica, el comportamiento analítico de los polos de la GF no presenta bifurcaciones por no hay QDPT al nivel del Hamiltoniano. Sin embargo, en tal situación, como ya hemos mencionado, ha sido reportado un comportamiento crítico mediante las GLBE. Por ello, es lícito preguntarse si en el contexto del transporte electrónico podría esperarse una QDPT.

Cuando los cables están conectados al mismo sitio, la transmitancia efectiva toma la forma:

$$\begin{aligned}
 \tilde{T}_{A_1A_2} &= \tilde{T}_{B_1B_2} = T_{A_1A_2} + T_{A_2\phi_2} [T_{\phi_1A_2}/W_1 + T_{\phi_1\phi_2}T_{\phi_1A_1}/W] \\
 &+ T_{A_1\phi_2} [T_{\phi_2\phi_1}T_{\phi_1A_2}/W + T_{\phi_1A_1}/W_2] \\
 &= T_{A_1A_2} + T_{A_2\phi_2} [T_{\phi_1A_2}/W_1 + T_{\phi_1\phi_2}T_{\phi_1A_1}/W] \\
 &+ T_{A_1\phi_2} [T_{\phi_2\phi_1}T_{\phi_1A_2}/W + T_{\phi_1A_1}/W_2],
 \end{aligned}$$

donde, para simplificar la notación, hemos definido

$$\begin{aligned} W &= (T_{A2\phi2} + T_{A1\phi2} + T_{\phi1\phi2})(T_{A2\phi1} + T_{A1\phi1} + T_{\phi2\phi1}) - (T_{\phi2\phi1})^2, \\ 1/W_1 &= (T_{A2\phi1} + T_{A1\phi1} + T_{\phi2\phi1})/W \\ 1/W_2 &= (T_{A2\phi2} + T_{A1\phi2} + T_{\phi1\phi2})/W. \end{aligned}$$

En este caso, se puede observar que a medida que Γ_ϕ aumenta, los picos de transmitancia se ensanchan hasta que su propio ancho supera la separación entre ambos. Cuando esto sucede, ya no es posible distinguirlos, como puede verse en las Figs. 2.10 (a) y (b) para la transmitancia directa y la efectiva respectivamente. Como consecuencia de este *ensanchamiento*, a medida que Γ_ϕ aumenta, comienza a verse un único pico ancho cuya altura no aumenta. Por eso, nuestra interpretación es que se trata de una simple superposición de los picos Lorentzianos ensanchados, aunque no podría descartarse totalmente que haya una QDPT oculta tras ese un único pico.

2.8.4. Doble pozo resonante con ambiente quiral

Queremos analizar el caso en el que las terminales se conectan en diferentes sitios, como está esquematizado en la parte superior derecha de la Fig. 2.10. De la evaluación de las GF G_{BB} y G_{AB} resulta:

$$\begin{aligned} G_{BB} &= \frac{1}{\varepsilon - \tilde{E}_B + i(\Gamma_{B2} + \Gamma_\phi) - \frac{V_{AB}^2}{\varepsilon - \tilde{E}_A + i\Gamma_{A1}}}, \\ G_{AB} &= \frac{-V_{AB}}{\left(\varepsilon - \tilde{E}_B + i(\Gamma_{B2} + \Gamma_\phi)\right) \left(\varepsilon - \tilde{E}_A + i\Gamma_{A1}\right) - V_{AB}^2}, \end{aligned}$$

donde $\tilde{E}_B = E_B - \Delta_{B2}$, $\tilde{E}_A = E_A - \Delta_{A1}$. En este caso, podemos calcular la transmitancia efectiva,

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{A1B2} &= 2\Gamma_{A1} |G_{AB}|^2 2\Gamma_{B2} + \frac{(2\Gamma_{A1} |G_{AB}|^2 2\Gamma_{B\phi}) (2\Gamma_{B2} |G_{BB}|^2 2\Gamma_{B\phi})}{2\Gamma_{A1} |G_{AB}|^2 2\Gamma_{B\phi} + 2\Gamma_{B2} |G_{BB}|^2 2\Gamma_{B\phi}} \\ &= 2\Gamma_B |G_{AB}|^2 \left\{ 2\Gamma_B + 2\Gamma_\phi \frac{|G_{BB}|^2}{|G_{AB}|^2 + |G_{BB}|^2} \right\} \end{aligned}$$

donde consideramos $\Gamma_{A1} = \Gamma_{B2} \equiv \Gamma_B$. Reordenando, obtenemos:

$$\tilde{T}_{A1B2} = \left[4\Gamma_B^2 |G_{AB}|^2 + 4\Gamma_B \Gamma_\phi \frac{|G_{AB}|^2 |G_{BB}|^2}{|G_{AB}|^2 + |G_{BB}|^2} \right].$$

Observamos que efectivamente hay un colapso de picos en la transmitancia directa o coherente, que está representada en la Fig. 2.10 (a). Como es usual, si Γ_ϕ es pequeño se observan los dos picos de transmitancia y cuando $\Gamma_\phi \gg V_{AB}$ observamos un único pico. En este caso, los electrones inyectados en A pueden escaparse a una tasa Γ_ϕ debido a la perturbación por el ambiente en el sitio B , o hacia el reservorio

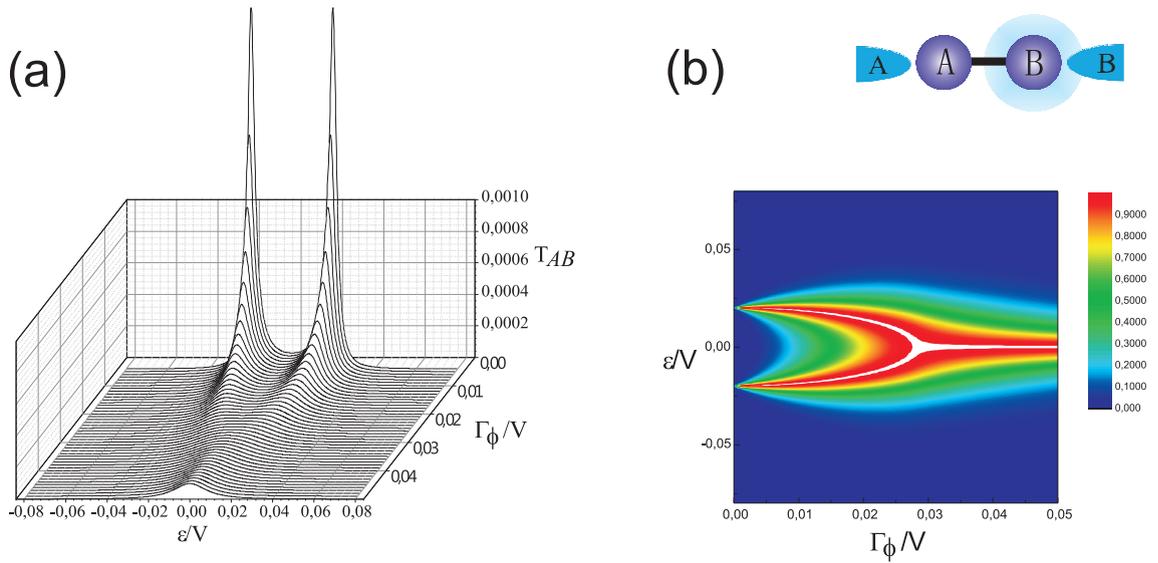


Figura 2.10: Curvas de transmitancia directa o coherente para el sistema esquematizado en la parte superior derecha de esta Figura (Doble pozo resonante con ambiente quiral) (a) en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente y (b) normalizadas a su máximo valor.

que está acoplado a este sitio, con una tasa Γ_B . Esto define tiempos de vida media para el electrón en el sitio B , τ_ϕ y τ_B , que indican los respectivos procesos de decaimiento, donde $\tau_\phi = \hbar/2\Gamma_\phi$ y $\tau_B = \hbar/2\Gamma_B$. Entonces, en la región correspondiente a un único pico de transmitancia se cumple que $\tau_\phi \ll \tau_B$, por lo que la mayor parte de los electrones que arriban al sitio B , se escapan hacia el ambiente ϕ . Los pocos electrones que escapan por el reservorio conectado a B (que son medidos en la transmitancia T_{AB}), tendrán que hacerlo en una escala de tiempo menor que τ_ϕ . Por este motivo, las partículas que efectivamente son medidas, ven al sistema como si éste fuera un sistema efectivo de un único sitio, dado que el tiempo en el que permanecieron en B es muy pequeño. Como consecuencia, los dos picos de la transmitancia colapsarán al aumentar Γ_ϕ , exhibiendo una QDPT. En la figura 2.10 (b) se evidencia claramente el colapso de picos, así como también la disminución del ancho del pico único en el régimen en que $\Gamma_\phi \gg V_{AB}$.

Cuando se considera reinyección, los caminos recorridos por los electrones que han interactuado con el ambiente pueden interferir consigo mismos. Al emerger de una colisión, pueden escapar hacia las terminales o hacia el pozo vecino. La interferencia entre ambas posibilidades, como se describió anteriormente, resulta en una antiresonancia fantasma bien definida. Es notable que este fenómeno se muestra sólo en la transmitancia incoherente. Sumando ambos términos para obtener $\tilde{T}_{AB} = T_{coh} + T_{inc}$ ($T_{coh} \equiv T_{AB}$), se observa que la QDPT está oculta debido a la antiresonancia fantasma que domina el proceso, como puede verse claramente en la Fig. 2.11. Aquí se observa que la antiresonancia fantasma en el transporte incoherente está montada sobre la QDPT presente en la transmitancia coherente. La interferencia destructiva asociada con la antiresonancia fantasma no se desarrolla

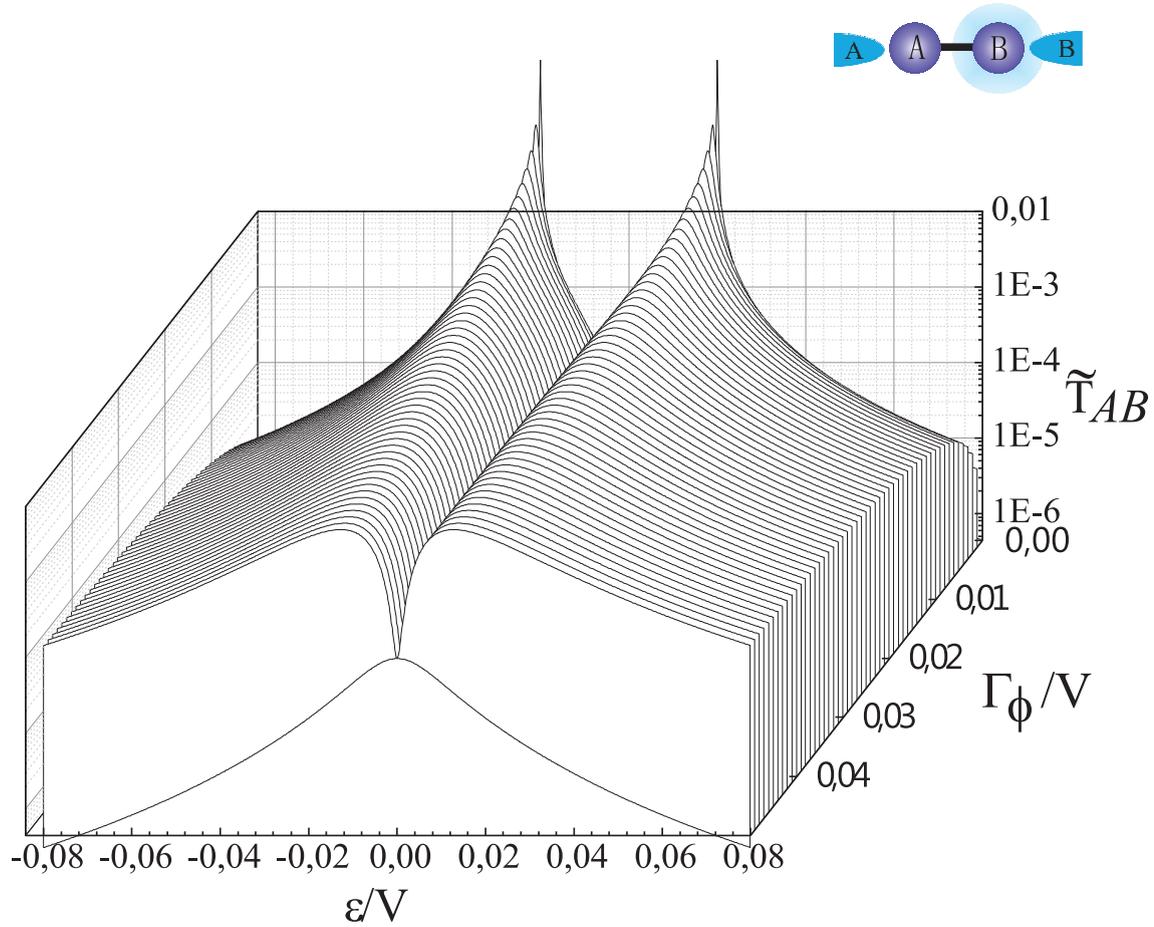


Figura 2.11: Transmitancia efectiva en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para el sistema esquematizado en la parte superior derecha de esta Figura (Doble pozo resonante con ambiente quirral) (a) en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente y (b) normalizadas a su máximo valor.

cuando no se considera la reinyección, y es por eso que $T_{coh}(\varepsilon = 0) \neq 0$ y por lo tanto, $\tilde{T}_{AB}(\varepsilon = 0) = T_{coh} + T_{inc} \neq 0$.

2.8.5. Doble pozo resonante con ambiente no-quiral

Cuando se conectan las terminales en diferentes sitios, la transmitancia efectiva toma la forma:

$$\begin{aligned}
 \tilde{T}_{A1B2} &= T_{A1B2} + T_{B2\phi2} [T_{\phi1B2}/W_1 + T_{\phi1\phi2}T_{\phi1A1}/W] \\
 &+ T_{A1\phi2} [T_{\phi2\phi1}T_{\phi1B2}/W + T_{\phi1A1}/W_2] \\
 &= T_{A1B2} + T_{B2\phi2} [T_{\phi1B2}/W_1 + T_{\phi1\phi2}T_{\phi1A1}/W] \\
 &+ T_{A1\phi2} [T_{\phi2\phi1}T_{\phi1B2}/W + T_{\phi1A1}/W_2],
 \end{aligned}$$

donde $W = (T_{B2\phi2} + T_{A1\phi2} + T_{\phi1\phi2})(T_{B2\phi1} + T_{A1\phi1} + T_{\phi2\phi1}) - (T_{\phi2\phi1})^2$, $1/W_1 = (T_{B2\phi1} + T_{A1\phi1} + T_{\phi2\phi1}) /$ y $1/W_2 = (T_{B2\phi2} + T_{A1\phi2} + T_{\phi1\phi2}) / W$. En este caso, podemos observar que ocurre el

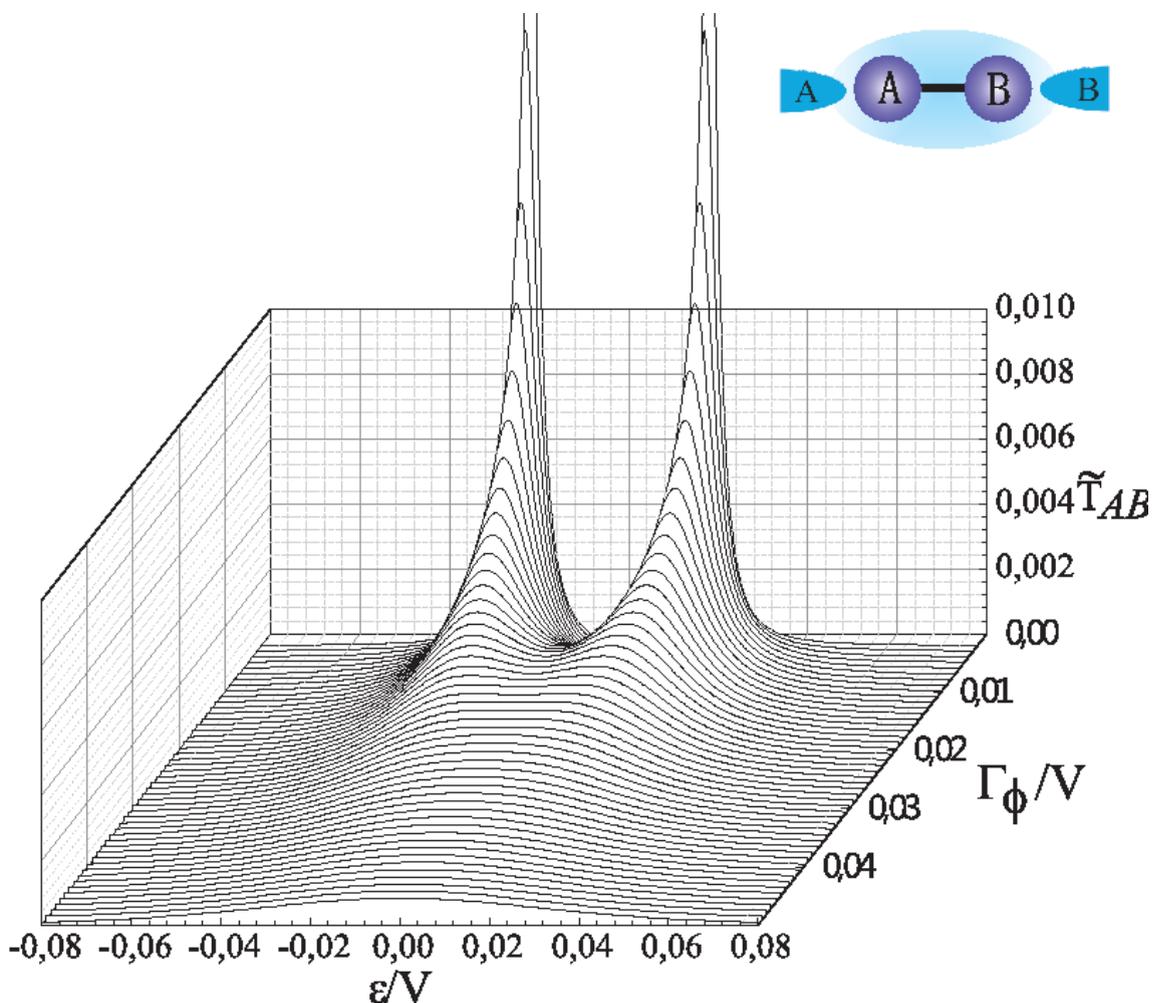


Figura 2.12: Curvas de transmitancia efectiva en función de la intensidad del acoplamiento con el ambiente para el sistema esquematizado en la parte superior derecha de esta Figura (Doble pozo resonante con ambiente no-quiral).

mismo efecto de ensanchamiento, como se ve en la Fig. 2.12. Cuando la perturbación afecta a ambos sitios por igual, no es posible capturar una QDPT. Este resultado está en concordancia con el comportamiento suave y analítico de los polos de la GF.

2.9. Conclusiones

Hemos estudiado sistemáticamente la transmitancia electrónica en un TLS conectado a procesos decoherentes que preservan la probabilidad. Las configuraciones consideradas pueden representar modelos de dispositivos de puntos cuánticos dobles y de punto cuántico lateral. Consideramos una simplificación de las GLBE para analizar si la conductancia es un buen testigo para observar la QDPT, que existe en un TLS cuando su dinámica es unitaria, distinguiendo los casos en los que la carga electrónica se conserva de los que no. En este sentido nuestro resultado es negativo,

ya que no observamos una QDPT a menos que ésta ya ocurra a nivel del Hamiltoniano efectivo. Y aún así, ésta no resulta una condición suficiente para la QDPT. La observación de una QDPT depende sutilmente de las reglas de selección de los observables específicos y si se trata de valores estacionarios o dinámicos.

Hemos observado que cuando un único estado del TLS es perturbado, la QDPT se exhibe en el comportamiento de la transmitancia efectiva, como un colapso de picos, análogamente a lo que ocurre con los polos de la GF. Sin embargo, para determinadas mediciones (sobre el sitio perturbado), esta QDPT está oculta debido a la presencia de una antiresonancia fantasma. Ésta surge como consecuencia de la interferencia autodestructiva del camino que acopla el electrón con energía de Fermi con el punto cuántico lateral, imposibilitando la transferencia electrónica a esa determinada energía, $\varepsilon = 0$.

Un fenómeno notable aparece cuando la interacción con el ambiente excede cierto valor. En tal caso, el ambiente puede absorber uno de los sitios y en consecuencia el sistema de dos niveles se comportará como un sistema efectivo de un único sitio.

2.10. Apéndice I: Método de decimación

La idea central del proceso de decimación consiste en la reducción progresiva del número de variables del sistema. Para ilustrarlo, consideremos un sistema finito pequeño, de tres sitios. La ecuación de Schrödinger correspondiente a este sistema, expresada en forma matricial, es:

$$[\varepsilon I - H] \vec{u} = \begin{bmatrix} \varepsilon - E_1 & -V_{1i} & -V_{12} \\ -V_{i1} & \varepsilon - E_i & -V_{i2} \\ -V_{21} & -V_{2i} & \varepsilon - E_2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_i \\ u_2 \end{pmatrix} \equiv 0. \quad (2.33)$$

Mediante la segunda ecuación, uno puede despejar u_i y reemplazarlo en la primera y la tercera, para obtener un sistema de ecuaciones reducido:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon - \bar{E}_1 & -\bar{V}_{12} \\ -\bar{V}_{21} & \varepsilon - \bar{E}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = 0, \quad (2.34)$$

donde

$$\begin{aligned} \bar{E}_1 &= E_1 + \Sigma_1(\varepsilon) = E_1 + V_{1i} \frac{1}{\varepsilon - E_i} V_{i1} \\ \bar{E}_2 &= E_2 + \Sigma_2(\varepsilon) = E_2 + V_{2i} \frac{1}{\varepsilon - E_i} V_{i2} \\ \bar{V}_{12} &= V_{12} + V_{1i} \frac{1}{\varepsilon - E_i} V_{i2} \end{aligned}$$

Los números reales $\Sigma_1(\varepsilon)$ y $\Sigma_2(\varepsilon)$ dan cuenta del desplazamiento de energía (autoenergía) producido por la interacción entre los sitios 1 y 2 con el sitio i eliminado. De esta manera, los estados 1 y 2 han sido renormalizados o vestidos por la presencia del sitio que ha sido eliminado. En la mayoría de los casos [PM01], una buena aproximación a las energías de sitio corregidas se obtiene al evaluarlas en el autovalor "viejo":

$$\begin{aligned} \bar{E}_1 &= E_1 + \Sigma_1(E_1) \\ \bar{E}_2 &= E_2 + \Sigma_2(E_2) \end{aligned} ,$$

que es equivalente a la teoría perturbativa de segundo orden. Aquí hemos partido de un problema de tres orbitales a un sistema efectivo de dos niveles. El procedimiento de decimación es exacto, muy simple, fácilmente generalizable y provee una manera sistemática de reducir la dimensión del Hamiltoniano. El costo que tiene es el de transformar un conjunto de ecuaciones lineales en un conjunto más pequeño de ecuaciones no-lineales.

La receta general es muy simple si el Hamiltoniano puede representarse mediante una matriz tridiagonal. Tal es el caso de una cadena *tight binding* con interacciones a primeros vecinos. Supongamos que $i < j$, la auto-energía del sitio i debido a la decimación de todos los sitios entre i y j es:

$$\Sigma_{ij}(\varepsilon) = V_{i,i+1} \frac{1}{\varepsilon - E_{i+1} - \Sigma_{i+1,j}(\varepsilon)} V_{i+1,i},$$

y, análogamente, la auto-energía para el sitio j es

$$\Sigma_{ji}(\varepsilon) = V_{j,j-1} \frac{1}{\varepsilon - E_{j-1} - \Sigma_{j-1,i}(\varepsilon)} V_{j-1,j}.$$

Si consideramos una cadena de N sitios y decimamos todos ellos, salvo i y j , obtendríamos un sistema efectivo de dos niveles, cuya ecuación de Schrödinger es la misma que la de la Ec. (2.34), pero con las energías renormalizadas,

$$\begin{aligned} \bar{E}_i &= E_i + \Sigma_{i1}(\varepsilon) + \Sigma_{ij}(\varepsilon) \\ \bar{E}_j &= E_j + \Sigma_{ji}(\varepsilon) + \Sigma_{jN}(\varepsilon) \end{aligned} ,$$

y el acoplamiento efectivo:

$$\bar{V}_{ij} = V_{i,j-1} + V_{1i} \frac{1}{\varepsilon - E_j - \Sigma_{ji}(\varepsilon)} V_{j-1,j}.$$

Ahora consideremos una cadena unidimensional semi-infinita y homogénea, $V_{j,j+1} = V$ y $E_j = E \forall j > 0$, y tomemos $i = 0$ y $N \rightarrow \infty$ para obtener la energía renormalizada en el sitio $i = 0$ debido a la decimación de toda la cadena. En este caso, para cualquier sitio $j > 0$ de la cadena tenemos que

$$\Sigma_{j\infty}(\varepsilon) = V \frac{1}{\varepsilon - E - \Sigma_{j+1,\infty}(\varepsilon)} V.$$

Sin embargo, el hecho de que cada sitio $j > 0$ vea hacia la derecha la misma cadena semi-infinita implica que $\Sigma_{j\infty} = \Sigma \forall j > 0$. Luego,

$$\Sigma(\varepsilon) = V \frac{1}{\varepsilon - E - \Sigma(\varepsilon)} V = \Delta \mp i\Gamma. \quad (2.35)$$

Aquí, lo llamativo es que incluso cuando estamos trabajando con cantidades reales, la solución de esta última ecuación se encuentra en el plano complejo. Dicha solución está dada por:

$$\Delta = \begin{cases} \frac{(\varepsilon - E)}{2} - \sqrt{\left[\frac{(\varepsilon - E)}{2}\right]^2 - V^2} & \text{si } \varepsilon - E > 2|V| \\ \frac{(\varepsilon - E)}{2} & \text{si } |\varepsilon - E| \leq 2|V| \\ \frac{(\varepsilon - E)}{2} + \sqrt{\left[\frac{(\varepsilon - E)}{2}\right]^2 - V^2} & \text{si } \varepsilon - E < -2|V| \end{cases} \quad (2.36)$$

y

$$\Gamma = \begin{cases} 0 & \text{si } |\varepsilon - E| > 2|V| \\ \sqrt{\left[\frac{(\varepsilon - E)}{2}\right]^2 - V^2} & \text{si } |\varepsilon - E| \leq 2|V| \end{cases}. \quad (2.37)$$

Estas expresiones son relevantes ya que se puede incluir el efecto de las terminales en la formulación Hamiltoniana mediante una corrección imaginaria a la energía del sitio conectado a la terminal (ver Fig. 2.4). La eliminación de variables nos ha permitido reducir la dimensión del Hamiltoniano, a costa de transformar la ecuación de Schrödinger (Ec. 1.1) en una ecuación no-lineal.

2.11. Apéndice II: La Regla de Oro de Fermi

En la mayoría de los casos, \mathcal{E} suele considerarse como un sistema complejo, de muchos grados de libertad no controlables y un espectro de energías denso. En términos de escalas dinámicas, esto es equivalente a decir que la escala de tiempo de \mathcal{E} es la más corta en comparación con cualquier otra escala relevante y, por este motivo, esta aproximación recibe el nombre de *hipótesis de fluctuaciones rápidas*. Esta aproximación desprecia la estructura energética de \mathcal{E} , motivo por el cual los efectos de retorno coherente de \mathcal{E} hacia el \mathcal{S} son despreciables y cualquier excitación difundirá casi instantáneamente hacia \mathcal{E} . En estos casos se dice que \mathcal{E} es Markoviano o que no tiene memoria. Luego, si \mathcal{S} está débilmente acoplado a un \mathcal{E} de este tipo, la probabilidad de supervivencia de una excitación estará descrita por una ley exponencial, con un tiempo característico dado por la FGR.

En qué consiste la FGR? Repasemos brevemente de qué se trata. Supongamos que nuestro sistema consiste en un único estado $|A\rangle$ de energía E_A , que está débilmente acoplado a \mathcal{E} , que consta de N estados de energía $\{E_k\}_{k=1}^N$ muy próximos entre sí, y que forman una banda de ancho B cuya diferencia de energía media es $E_k - E_{k+1} \equiv d \approx B/N$. Supongamos que $V_{Ak} \ll B$ es la interacción entre $|A\rangle$ y un estado E_k de \mathcal{E} . Como dijimos que \mathcal{E} es denso, $d \ll V_{Ak}$, y el tiempo característico de la interacción $\mathcal{S}\mathcal{E}$ es mucho más pequeño que el tiempo de Heisenberg de \mathcal{E} , en el que las recurrencias debidas al tamaño finito de un sistema aparecen. La situación planteada se muestra pictóricamente en la Fig. 2.13.

Utilizando teoría de perturbaciones, se obtiene la corrección a primer orden para la energía E_A ,

$$\tilde{E}_A \simeq E_A + \sum_k \frac{|V_{Ak}|^2}{E_k - E_A}. \quad (2.38)$$

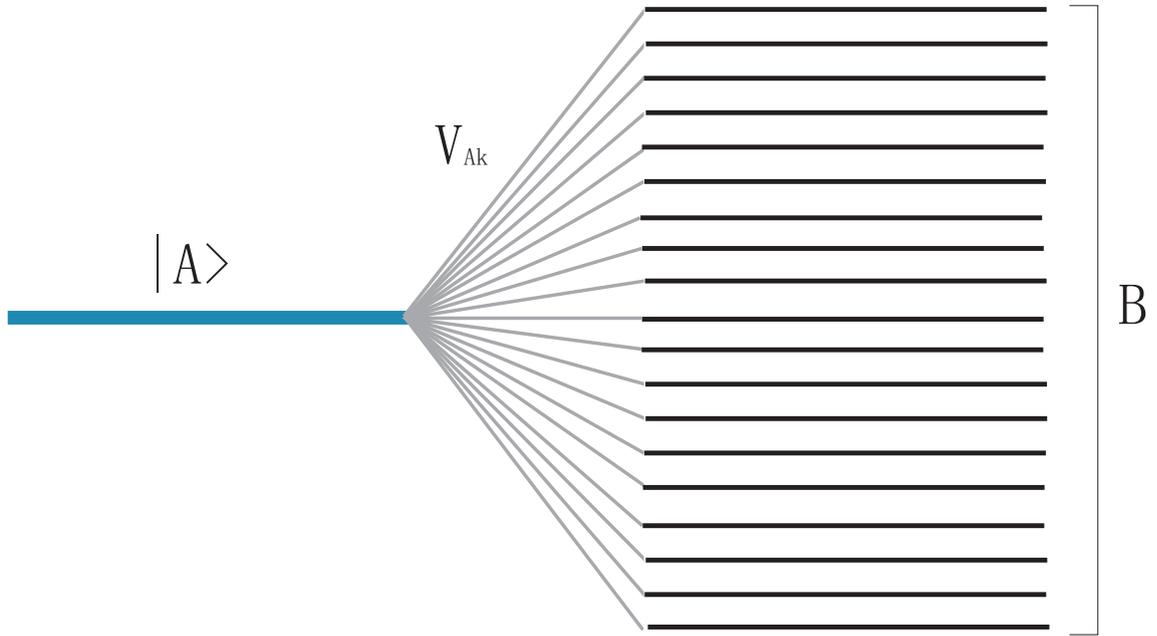


Figura 2.13: Representación pictórica de los niveles de energía del sistema y del ambiente en la descripción FGR.

Para calcular la suma del segundo término, primero debemos aproximar el espectro del ambiente como un continuo e infinito. Para ello primero tomamos $N \rightarrow \infty$

$$\tilde{E}_A \simeq E_A + \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_k \frac{|V_{Ak}|^2}{(E_k - E_A)} \quad (2.39)$$

y luego asumimos que el espectro de \mathcal{E} es continuo

$$\tilde{E}_0 \simeq E_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|V_{0k}|^2}{E_k - E_0} N(E_k) dE_k \quad (2.40)$$

donde $N(E_k)$ es la densidad de estados directamente conectados del ambiente a la energía E_k . La integral de la Eq. 2.40 posee denominadores singulares. Para resolverla, se pasa al plano complejo sumando una pequeña parte imaginaria γ a la energía. Como consecuencia, usando el teorema de Cauchy y tomando el límite cuando γ tiende a cero, aparece una componente imaginaria en la energía $\tilde{E}_0 \simeq E_0 + \Delta_0 - i\Gamma_0$ [Pas07b]:

$$\begin{aligned} \Gamma_0 &= - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{|V_{Ak}|^2}{(E_k - E_A) + i\eta} N(E_k) dE_k \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |V_{Ak}|^2 N(E_k) \delta(E_k - E_A) dE_k \\ &= \pi \|V_{S\mathcal{E}}\|^2 N(E_A), \end{aligned} \quad (2.41)$$

que representa la vida media del estado $|A\rangle$, donde $\|V_{\mathcal{SE}}\|$ denota el segundo momento de la interacción \mathcal{SE} . La escala de tiempo de la FGR es, entonces, $1/\tau_{\mathcal{SE}} = 2\Gamma_0/\hbar = \frac{2\pi}{\hbar} \|V_{\mathcal{SE}}\|^2 N(E_A)$ y es una magnitud independiente del tiempo.

2.12. Apéndice III: Formalismo de Keldysh

En los problemas de transporte electrónico, la mayor parte de la información de la dinámica del sistema se puede obtener a partir de las GF retardada y avanzada. Se obtienen soluciones más prácticas al utilizar su transformada de Fourier en la variable energía ε , del Hamiltoniano efectivo dado por la Ec. (2.20). En representación matricial:

$$\mathbb{G}^R(\varepsilon) = [\varepsilon I - H_{\text{eff}}]^{-1} = \mathbb{G}^{A\dagger}(\varepsilon) \quad (2.42)$$

Estas GF contienen toda la información del sistema cuántico acoplado a las terminales y al ambiente, y constituye el núcleo para describir el problema de no-equilibrio. Además, sus elementos diagonales proveen la densidad local de estados

$$N_i(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{i,i}^R(\varepsilon) = -\frac{1}{2\pi i} [G_{i,i}^R(\varepsilon) - G_{i,i}^A(\varepsilon)]. \quad (2.43)$$

En particular, las amplitudes de transmisión de excitaciones electrónicas entre los canales identificados con el proceso α en el sitio i y los procesos β en el sitio j pueden ser evaluados a partir de la generalización de la fórmula de Fisher y Lee (Ec. (2.21)) [PM01]:

$$t_{\alpha i, \beta j}(\varepsilon) = i2 \sqrt{\Gamma_{\beta j}(\varepsilon)} G_{j,i}^R(\varepsilon) \sqrt{\Gamma_{\alpha i}(\varepsilon)} \quad (2.44)$$

y las probabilidades de transmisión están dadas por:

$$\begin{aligned} T_{\alpha i, \beta j}(\varepsilon) &= |t_{\alpha i, \beta j}(\varepsilon)|^2 \quad (\alpha i \neq \beta j) \\ &= 4\Gamma_{\beta j}(\varepsilon) G_{j,i}^R(\varepsilon) \Gamma_{\alpha i}(\varepsilon) G_{i,j}^A(\varepsilon) \end{aligned} \quad (2.45)$$

donde $\Gamma_{\alpha i} = i(\Sigma_{\alpha,i}^R - \Sigma_{\alpha,i}^A)/2$ es proporcional a la tasa de escape en el sitio i debido al proceso α .

Las funciones de Green retardada y avanzada y las probabilidades de transmisión asociadas a éstas contienen la dinámica cuántica básica. Con el propósito de describir las propiedades de no equilibrio de un sistema, uno tiene que evaluar la matriz densidad o simplemente los términos diagonales de las funciones densidad de no-equilibrio,

$$G_{j,j}^<(\varepsilon) = i2\pi N_j(\varepsilon) f_j(\varepsilon). \quad (2.46)$$

Éstas, en cambio, están determinadas por las condiciones de borde impuestas por los reservorios externos βj que actúan como fuente o drenaje de partículas. Su ocupación está descrita por una función distribución de no-equilibrio, que es aproximada por una función de Fermi desplazada $f_{\beta j}(\varepsilon) = 1/(\exp[(\varepsilon - \varepsilon_F - \delta\mu_{\beta j})/k_B T])$. En el formalismo de Campos Cuánticos, las GF $G_{\phi j, \phi j}^<(\varepsilon)$ resultan de la evolución cuántica en presencia de condiciones de borde. En el caso independiente del tiempo, la energía se conserva y la función densidad de no-equilibrio toma la forma,

$$G_{j,k}^<(\varepsilon) = 2i \sum_{\alpha i} G_{j,i}^R(\varepsilon) \Gamma_{\alpha i}(\varepsilon) f_{\alpha i}(\varepsilon) G_{i,k}^A(\varepsilon), \quad (2.47)$$

es decir que las densidades y correlaciones dentro del sistema resultan a partir de las ocupaciones $f_{\beta i}(\varepsilon)$ impuestas por el experimentalista en las terminales y el ambiente en los voltímetros ficticios. La función densidad de equilibrio $G_{j,j}^{(0)<}(\varepsilon)$ resulta cuando $\delta\mu_{\beta j} \equiv 0$ para todo βj . Los observables reales son evaluados a partir de esta función densidad de no-equilibrio. El cambio respecto del equilibrio en la densidad local puede expresarse en términos de las condiciones de contorno de arriba, como [Pas92]:

$$\begin{aligned} \delta\rho_j &= -\frac{i}{2\pi} \int [G_{j,j}^{<} - G_{j,j}^{(0)<}] d\varepsilon \\ &\simeq N_j(\varepsilon_F) \delta\mu_j, \end{aligned} \quad (2.48)$$

mientras que las corrientes entre los sitios i y j están dadas por

$$I_{i,j} = \int [V_{i,j} G_{j,i}^{<} - V_{j,i} G_{i,j}^{<}] d\varepsilon. \quad (2.49)$$

Estas expresiones integrales de los observables, en la aproximación de respuesta lineal, $eV_L = \mu_{Li} - \varepsilon_F \ll \varepsilon_F$, se convierten en las GLBE que describen el balance de corriente electrónica. Éstas representan las leyes de Kirchoff expresadas en términos las cantidades $\delta\mu_{\alpha i} = \mu_{\alpha i} - \varepsilon_F$, son los desplazamiento de los potenciales químicos de los reservorios para un proceso α acoplado al estado i del sistema respecto de la energía de Fermi. Debido a la aproximación de respuesta lineal, y resultan:

$$I_{\alpha i} = \frac{e}{h} \sum_{\substack{\beta=L,\phi \\ \text{procesos sitios}}} \sum_{j=1}^N (T_{\alpha i, \beta j} \delta\mu_{\beta j} - T_{\beta j, \alpha i} \delta\mu_{\alpha i}). \quad (2.50)$$

Capítulo 3

Eco de Loschmidt y Transiciones de Fase en la Dinámica Cuántica

3.1. Introducción

El estudio de las QDPT requiere de algún testigo dinámico que brinde parámetros de orden adecuados. La dinámica de observables específicos ha demostrado ser muy útil para detectar la aparición de una QDPT. Un candidato prometedor es el LE, es decir el resurgimiento de una excitación que se ha degradado o dispersado. Éste ocurre cuando se aplica un procedimiento, denominado *diablillo de Loschmidt*, que induce la reversión temporal de una evolución cuántica [JP09, WGJP12]. En la práctica, la reversión temporal involucra transformar $\hat{H}_S \rightarrow -\hat{H}_S$. El LE se degrada por la presencia de grados de libertad no controlados que limitan la efectividad de la reversión del Hamiltoniano. Entre ellos se incluyen aquellas interacciones que originan la decoherencia. Al considerar sistemas cuánticos cuya versión clásica es caótica, se ha visto una transición de un régimen de atenuación del LE, controlado por la misma FGR que describe la decoherencia, hacia un régimen controlado por el exponente de Lyapunov que caracteriza el caos del sistema clásico [JP01]. Esta transición ocurre para un valor crítico de la interacción con el ambiente y podría ser interpretada como una QDPT del LE [CLP06]. Más aún, el LE ya ha sido empleado como un testigo sensible a las transiciones de fase termodinámicas en sistemas de espines [QSL+06, ZCC+09] y transiciones dinámicas tales como la localización de muchos cuerpos [ZDI+13].

En este Capítulo, derivamos una ecuación diferencial simple para la evolución del LE, que resulta exacta para sistemas finitos en los que la interacción con el ambiente está bien representada por la FGR. Su tasa de decaimiento queda escrita explícitamente como una magnitud dependiente del tiempo, que empleamos para evaluar la QDPT. Notablemente, en su rol de testigo dinámico de una QDPT, el LE supera a la SP de estados específicos. Ello se debe a que la reversión temporal puede filtrar detalles dinámicos que terminarían dificultando la identificación de la transición. Esto nos permite estudiar la emergencia de una QDPT en un TLS, en que cual, como hemos mencionado en los Capítulos previos, ya han sido reportados comportamientos críticos [ÁDLP06, Pas07b, DBMP08].

3.2. El Eco de Loschmidt

El LE cuantifica la sensibilidad de una evolución cuántica debido a perturbaciones no controladas y constituye nuestro testigo dinámico para evaluar la decoherencia. En un experimento, siempre hay grados de libertad no controlados, a los que llamaremos indistintamente perturbaciones o ambiente y cuyo efecto sobre el sistema finito es usualmente denotado $\hat{\Sigma}$. En el caso de los sistemas abiertos, $\hat{\Sigma}$ puede representar grados de libertad externos (reservorio), que deberían ser tratados con una ecuación maestra, con la de Keldysh-Kadanoff-Baym o con GLBE. Sin embargo, incluso en sistemas cerrados, $\hat{\Sigma}$ puede representar la presencia de grados de libertad internos no-controlados con suficiente precisión en el procedimiento. Ambos escenarios repercutirán en la degradación del LE.

Consideremos un estado inicial $|\psi_0\rangle$ cuya evolución está gobernada por el Hamiltoniano efectivo $\hat{H}_{(+)} = \hat{H}_S + \hat{\Sigma}$, definido en la Ec. (1.3), en el que hemos separado explícitamente los grados de libertad controlados (\hat{H}_S) de aquellos que perturban la dinámica $\hat{\Sigma}$. La evolución del estado inicial está descrita por la operación unitaria $\hat{U}_{(+)}(t)|\psi_0\rangle$, donde $\hat{U}_{(+)}(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{(+)}t\right]$ es el operador evolución *hacia adelante*. La reversión temporal se obtiene cambiando el signo del Hamiltoniano \hat{H}_S y dejando que el sistema evolucione simétricamente, de acuerdo con $\hat{U}_{(-)}(t)\hat{U}_{(+)}(t)|\psi_0\rangle$, donde $\hat{U}_{(-)}(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(-\hat{H}_{(-)}\right)t\right]$ es el operador evolución *hacia atrás*. Luego, se define el LE de un cuerpo como la probabilidad de recuperar el estado inicial $|\psi_0\rangle$ luego de ambas evoluciones, $\hat{U}_{(+)}(t)$ y $\hat{U}_{(-)}(t)$. En términos de los operadores evolución $\hat{U}_{(+)}(t)$ y $\hat{U}_{(-)}(t)$, el LE de un cuerpo puede ser escrito como:

$$M(t) = \left| \langle \psi_0 | \hat{U}_{(-)}(t) \hat{U}_{(+)}(t) | \psi_0 \rangle \right|^2. \quad (3.1)$$

Al igual que en un experimento real, solamente se revierten los grados de libertad controlables (\hat{H}_S). En este caso, la perturbación podría representar interacciones no controladas o bien un potencial externo. La Ec. (5.5) representa la expresión simétrica del LE, que no es la definición estándar del eco pero que, siendo más conveniente de manipular, resulta equivalente.

Si calculamos la derivada de $M(t)$ respecto del tiempo, obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}M(t) &= \frac{d}{dt}[\langle \psi_0 | \hat{U}_{(-)} \hat{U}_{(+)} | \psi_0 \rangle \langle \psi_0 | \hat{U}_{(+)}^\dagger \hat{U}_{(-)}^\dagger | \psi_0 \rangle] \\ &= -\frac{2i}{\hbar}[\langle \psi_0 | \hat{U}_{(-)}^\dagger \hat{\Sigma} \hat{U}_{(+)} | \psi_0 \rangle \langle \psi_0 | \hat{U}_{(+)}^\dagger \hat{U}_{(-)} | \psi_0 \rangle \\ &\quad - \langle \psi_0 | \hat{U}_{(-)}^\dagger \hat{U}_{(+)} | \psi_0 \rangle \langle \psi_0 | \hat{U}_{(+)}^\dagger \hat{\Sigma} \hat{U}_{(-)} | \psi_0 \rangle], \end{aligned}$$

que, luego de cierta manipulación algebraica, nos conduce a:

$$\frac{d}{dt}M(t) = \frac{4}{\hbar}M(t)\gamma_{LE}(t), \quad (3.2)$$

donde

$$\gamma_{LE}(t) = \text{Im} \left\{ \frac{\langle \psi_0 | \hat{U}_{(-)}(t) \hat{\Sigma} \hat{U}_{(+)}(t) | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \hat{U}_{(-)}(t) \hat{U}_{(+)}(t) | \psi_0 \rangle} \right\}. \quad (3.3)$$

La Ec. (3.2) provee la misma tasa de decaimiento que la definición estándar (no-simétrica) del LE. Esta última tendría un factor 1/2, que indica que la perturbación actúa solo durante la mitad del tiempo total de evolución.

A partir de la Ec. (3.3), podemos notar que si $\hat{\Sigma} = -i\Gamma_0 \hat{\mathbf{I}}$, entonces resulta que $\gamma_{LE}(t) = \Gamma_0$ es una constante, por lo que el decaimiento es exponencial y corresponde al régimen FGR. Esta independencia temporal no excluye una fuerte dependencia en la energía del estado inicial [FP06]. En este caso, resulta:

$$\begin{aligned} \gamma_{LE}(t) &= \text{Im} \left\{ \frac{\langle \psi_0 | \hat{U}_{-}(t) (-i\Gamma_{\phi} \hat{\mathbf{I}}) \hat{U}_{+}(t) | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \hat{U}_{-}(t) \hat{U}_{+}(t) | \psi_0 \rangle} \right\} \\ &= \text{Im} \left\{ -i\Gamma_{\phi} \frac{\langle \psi_0 | \hat{U}_{-}(t) \hat{\mathbf{I}} \hat{U}_{+}(t) | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \hat{U}_{-}(t) \hat{U}_{+}(t) | \psi_0 \rangle} \right\} = -\Gamma_{\phi}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

La analiticidad de γ_{LE} como función de Γ_{ϕ} para todo t , indica que este observable no presenta ninguna transición con un ambiente simétrico (al que llamamos no-quiral en el Capítulo 2), en analogía con el comportamiento suave de los polos y de la transmitancia (Capítulo 2). Además, como hemos mencionado antes, el decaimiento del LE es exponencial, dado que $\gamma_{LE}(t)$ es una constante.

Por otro lado, si $\gamma_{LE}(t)$ es proporcional a t entonces el decaimiento del LE resulta ser Gaussiano, un comportamiento que ha sido observado tanto en experimentos de NMR [UPL98] como en modelos teóricos [BZP13]. Nótese además que como consecuencia de la factorización de la tasa de decaimiento del LE, la Ec. (3.3) quedó escrita como un valor de expectación del operador $\hat{\Sigma}$, con lo cual puede interpretarse como una parte imaginaria asociada a la energía del sistema y responsable del decaimiento.

Si bien la evaluación de $\gamma_{LE}(t)$ en la Ec. (3.2) involucra el conocimiento de la dinámica completa del sistema, su validez no se restringe a la aproximación usual de perturbaciones pequeñas. La Ec. (3.2) relaciona el LE con un *flujo de información* que pierde el sistema \mathcal{S} hacia el ambiente \mathcal{E} y que, ocasionalmente, puede retornar de \mathcal{E} hacia \mathcal{S} . En particular, como $M(t) \geq 0 \quad \forall t$, la Ec. (3.2) implica que

$$\frac{d}{dt} M(t) \geq 0 \iff \gamma_{LE}(t) \geq 0.$$

Luego, en un sistema abierto, el incremento del LE se asocia al flujo de retorno coherente desde \mathcal{E} hacia \mathcal{S} . Este flujo de información está típicamente asociado a un comportamiento no-Markoviano y ya ha sido estudiado en la literatura [HGM+12].

La Ec. (3.2) ha sido obtenida derivando la expresión simétrica del LE respecto del tiempo y reordenando los términos. Un hecho destacable es que se obtiene una ecuación factorizada, independientemente de la dimensión del sistema y de la estructura de $\hat{\Sigma}$. En este Capítulo, $\gamma_{LE}(t)$ es el parámetro que destila el comportamiento instantáneo del LE, es decir, del testigo dinámico que utilizaremos con el fin de estudiar la presencia de una QDPT.

3.3. Probabilidad de Supervivencia

Un análisis similar al anterior puede llevarse a cabo con la SP, $P_{AA}(t)$ del estado inicial $|\psi_0\rangle$. Ésta (Ec. (2.10)), resulta:

$$P_{AA}(t) = \left| \langle \psi_0 | \hat{U}_{(+)}(t) | \psi_0 \rangle \right|^2. \quad (3.5)$$

Mediante el mismo procedimiento que el anterior, luego de derivar $P_{AA}(t)$ respecto del tiempo y reordenar se obtiene un resultado similar:

$$\frac{d}{dt}P(t) = \frac{2}{\hbar}P(t)\gamma_P(t), \quad (3.6)$$

donde

$$\gamma_P(t) = \text{Im} \left\{ \frac{\langle \psi_0 | (\hat{H}_S + \hat{\Sigma}) \hat{U}_{(+)} | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \hat{U}_{(+)} | \psi_0 \rangle} \right\}. \quad (3.7)$$

A diferencia de lo que ocurre con el LE, la SP es una función que contiene toda la información acerca de la *dinámica interna* del sistema. De hecho, la SP puede contener ceros, como vimos en las oscilaciones de Rabi de un TLS en el Capítulo anterior. Estos ceros se verán reflejados como divergencias de γ_P , dado que el denominador en la Ec. (3.7) es la amplitud de la SP. Sin embargo, el LE filtra la dinámica interna del sistema, por lo que $\gamma_{LE}(t)$ evita la mayoría de las singularidades causadas por ceros en la SP. Esto representa una ventaja comparativa a la hora de elegir el testigo dinámico relevante para estudiar la presencia de una QDPT.

Si bien analizaremos los casos particulares que consideran un TLS, la validez de los resultados dados por las Ecs. 3.2 y 3.6 es general. En lo que sigue, estudiaremos el comportamiento de un TLS en dos casos particulares, conceptualmente diferentes. En primer lugar, consideraremos un TLS acoplado a un ambiente Markoviano, es decir, cuya estructura energética despreciamos. Esto descarta también los efectos de retorno coherente de \mathcal{E} hacia \mathcal{S} . Hemos analizado la presencia de una QDPT en este modelo en el Capítulo 2, mediante el cálculo de la transmitancia electrónica de estado estacionario. En segundo lugar, analizaremos un ambiente no-Markoviano. Es decir, un ambiente con interacciones y estructura energética bien definidas, en el que, por su naturaleza finita, los retornos coherentes de \mathcal{E} hacia \mathcal{S} están habilitados.

3.4. Ambiente Markoviano Quiral

A modo de ejemplo de ambientes sin memoria consideramos el modelo que estudiamos en el capítulo anterior, en el que un TLS (Ec. (2.9)) experimenta un desfase en la energía de uno de sus estados. A pesar de su simplicidad, utilizamos este modelo ya que no sólo presenta un decaimiento tipo FGR, sino que además permite obtener una solución analítica cerrada para $\gamma_{LE}(t)$.

Cuando consideramos un *ambiente no-quiral*, el observable $\gamma_{LE}(t)$ no presenta un comportamiento crítico como función de la interacción con el ambiente Γ_ϕ . Esto fue demostrado analíticamente en la Introducción de este Capítulo y formalizado mediante la Ec. (3.4). En el caso de un *ambiente quiral*, en el que un único estado

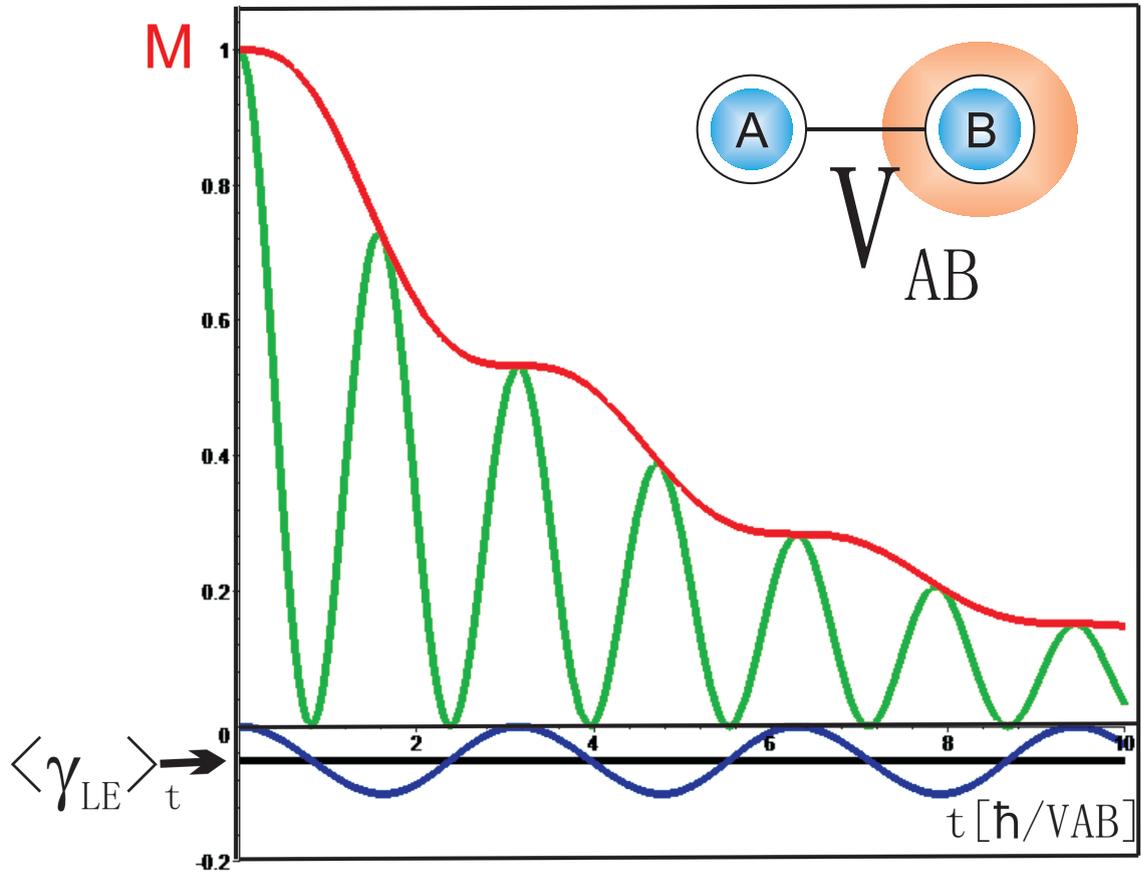


Figura 3.1: M en función del tiempo para el sistema que se muestra en la parte superior derecha, en rojo. Comportamiento oscilatorio de la $P_{AA}(t)$ en la curva verde. En azul comportamiento γ_{LE} y en negro el valor constante del promedio temporal $\langle \gamma_{LE} \rangle_t$.

del TLS es perturbado, el Hamiltoniano efectivo en esta aproximación Markoviana está dado por la Ec. (2.12) del Capítulo 2. Si suponemos un estado inicial $|\psi_0\rangle = |A\rangle$ y encendemos la interacción V_{AB} , el sistema oscilará entre los estados $|A\rangle$ y $|B\rangle$, pasando por estados entrelazados $|e\rangle = (|A\rangle \pm i|B\rangle)/\sqrt{2}$ intermedios, y la amplitud de estas oscilaciones decaerá debido al ambiente que interactúa con el sistema a través del sitio B . La dinámica hacia adelante está descrita por la probabilidad $P_{AA}(t)$ de retornar al estado inicial en función del tiempo t de interacción con el ambiente. Éste muestra las conocidas oscilaciones de Rabi, ilustradas en la curva verde de la Fig. 3.1. El LE, que compensa la dinámica interna de \mathcal{S} filtrando los efectos oscilatorios, decae como la envolvente de $P_{AA}(t)$, curva roja de la Fig. 3.1.

Lo llamativo aquí es que el LE no presenta un decaimiento exponencial puro, sino que alterna períodos de decaimiento rápido con períodos de mesetas, en los que prácticamente no decae. Una forma ilustrativa de comprender este proceso es

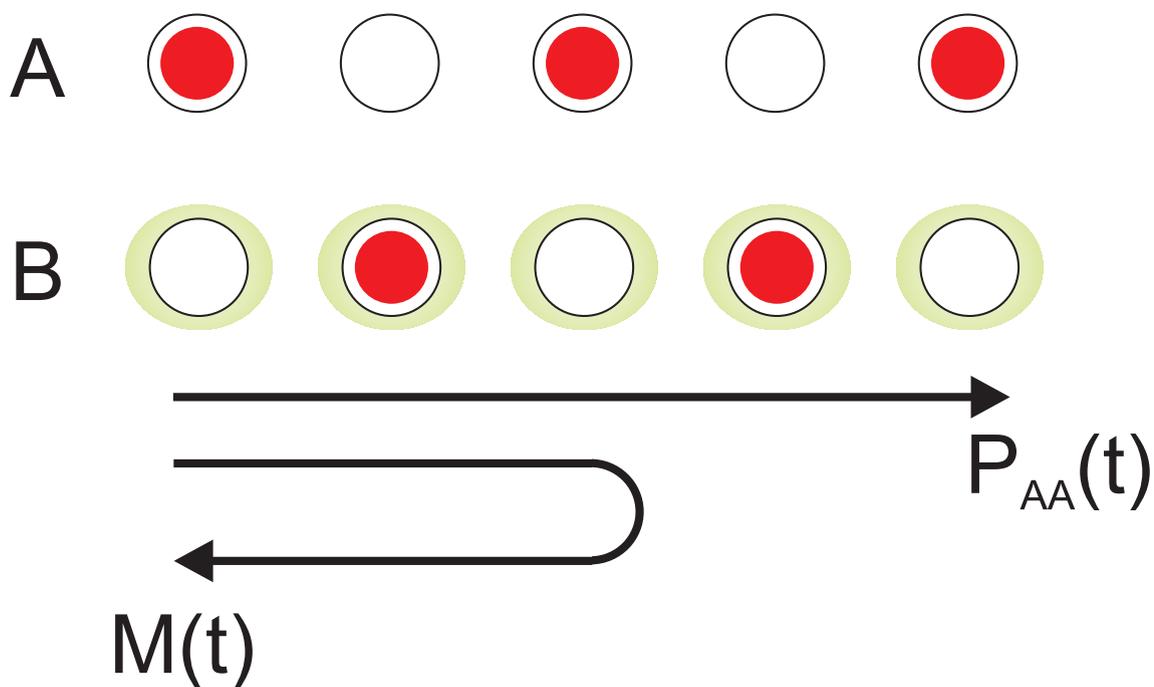


Figura 3.2: Imagen pictórica de la evolución de una excitación en un TLS. El sitio B está en contacto con el ambiente. La evolución *hacia adelante*, dada por $P_{AA}(t)$ describe la oscilación entre los sitios A y B de un estado inicialmente localizado en A . $M(t)$ corresponde a una evolución hacia adelante hasta la mitad del tiempo total seguida de una evolución hacia atrás durante el mismo período de tiempo.

considerar la ilustración de la Fig. 3.2:

Recordemos que el LE observado al instante t , involucra la transformación $\hat{H}_S \rightarrow -\hat{H}_S$ efectuada al instante $t/2$. Esto implica que en $t/2$ comienza una evolución con un Hamiltoniano diferente ($-\hat{H}_S + \hat{\Sigma}$). El sistema, inicialmente en $|A\rangle$, no decae hasta que haya evolucionado hasta el estado $|B\rangle$ donde interactúa con el ambiente. Si la dinámica es revertida cuando el sistema está en $|B\rangle$, tanto en la última porción de la dinámica hacia adelante como en la dinámica revertida, el estado es afectado por el ambiente, por lo que el LE (medido siempre en $|A\rangle$) decaerá rápidamente. Si, por el contrario, la reversión se realiza mientras la partícula está en $|A\rangle$, tanto en los últimos instantes de evolución hacia adelante como en la dinámica revertida, el estado es inmune al ambiente, por lo que $M(t)$ no decae (meseta). Esto puede interpretarse como una consecuencia directa de la quiralidad del ambiente. Este proceso se repite y es notable el comportamiento oscilatorio de $\gamma_{LE}(t)$ que sigue las oscilaciones de $P_{AA}(t)$ con una frecuencia reducida a la mitad. En consecuencia, el decaimiento del LE dependerá del momento en que se realice la reversión. Notablemente, $M(t)$ manifiesta claras oscilaciones de amplitud constante aún cuando la amplitud del LE y la SP han decaído a valores infinitesimales.

Un comportamiento similar se había observado en $M(t)$ y $P_{AA}(t)$ en un modelo de dos estados (TLS) acoplado quiralmente a una cadena 1-D [DZP11] que induce una dinámica no unitaria en el TLS. Asimismo, las soluciones numéricas de las GLBE de

un TLS acoplado a un ambiente no-quiral [FAP15] también mostraron una QDPT que, sin embargo, no aparece en la dinámica no unitaria con un ambiente uniforme (no-quiral). En el primer caso, se estudiaron las tasas de decaimiento del LE como función de la intensidad del acoplamiento con la cadena de espines. En el segundo, se observó que el proceso de decoherencia es más débil cuando el sistema se encuentra en los estados $|A\rangle$ y $|B\rangle$ mientras que éste es más fuerte para los estados $|e\rangle$ intermedios. Esto puede interpretarse mediante los mismos argumentos ya discutidos.

En el Capítulo 2, vimos que para un ambiente Markoviano quiraral presenta un comportamiento crítico, que se evidencia tanto en el Hamiltoniano como en la conductancia electrónica estacionaria. Nos resta ver si puede ser capturada en el comportamiento de γ_{LE} como función de la interacción con el ambiente, Γ_ϕ . Para ello, calculamos la evolución exacta de $|\psi_0\rangle$, mediante la diagonalización del Hamiltoniano efectivo $\hat{H}_0 + \hat{\Sigma}^{(1)}$ y el cálculo analítico de sus autoestados. A partir de esto, obtuvimos una solución para $\gamma_{LE}(t, \Gamma_\phi)$, que quedó explícitamente dependiente de dos variables, el tiempo t y la magnitud del acoplamiento con al ambiente Γ_ϕ . En la Fig. 3.3 podemos observar el comportamiento de $\gamma_{LE}(t, \Gamma_\phi)$ y claramente notar que se manifiesta un cambio abrupto entre dos regímenes dinámicos, uno oscilatorio y uno sobreamortiguado, a medida que aumenta Γ_ϕ .

Con el propósito de analizar sólo la dependencia en el parámetro Γ_ϕ realizamos un promedio temporal,

$$\langle \gamma_{LE} \rangle_t = \frac{1}{nT} \int_0^{nT} \gamma_{LE}(t, \Gamma_\phi) dt, \quad (3.8)$$

donde T es el ciclo de una oscilación y n es un entero suficientemente grande para reducir la impresión de $\langle \gamma_{LE} \rangle_t$. El promedio temporal funciona además como filtro de efectos transitorios o de tiempos cortos.

En la Fig. 3.4 mostramos el comportamiento de $\langle \gamma_{LE} \rangle_t$ en función de Γ_ϕ a partir de la evolución exacta de $|\psi_0\rangle$, superpuesto con la parte imaginaria de los polos de la GF. El cambio drástico en el comportamiento de $\langle \gamma_{LE} \rangle_t$ para un valor crítico $\Gamma_\phi = \Gamma_C$ refleja un cambio de régimen de oscilatorio a sobreamortiguado, como el que observamos en la Fig. 2.3 del Capítulo 2. La elección de este modelo simple fue realizada teniendo en cuenta que puede ser resuelto exactamente, sin embargo, para modelos más complejos, no siempre es posible el cálculo analítico exacto y suele ser necesario acudir a simplificaciones. En este caso la evolución ha sido calculada exactamente mediante diagonalización del Hamiltoniano. El siguiente paso será analizar un modelo con un grado de complejidad superior, en el que un TLS está acoplado a un ambiente finito.

3.5. Ambiente no-Markoviano (con memoria)

Al apartarnos de la aproximación Markoviana, aparecen nuevos comportamientos, que entran en la categoría de efectos de memoria del ambiente. Varios fenómenos llamativos aparecen al resolver un sistema simple acoplado con un ambiente finito en este límite. El comportamiento de la SP se ilustra en la Fig. 3.5. Un decaimiento por

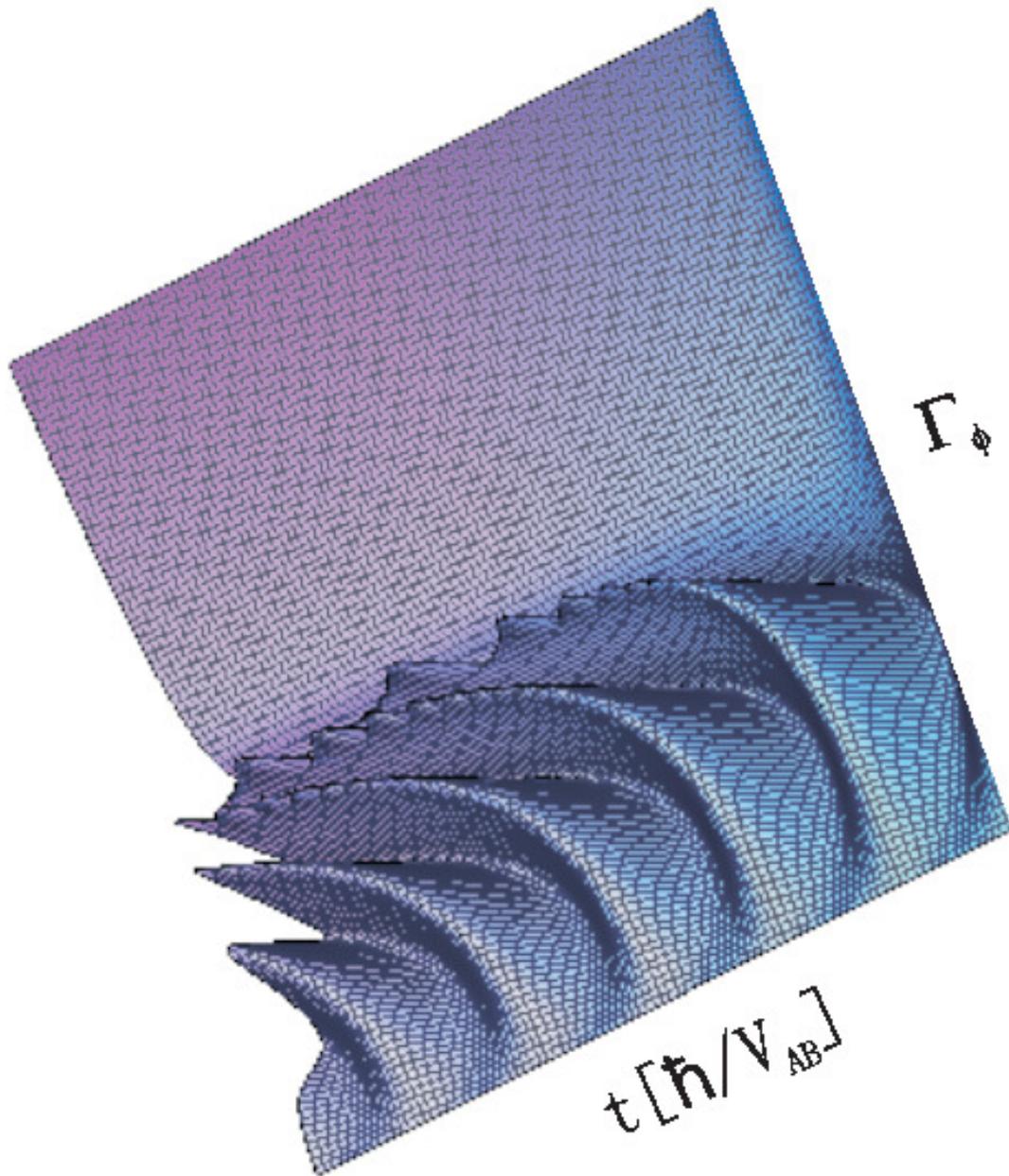


Figura 3.3: Comportamiento de γ_{LE} como función del tiempo y de la intensidad del acoplamiento Γ_ϕ .

interacción con el ambiente comienza con un decaimiento parabólico antes de definir un régimen aproximadamente exponencial (línea punteada) que es usualmente descrito por FGR. Particularmente notable es la aparición de una repentina caída profunda en la SP: el *colapso de la supervivencia*. Este efecto, que se muestra para un caso particular en la Fig. 3.5, surge como consecuencia de la interferencia (destructiva) entre la amplitud de supervivencia pura y la amplitud de probabilidad del

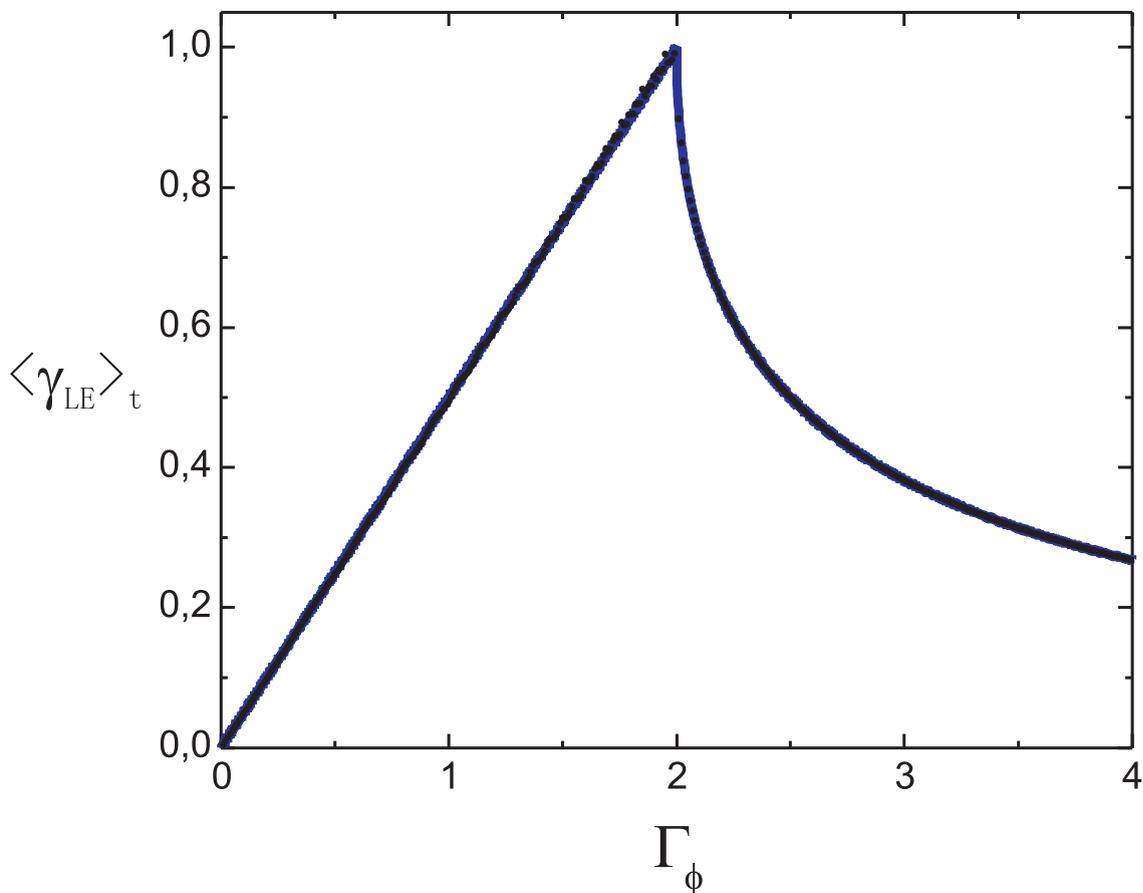


Figura 3.4: Los puntos negros representan $\langle \gamma_{LE} \rangle_t$ en función del parámetro Γ_ϕ para la evolución exacta del estado inicial en un TLS acoplado a un ambiente Markoviano, mientras que la curva azul denota el valor de la parte imaginaria de los polos de la GF.

estado que retorna después de vagar por ambiente. El colapso de la supervivencia es el inicio de un régimen difusivo, en el que el decaimiento está gobernado por una ley de potencias. Tanto el colapso de la supervivencia como el régimen difusivo pueden presentarse para \mathcal{E} finitos o infinitos. Si el \mathcal{E} es finito, también se observará la aparición de un eco mesoscópico cuando la amplitud de probabilidad retorna luego de reflejarse en el borde de \mathcal{E} , como se muestra en la Fig. 3.5. Este tipo de fenómenos ha sido estudiado en detalle en [RFP06]. En lo que sigue focalizaremos en un TLS acoplado con un ambiente finito.

3.5.1. Cadena *tight-binding* finita

El segundo modelo que estudiamos, con un grado de complejidad superior, consiste en un TLS acoplado débilmente a una cadena *tight-binding* semi-infinita, que actúa como ambiente. Por un lado, sabemos que este modelo tiene solución exacta y también presenta una QDPT [DBMP08]. Por otro lado, una ventaja de este modelo

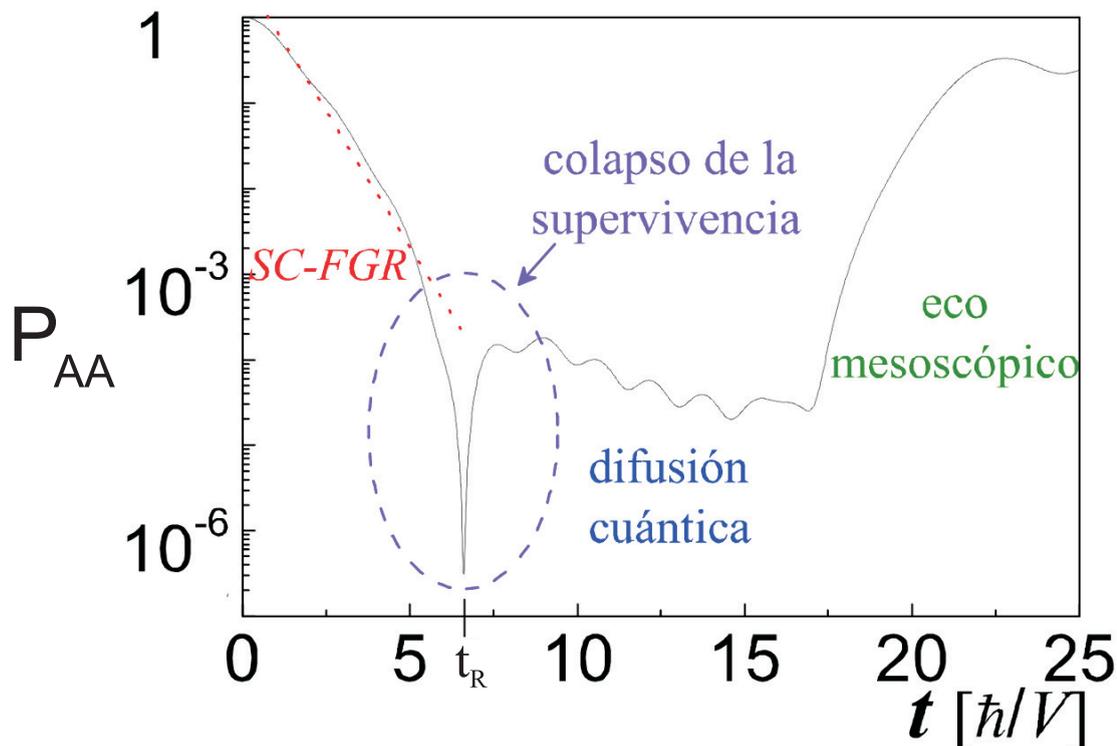


Figura 3.5: Ilustración de la Probabilidad de Supervivencia de una excitación localizada inicialmente en el sitio A . Luego del decaimiento tipo FGR se observa la caída correspondiente al colapso de la supervivencia, seguido de un régimen difusivo. Finalmente se observa la aparición de un eco mesoscópico. Figura adaptada de [RF09].

unidimensional [DPA05] es que las soluciones obtenidas tienen una correspondencia directa, via la JWT, con las excitaciones de polarización en una cadena de espines con interacción XY.

El Hamiltonino efectivo está dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes \hat{I}_E + \hat{I}_S \otimes \hat{H}_E + \hat{V}_{SE}. \quad (3.9)$$

El primer término corresponde al Hamiltoniano del TLS y está dado por el Hamiltoniano:

$$\hat{H}_0 = E_A \hat{c}_A^\dagger \hat{c}_A + E_B \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_B - V_{AB} \left(\hat{c}_A^\dagger \hat{c}_B + \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_A \right). \quad (3.10)$$

El segundo término corresponde al Hamiltoniano del ambiente, que consiste en una cadena *tight-binding* finita, dada por

$$\hat{H}_E = \sum_{n=1}^N E_n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n - V \left(\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1} + \hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_n \right), \quad (3.11)$$

donde E_n son las energías de los N sitios de la cadena, V es la amplitud del acopla-

miento entre dos sitios consecutivos. Por último, la interacción entre \mathcal{S} y \mathcal{E} tiene la forma:

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

donde V_0 es el acople entre \mathcal{S} y \mathcal{E} . Con el propósito de simplificar la notación, a partir de aquí escribiremos sólo $\hat{H}_{\mathcal{S}}$ y $\hat{H}_{\mathcal{E}}$, omitiendo el producto tensorial con las identidades. Aquí, consideramos que el operador perturbación es $\hat{\Sigma} = \hat{H}_{\mathcal{E}} + \hat{V}_{\mathcal{S}\mathcal{E}}$.

Es posible determinar las autoenergías del Hamiltoniano efectivo están dadas por los polos de la GF. Estos son $N + 2$ números reales cuando N es finito. Sin embargo, cuando $N = \infty$ el espectro de ambiente se vuelve continuo. Ahora se deben calcular primero las autoenergías $\hat{\Sigma}$ como puntos fijos de la Ecuación de Dyson $\Sigma = V^2/(\varepsilon - \Sigma)$. A partir de $\Sigma(\varepsilon)$, se determinan los polos, que ahora pueden ubicarse en el plano complejo:

$$\varepsilon_{1,2}^2 = \frac{V_{AB}^2(2V^2 - V_0^2) - V_0^4 \pm V_0^2 \sqrt{(V_{AB}^2 + V_0^2)^2 - 4V_{AB}^2 V^2}}{2(V^2 - V_0^2)}. \quad (3.12)$$

La Ec. (3.12) tiene cuatro soluciones complejas. Aquellas que son físicas tendrán parte imaginaria negativa (Fig. 3.6). La parte imaginaria de los polos representa la tasa de decaimiento exponencial de una FGR autoconsistente (SC-FGR por sus siglas en inglés: *Self-Consistent FGR*) [FP06]. La aproximación FGR para sistemas débilmente acoplados a un ambiente de espectro continuo no es adecuada para describir los regímenes de tiempos cortos y largos. Para tiempos cortos, el decaimiento es cuadrático hasta un tiempo $t_S \approx \hbar\pi N_1(\varepsilon_r)$, donde $N_1(\varepsilon_r)$ es la densidad de estados del ambiente que están directamente conectados con el sistema a través de la perturbación. En una primera aproximación (*first pole approximation*), se evalúa en la energía de resonancia ε_r . El régimen de tiempos cortos ha sido ampliamente estudiado debido a su estrecha relación con el Efecto Zenón Cuántico [RP09]. Luego de t_S , el decaimiento exponencial está bien descrito por una SC-FGR. Finalmente el régimen de tiempos largos es difusivo y está caracterizado por una ley de potencias [RFP06].

La parte imaginaria de los polos de la GF se muestra en la Fig. 3.6 como función de V_0^2 . Allí puede observarse la similitud con el modelo de desfase puro discutido, así como la bifurcación de las líneas.

Dado el estado inicial $|\psi_0\rangle = |A\rangle$, calculamos su evolución mediante el algoritmo de Trotter-Suzuki, que aproxima el operador evolución exacto por una secuencia de operadores evolución parciales que preservan la unitariedad. En la Fig. 3.7 hemos graficado $\langle \gamma_{LE} \rangle_{nT}$, que se obtiene de promediar la Ec. (3.3) en función de la intensidad de la interacción V_0^2 . Esta coincide bastante bien con la FGR determinada al considerar el caso $N = \infty$, y se corresponden con la parte imaginaria de los polos de la GF dados por la Ec. (3.12) Al considerar una cadena con $N = 10^3$ estados, como en cualquier sistema finito, siempre debe tenerse en cuenta que nT no debe exceder el tiempo de Heisenberg o ciclo de Poincaré. La diferencia entre ambos se debe al hecho de que hemos considerado una cadena de tamaño finito. Esta diferencia se acentúa si consideramos sólo $N = 10^2$ pero disminuye al considerar $N = 10^4$. En este caso se confunden con la curva teórica, mostrando que la discontinuidad analítica en

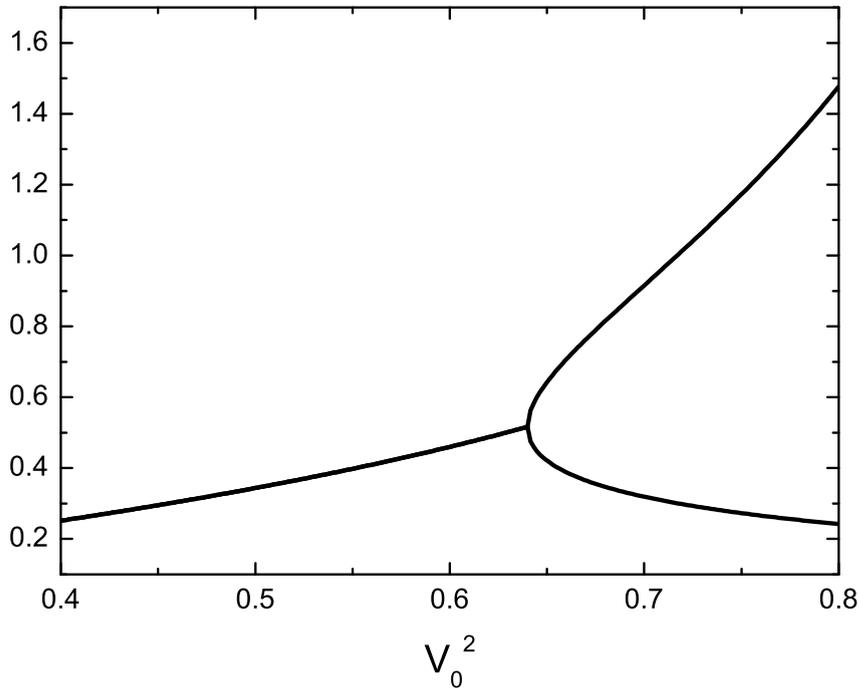


Figura 3.6: Parte imaginaria de los polos físicos correspondientes al TLS acoplado a una cadena semi-infinita de enlaces fuertes con acoplamiento a primeros vecinos.

$\gamma_{LE}(V_0^2)$ surge como consecuencia del límite termodinámico $N \rightarrow \infty$. Al igual que en el caso anterior, en la solución analítica de este límite termodinámico, podemos observar un claro comportamiento crítico, que separa los dos regímenes, oscilatorio y sobreamortiguado. Nótese la diferencia con el caso de ambiente Markoviano que tratamos en la sección anterior $\gamma_{LE}(\Gamma_\phi) = \Gamma_\phi/2$.

Al analizar el decaimiento de la probabilidad de supervivencia, dada por la Ec. (3.6), aparece la dificultad con los denominadores que hemos mencionado. En el régimen oscilatorio, la SP, que contiene toda la información acerca de la dinámica interna del sistema, oscilará entre los dos posibles estados de el sistema, $|A\rangle$ y $|B\rangle$. Como el denominador de γ_P en la Ec. (3.7) representa la amplitud de probabilidad de encontrar al sistema en el estado inicial, es de esperar que éste contenga ceros, que se verán reflejados en divergencias de γ_P . Por ello, en la región oscilatoria γ_P no representa el proceso físico. Por el contrario, como el LE filtra la dinámica interna del sistema, γ_{LE} no contendrá singularidades causadas por ceros en el denominador.

3.6. Conclusiones

Hemos derivado una ecuación diferencial exacta para la tasa de decaimiento del eco de Loschmidt. Lo novedoso de esta expresión es que resulta factorizada, siendo que no se ha realizado ninguna aproximación. El Eco de Loschmidt y su tasa

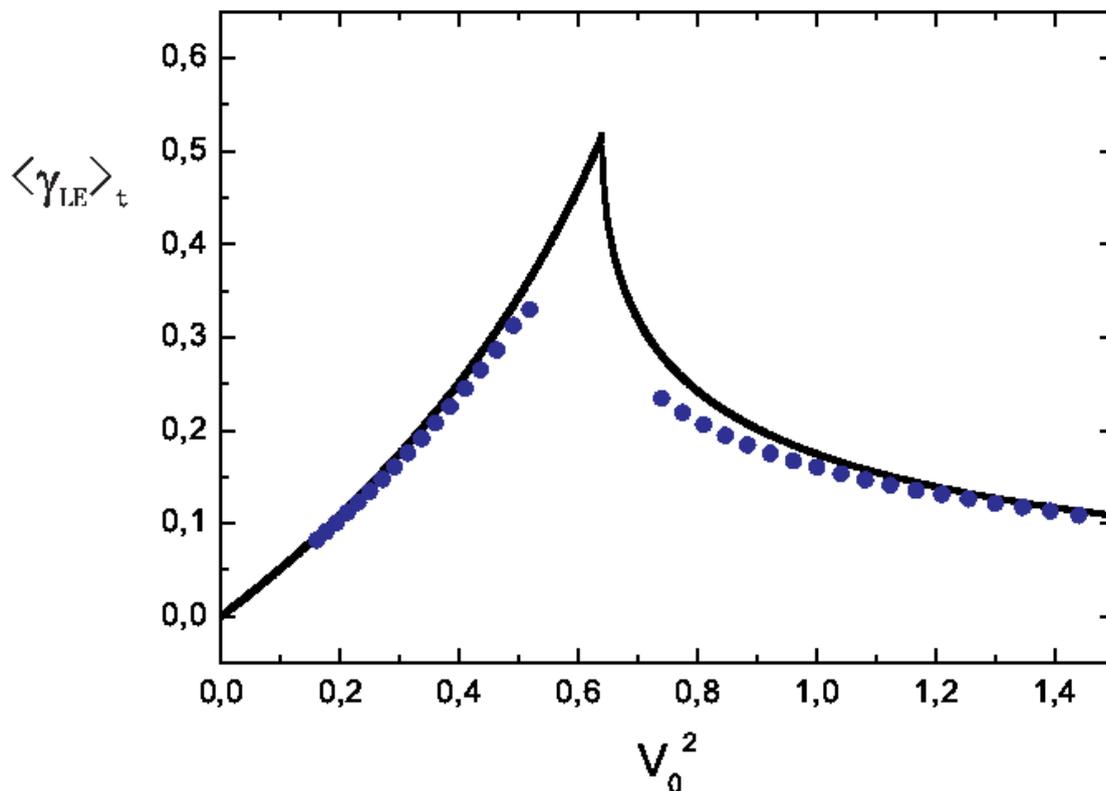


Figura 3.7: Los puntos azules representan $\langle \gamma_{LE} \rangle_t$ en función del parámetro Γ_ϕ para la evolución del estado inicial en un TLS acoplado a un ambiente no-Markoviano, mientras que la curva negra denota el valor de la parte imaginaria de los polos de la GF.

de decaimiento representa nuestro testigo dinámico para estudiar la presencia de una transición de fase en una dinámica cuántica de un TLS que interactúa con un ambiente.

Analizamos dos tipos de ambiente, en el primero de ellos hemos despreciado su estructura energética, lo que resulta en un ambiente Markoviano. En el segundo hemos tenido en cuenta los efectos de memoria, introducidos por un ambiente finito. En ambos casos hemos supuesto que el ambiente perturba a un único estado del sistema (ambiente quirral). Hemos visto que se puso de manifiesto un comportamiento crítico de nuestro testigo dinámico, y éste ha sido observado mediante una no-analicidad de la tasa de decaimiento del eco de Loschmidt γ_{LE} en función de la intensidad de la interacción con el ambiente. Observamos que las oscilaciones de la probabilidad de supervivencia se congelan para un valor crítico de la interacción, a partir del cual el sistema entra en un régimen sobreamortiguado. Notamos además que, cuando la perturbación es simétrica o no-quirral, es decir que corrige la energía de ambos estados en la misma magnitud, no se observa la transición de fase en la dinámica cuántica no unitaria, en concordancia con lo que ocurre con el comportamiento de los polos de la función de Green y de la transmitancia efectiva.

Una posible extensión de este estudio consistiría en analizar un sistema de dos

espines en presencia de un ambiente de espines. En este tipo de sistemas, en consonancia con los experimentos de RMN, el observable Eco de Loschmidt lo constituye un exceso de polarización en el mismo espín donde se ha inyectado en el instante inicial. Así, la evaluación numérica del eco en sistemas de espines requiere de una definición más general que la que brinda la Ec. (5.5), como una función de autocorrelación. Esta función de autocorrelación de espín será definida en el Capítulo 5. Luego, la evaluación de γ_{LE} en este tipo de sistemas se puede realizar, en principio, de varias formas. Una de ellas consiste en resolver la dinámica unitaria total de un sistema de dos espines acoplados a una cadena finita de espines y evaluar la función de autocorrelación de espín a partir de ella. Otra forma sería resolver la ecuación maestra de Lindblad o las ecuaciones generalizadas de Landauer-Büttiker correspondientes. La ventaja del primer método es que si consideramos interacciones espín-espín solo de tipo XY podríamos considerar $P_{00}(t)$ y $M_{00}(t)$ para un ambiente no-Markoviano sin dificultad adicional.

Un punto resaltable de esta formulación es que naturalmente aparece la decoherencia como un efecto no uniforme en el tiempo, y que depende del estado del sistema y la interacción específica con el ambiente. Así, observamos que mesetas en el eco de Loschmidt se correlacionan con cancelaciones temporarias de tasa de decoherencia. Estos resultados reaparecen al considerar otros modelos y dinámicas. Sustenta esta observación el hecho de que han sido calculadas las ecuaciones generalizadas de Landauer-Büttiker para este modelo y se han observado comportamientos similares a los aquí descritos.

Capítulo 4

Modelo Espín-Bosón o Bosón-Espín?

4.1. Introduction

Entre las expectativas generales dentro del campo de los sistemas cuánticos abiertos [Zur01], está la afirmación de que cuanto más no-local y complejo sea un estado de superposición, resulta más frágil ante los efectos de la decoherencia. La magnitud de tal fragilidad parece estar íntimamente relacionada con el número de qubits correlacionados y la forma en la que evolucionan. En particular, experimentos en el campo de la NMR [LUP98, KS04, SLAC09] han mostrado que sistemas grandes de espines interactuantes pueden exhibir una dinámica intrínsecamente inestable. En este contexto el LE surge como una forma natural para cuantificar la fragilidad de un sistema. En los sistemas clásicamente caóticos, la dinámica conduce a superposiciones altamente no-locales que ya han sido relacionadas con la formación de estructuras en la escala sub-Planck, asociadas a un aumento de la decoherencia [KJZ02].

En la introducción hemos mencionado que la estrategia teórica usual para abordar la decoherencia y la disipación consiste en definir un sistema simple (\mathcal{S}) que interactúa con un ambiente grande y complejo (\mathcal{E}) [PB02, Sch07]. Mientras que el primero tiene unos pocos grados de libertad, el segundo típicamente tiene un espectro denso, al menos durante las escalas de tiempo experimentales menores que el tiempo de Heisenberg, en el que ocurren los ecos mesoscópicos [PAEI94]. Dentro de este contexto, el modelo espín-bosón (SBM por sus siglas en inglés: Spin Boson Model) resulta ser uno de los paradigmas más empleados [CL84]. Éste corresponde a un TLS \mathcal{S} que interactúa con un reservorio grande \mathcal{E} de modos bosónicos, es decir un espín $1/2$ acoplado a un ambiente de osciladores armónicos (HO por sus siglas en inglés: *Harmonic Oscillator*). Este modelo es aplicado ampliamente en los campos de la Fisicoquímica y la Biofísica, proveyendo las bases de los procesos de transferencia de electrones. Allí, el rol del espín lo juega una carga que puede fluctuar entre dos centros reactivos [Mar93, Nit06].

En este Capítulo, intercambiamos los roles del espín y del bosón como \mathcal{S} y \mathcal{E} , usando un HO como \mathcal{S} y un simple TLS como \mathcal{E} . Este punto de vista significativamente diferente busca evaluar cómo estados de complejidad controlable son degra-

dados por un \mathcal{E} simple. Específicamente, sólo cuando este grado de libertad binario cambia su estado, se habilita la mezcla (*mixing*) entre los estados de \mathcal{S} . Este abordaje nos permite probar la asunción sobre la fragilidad de superposiciones no-locales específicas. Aquí, estas superposiciones altamente no-locales no son obtenidas como estados iniciales dinámicamente preparados en un sistema caótico [KJZ02], sino que son construidos como estados iniciales específicos del HO. En el caso particular analizado, superposiciones *coherentes* de dos estados semiclásicos asociados a diferentes energías muestran una mayor fragilidad con respecto a las superposiciones *incoherentes*.

4.2. El modelo Bosón-Espín

El sistema \mathcal{S} considerado es un HO acoplado a un TLS, que constituye el ambiente \mathcal{E} . Este TLS permite la mezcla y produce decoherencia, causando la pérdida de control sobre \mathcal{S} . El Hamiltoniano total que contiene todos los procesos físicos es

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathcal{S}} \otimes \hat{I}_{\mathcal{E}} + \hat{I}_{\mathcal{S}} \otimes \hat{H}_{\mathcal{E}} + \hat{V}_{\mathcal{S}\mathcal{E}}, \quad (4.1)$$

donde el primer término representa \mathcal{S} :

$$\hat{H}_{\mathcal{S}} = \hbar\omega_0 \left(\hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2} \right), \quad (4.2)$$

con \hat{b}^+ y \hat{b} los operadores bosónicos de subida y bajada respectivamente. El segundo término en la Ec. (4.2) representa el TLS, que corresponde a \mathcal{E} , y su Hamiltoniano está dado por

$$\hat{H}_0 = E_A \hat{c}_A^\dagger \hat{c}_A + E_B \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_B - V_{AB} \left(\hat{c}_A^\dagger \hat{c}_B + \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_A \right). \quad (4.3)$$

Como ya hemos mencionado, en un modelo de transferencia electrónica E_A y E_B son las energías no-degeneradas del electrón en los estados A y B respectivamente. Como la JWT permite la correspondencia precisa entre fermiones libres y espines, la amplitud de salto (*hopping*) V_{AB} (i.e. el tunelamiento del electrón entre los centros A y B) también describe un proceso de *flip-flop*. Como acoplamiento entre \mathcal{S} y \mathcal{E} adoptamos la interacción lineal estándar electrón-fonón, utilizada para describir el efecto Franck-Condon y los procesos de transferencia de electrónica [CBMP10]

$$\hat{V}_{\mathcal{S}\mathcal{E}} = -V_g \left(\hat{b}^+ + \hat{b} \right) \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_B. \quad (4.4)$$

donde V_g da la escala de la interacción \mathcal{S} - \mathcal{E} que es lo suficientemente fuerte como para considerar que el espectro de \mathcal{S} es un cuasi-continuo ($V_g \gg \hbar\omega_0$). En este modelo, es claro que el estado del HO (\mathcal{S}) y su dinámica depende del estado del espín. De hecho, la Ec. (4.4) implica un desplazamiento explícito del potencial armónico que se pone en evidencia cuando el Hamiltoniano total \hat{H} es escrito en término de las coordenadas canónicas \hat{p} y \hat{q} :

$$\hat{H}_{\mathcal{S}} + \hat{V}_{\mathcal{S}\mathcal{E}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \hat{q}^2 - \sqrt{\frac{2m\omega_0}{\hbar}} V_g \hat{q} \hat{c}_B^\dagger \hat{c}_B, \quad (4.5)$$

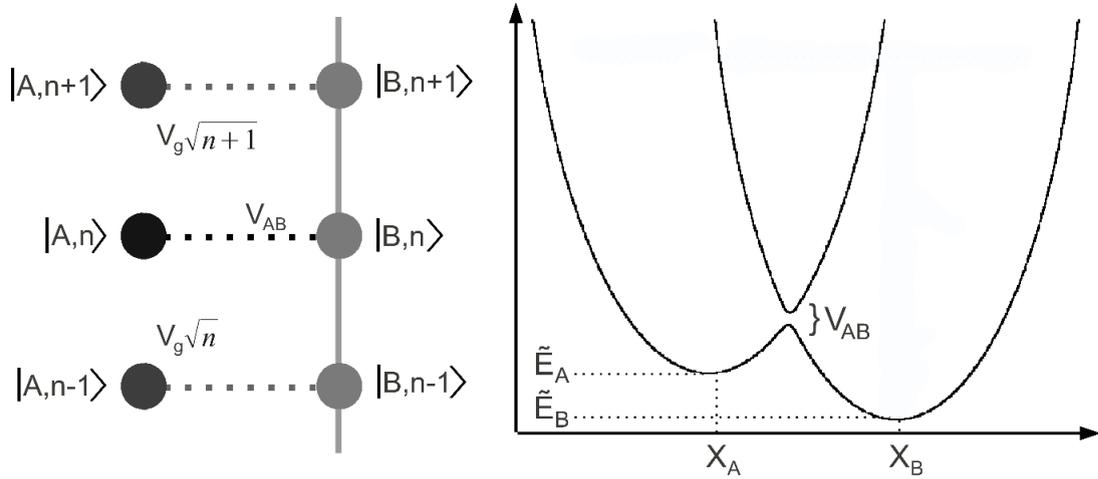


Figura 4.1: (a) Representación en el espacio de Fock de $\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{V}_{SE}$. Los acoplamientos verticales habilitan la mezcla entre los autoestados del HO. (b) Representación semiclassical de \hat{H} en términos de la coordenada canónica del HO \hat{q} . Cada parábola corresponde a un estado de espín diferente mientras que (V_{AB}) produce un cruce evitado (brecha de energía).

donde $\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (\hat{b}^+ + \hat{b})$ y $\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (\hat{b}^+ - \hat{b})$. En término de la coordenada canónica \hat{q} , el Hamiltoniano dado por la Ec. (4.5) desplaza la superficie de potencial con respecto a la que corresponde al HO usual. El modelo está esquematizado en la Fig. 4.1, donde están representadas, en (a), las interacciones en el espacio de Fock, y en (b) una representación semiclassical del potencial perturbado, de donde podemos notar que se abre una brecha de energía de ancho $2V_{AB}$ inducida por \hat{H}_E , con parámetros

$$q_C = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \frac{E_B}{V_g}, \quad (4.6)$$

$$E_C = \frac{\hbar\omega_0}{4} \left(\frac{E_B}{V_g} \right)^2.$$

Para simplificar el análisis, definimos una energía de referencia que desplaza el potencial armónico perturbado produciendo $E_A - \tilde{E}_B = 0$ con $\tilde{E}_B = E_B - V_g^2/\hbar\omega_0$. Esto significa que las parábolas de la Fig. 4.1 (b) son simétricas respecto del punto de cruce q_C . Por lo tanto, energías similares en el HO son mezcladas por la dinámica del ambiente. De hecho, la densidad de energía del HO $1/\hbar\omega_0$ constituye un espectro quasi-continuo que puede ser fácilmente mezclado por la dinámica del TLS. Esto requiere que $V_{AB} \gg \hbar\omega_0$.

4.3. Estados iniciales

En la representación de enlaces fuertes en el espacio de Fock mostrada en la Fig. 4.1 (a), cualquier función de onda de $\mathcal{S} + \mathcal{E}$ puede ser escrita como:

$$|\Phi\rangle = \sum_{k=A,B} \sum_{n=0}^{\infty} c_{k,n} |k, n\rangle, \quad (4.7)$$

donde el índice k indica los estados de espín $|A\rangle$ y $|B\rangle$, y el índice n representa los autoestados del HO. Consideramos tres estados iniciales diferentes, todos con la restricción de que el estado de espín es $|A\rangle$. El primero, un paquete de ondas Gaussiano que es usualmente llamado estado coherente, es:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |A, n\rangle. \quad (4.8)$$

Para evitar cualquier tipo de confusión, a partir de ahora nos referiremos a tales estados como *semiclásicos*, dado que exhiben una incerteza mínima. Su energía está dada por $E_\alpha = \hbar\omega_0 (|\alpha|^2 + 1/2)$ y su evolución bajo el Hamiltoniano no perturbado \hat{H}_S es una oscilación semiclásica trivial. El segundo caso de estado inicial es un estado no-local, es decir, una superposición coherente de dos Gaussianas,

$$|\Psi_0^{cat}\rangle = \frac{|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (4.9)$$

donde $|\alpha_r\rangle$ es un estado semiclásico como el de la Ec. (4.8), asociado a un número complejo α_r . El solapamiento entre dos estados semiclásicos está dado por $|\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle|^2 = \exp[-|\alpha_2 - \alpha_1|^2]$. Si $\alpha_2 - \alpha_1$ es suficientemente grande, puede considerarse que estos estados son ortogonales, recuperando así la normalización del estado definido en la Ec. (4.9).

El tercer caso considerado es una mezcla estadística, que puede ser escrita como:

$$\rho = \frac{1}{2} (|\alpha_1\rangle \langle\alpha_1| + |\alpha_2\rangle \langle\alpha_2|). \quad (4.10)$$

Notemos que en todos los casos considerados hemos restringido el estado inicial a una proyección de espín definida $|A\rangle$.

En la Fig. 4.2 ilustramos la evolución espacial para (a) un estado inicial semiclásico y (b) un estado inicial no-local sujeto a la acción del Hamiltoniano no-perturbado \hat{H}_S , mientras que en (c) y (d) mostramos la evolución de los mismos estados bajo la acción del Hamiltoniano total \hat{H} . En los últimos dos casos, podemos notar cómo la dinámica oscilatoria es perturbada por los pasajes sucesivos a través de la región del cruce evitado alrededor de $q = q_C$. Notemos que la amplitud de las oscilaciones semiclásicas no se ve afectada al menos durante varios ciclos. Esto significa que no hay una pérdida significativa de energía debido a la interacción. La separación de las trayectorias de los paquetes de onda es analizada en términos de la teoría de LZ en la Sec. 4.5.1. Las superposiciones coherentes e incoherentes aquí definidas constituyen los estados de prueba que serán empleados para evaluar la *fragilidad* en la Sec. 4.6.

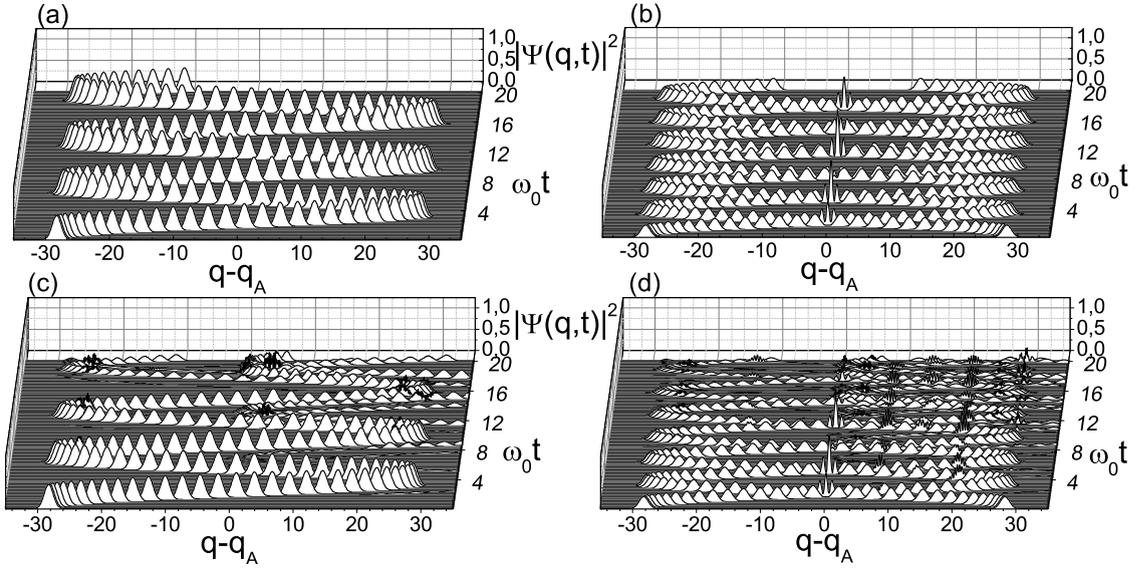


Figura 4.2: Evolución no-perturbada de la distribución de probabilidad como función de la coordenada espacial. (a) Un estado inicial semiclásico con $\bar{E} = 400\hbar\omega_0$. (b) Un estado inicial no-local con la misma energía. La dinámica perturbada para los mismos estados iniciales se muestra en (c) y (d) respectivamente.

4.4. Loschmidt Echo

Empleamos el LE como cuantificador de decoherencia y nuestro propósito específico es analizar la *fragilidad* de los estados introducidos en la Sec. 4.3. De hecho, el LE mide la sensibilidad de una evolución cuántica ante perturbaciones no-controladas [JP09, WGJP12], como ya hemos discutido en el Capítulo 3. Éste consiste en un procedimiento de reversión de los grados de libertad de \mathcal{S} , que filtra la dinámica de \mathcal{S} y permite evaluar la degradación producida por los grados de libertad de \mathcal{E} . Para un estado inicial $|\Psi_0\rangle$ que describe el sistema completo $\mathcal{S} + \mathcal{E}$, la fórmula estándar del LE es [JP01]:

$$M(t) = \left| \langle \Psi_0 | \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\hat{H}_{\mathcal{S}} + \hat{\Sigma} \right) t \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{\mathcal{S}} t \right\} | \Psi_0 \rangle \right|^2, \quad (4.11)$$

donde el operador perturbación $\hat{\Sigma}$ representa $\hat{H}_{\mathcal{E}} + \hat{V}_{\mathcal{S}\mathcal{E}}$ como está definido en la Sec. (4.2). El estado $|\Psi_0\rangle$ evoluciona hacia adelante con $\hat{H}_{\mathcal{S}} \otimes \hat{I}_{\mathcal{E}}$, mientras que la evolución hacia atrás está dada por el Hamiltoniano total, definido en la Sec. (4.2). En particular, notemos que la evolución hacia adelante puede ser escrita en una forma analíticamente cerrada.

El LE como está definido en la Ec. (4.11) no es apropiado dado que implica el solapamiento entre las componentes de \mathcal{S} y \mathcal{E} de dos funciones de onda. Como discutimos antes, estamos interesados específicamente en evaluar cómo un HO (\mathcal{S}) es perturbado por un grado de libertad binario (\mathcal{E}). Entonces, es necesario realizar una traza parcial sobre los grados de libertad de \mathcal{E} [PJ06, ZDLP12]. Definimos dos estados del sistema entero $\mathcal{S} + \mathcal{E}$ a partir de los cuales evaluamos el LE, en la forma

explícita de la Ec. (4.7):

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} |\Psi_0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{A,n}(t) |A, n\rangle, \\ |\Phi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_S + \hat{\Sigma})t} |\Psi_0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=A,B} d_{k,n}(t) |k, n\rangle. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Si trazamos sobre los grados de libertad de \mathcal{E} para construir los operadores densidad reducidos, obtenemos,

$$\begin{aligned} \sigma_S^r &\equiv \text{Tr}_{\mathcal{E}} (|\Psi\rangle \langle\Psi|) = \sum_{m,n=0}^{\infty} [c_{A,n}(t)c_{A,m}^*(t)] |n\rangle \langle m|, \\ \sigma_{S+\mathcal{E}}^r &\equiv \text{Tr}_{\mathcal{E}} (|\Phi\rangle \langle\Phi|) = \sum_{m,n=0}^{\infty} \left[\sum_{k=A,B} d_{k,n}(t)d_{k,m}^*(t) \right] |n\rangle \langle m|, \end{aligned}$$

donde el índice de espín ya no está presente en la base *bra-ket*. Así, el LE se define como el solapamiento de estos estados reducidos y puede ser explícitamente escrito como

$$M(t) = \text{Tr} \left\{ (\sigma_S^r)^\dagger \sigma_{S+\mathcal{E}}^r \right\} \quad (4.13)$$

$$= \sum_{m,n=0}^{\infty} [d_{A,m}(t)d_{A,n}^*(t) + d_{B,m}(t)d_{B,n}^*(t)] [c_{A,n}(t)c_{A,m}^*(t)]. \quad (4.14)$$

Aquí, podemos notar que a pesar del uso *formal* de las matrices densidad, para el cálculo del LE podemos evitar la manipulación de matrices. Ciertamente, la igualdad de la Ec. (4.13) nos brinda una receta para evaluar el LE a partir de las componentes específicas de la función de onda $|\Phi\rangle$ en el espacio de Fock, explícitamente dada en la Ec. (4.12). A pesar de que el LE en la Ec. (4.14) está escrito en términos de productos de amplitudes complejas, insistimos con que, por construcción, ésta es una cantidad real y positiva.

Notemos que si el estado inicial es una superposición (en ambos casos, coherente e incoherente) la linealidad de los operadores evolución puede emplearse para evaluar las amplitudes de probabilidad como una suma de dos contribuciones. Esto se usa explícitamente en el cálculo del LE para derivar una versión particular de la Ec. (4.14). Para el estado inicial dado por la Ec. (4.10), no es necesario el cálculo de un promedio infinito de funciones de onda. En lugar de eso, para calcular $M_{inc}(t)$ en cualquier instante de tiempo sólo es necesaria la evolución (por separado) de dos estados semiclásicos individuales $|\alpha_1\rangle$ y $|\alpha_2\rangle$ y sus respectivas amplitudes de probabilidad (los coeficientes complejos en la base de Fock $\{|k, n\rangle\}$). Esto es,

$$\begin{aligned} M_{inc}(t) &\equiv \frac{1}{2} \sum_{m,n=0}^{\infty} \left[\left(d_{A,m}^{(1)}(t)\bar{d}_{A,n}^{(1)}(t) + d_{B,m}^{(1)}(t)\bar{d}_{B,n}^{(1)}(t) \right) c_{A,n}^{(1)}(t)\bar{c}_{A,m}^{(1)}(t) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{m,n=0}^{\infty} \left[\left(d_{A,m}^{(2)}(t)\bar{d}_{A,n}^{(2)}(t) + d_{B,m}^{(2)}(t)\bar{d}_{B,n}^{(2)}(t) \right) \bar{c}_{A,m}^{(2)}(t)c_{A,n}^{(2)}(t) \right] \end{aligned}$$

$$M_{inc}(t) = \frac{1}{2} (M^{(\alpha_1)}(t) + M^{(\alpha_2)}(t)), \quad (4.15)$$

donde $M^{(\alpha_1)}$ y $M^{(\alpha_2)}$ son los LE correspondientes para $|\alpha_1\rangle$ y $|\alpha_2\rangle$ respectivamente, evaluados a partir de la Ec. (4.14).

4.5. Resultados

4.5.1. La descripción de Landau-Zener

Ya que los estados iniciales dados por las Ecs. 4.8, 4.9 y 4.10 están definidos explícitamente con el estado de espín $|A\rangle$, las transiciones entre los autoestados del HO están prohibidas excepto las transiciones del grado de libertad binario a $|B\rangle$. Esto se muestra explícitamente en la representación *tight binding* de la Fig. 4.1 (a) y el potencial armónico en la Fig. 4.1 (b).

Como ya hemos mencionado, el término $\hat{H}_{\mathcal{E}}$ en el Hamiltoniano total \hat{H} produce un cruce evitado. Un paquete de ondas semiclásico que evoluciona bajo la presencia de un potencial armónico no se degrada a menos que atraviese la brecha de energía. De hecho, los procesos de decoherencia que induce $\hat{V}_{S\mathcal{E}}$ sólo se habilitan cuando ocurre el pasaje a través de la brecha. Esto significa que tal proceso se restringe a una región específica en el espacio y el tiempo.

En todos los casos aquí considerados, fijamos los parámetros del modelo de tal forma que las parábolas de energía potencial están a la misma altura. Para satisfacer las condiciones discutidas, elegimos $V_g = 10\hbar\omega_0$. Así, siendo que $E_A \equiv 0$ se obtiene $E_B = 100\hbar\omega_0$ y $E_C = 25\hbar\omega_0$, que siempre es mucho menor que la energía E_0 del estado inicial. Además, elegimos $\alpha \in \mathbb{R}$, así la velocidad del paquete de ondas inicial es cero. En la Fig. 4.3 mostramos el decaimiento del LE para un estado semiclásico, que evidencia consistentemente un conjunto discreto de escalones, que se asocian a cada pasaje a través del cruce evitado.

Con el propósito de analizar cuantitativamente el decaimiento del LE en nuestro sistema cuasi-continuo, seguimos a Marcus [Mar93] identificándolo con el problema de LZ. Esto involucra la evaluación de la probabilidad de transición en el TLS. Hemos mostrado en la Fig. 4.2 que el paquete de ondas se divide cada vez que atraviesa la brecha, que ocurre cuando $q = q_C$, dado por la Ec. (4.6). Cuando $t = t_C$ el paquete de ondas atraviesa la región del cruce evitado a velocidad aproximadamente constante \dot{q}_C . Si \mathcal{S} está en el estado de espín $|A\rangle$, la probabilidad asintótica de LZ de permanecer en el estado de espín $|A\rangle$ está dada por:

$$P_{AA}(t \rightarrow \infty) = \exp \left\{ -\frac{2\pi}{\hbar} \frac{|V_{AB}|^2}{\left| \frac{d}{dt} (\epsilon_A - \epsilon_B) \right|} \right\}, \quad (4.16)$$

donde $\epsilon_A(q)$ y $\epsilon_B(q)$ es la energía potencial descrita por una aproximación lineal en su dependencia con la coordenada q , es decir que $\epsilon_A \approx m\omega_0^2 q_C^2/2 + m\omega_0^2 q_C(q - q_C)$ y $\epsilon_B \approx m\omega_0^2 q_C^2/2 - m\omega_0^2 q_C(q - q_C)$. Esto se vuelve una dependencia en el tiempo t si uno asume que cerca del punto q_C el paquete de ondas se comporta linealmente como $q \equiv \langle q(t) \rangle \simeq q_C + \dot{q}_C(t - t_C)$. Por lo tanto, al menos para un único pasaje, podemos mapear el problema conservativo del SBM con un espectro cuasi-continuo con el TLS

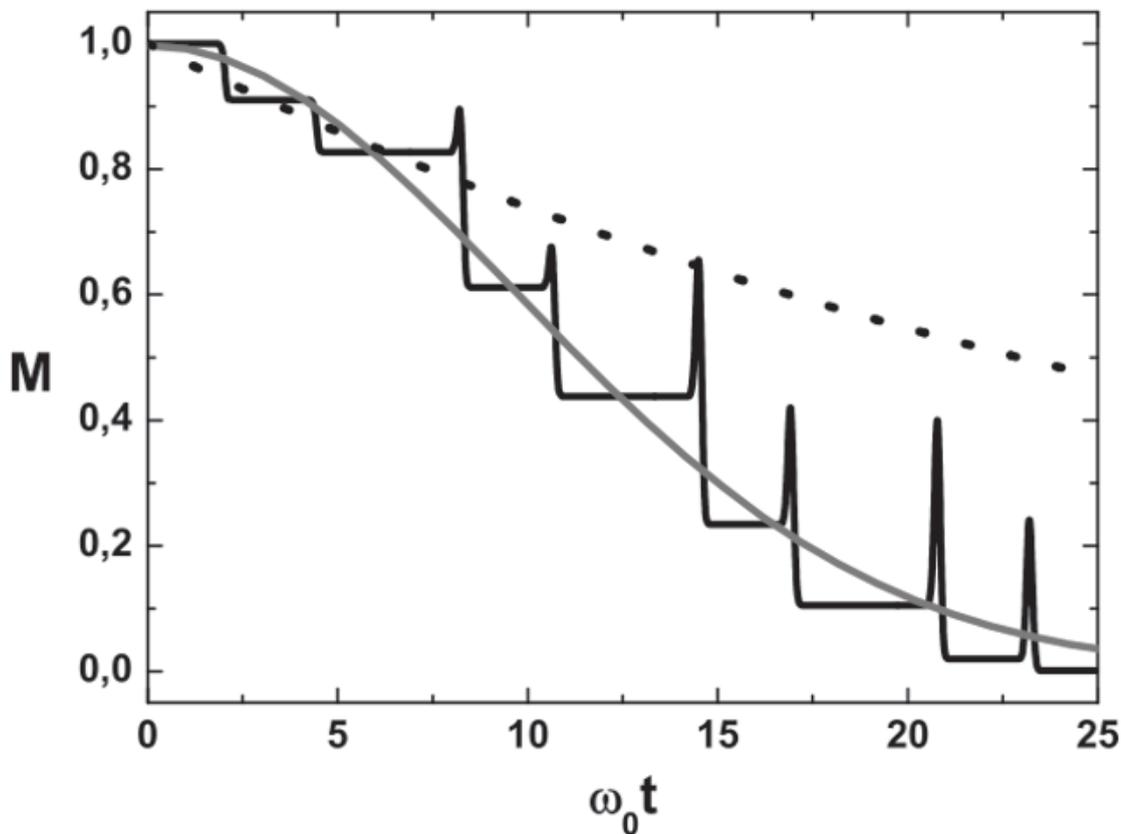


Figura 4.3: Eco de Loschmidt (curva negra) de un estado inicial semiclásico con energía $E_0 = 200\hbar\omega_0$. La curva de puntos representa una aproximación Markoviana por medio de un decaimiento exponencial y la verde un ajuste Gaussiano (ver texto). Los parámetros usados en la dinámica del LE son $E_A = 0$, $E_B = 100\hbar\omega_0$, $V_g = 10\hbar\omega_0$, $V_{AB} = 2\hbar\omega_0$.

no-conservativo de LZ, como está descrito por la Ec. (4.16). Al completar el mapeo, la derivada en el denominador de la Ec. (4.16) brinda la velocidad \dot{q}_C mencionada,

$$P_{AA}(t \rightarrow \infty) = \exp \left[-\frac{2\pi}{\hbar} \frac{|V_{AB}|^2}{2m\omega_0^2 q_C \dot{q}_C} \right]. \quad (4.17)$$

Aquí, la velocidad \dot{q}_C puede estimarse mediante un cálculo clásico de conservación de energía: $\dot{q}_C = \sqrt{2/m [E_0 - E_C]}$.

En la Fig. 4.4 comparamos el valor teórico de la probabilidad de LZ, dado por la Ec. (4.17), con el valor obtenido mediante la evaluación numérica de la primera caída del LE. La comparación se realiza en función de V_{AB} para tres valores de energía diferentes (y por lo tanto tres velocidades diferentes en el cruce). El excelente acuerdo entre ellas implica la exactitud de la representación física de LZ.

Notemos que, para un tamaño específico de la brecha (V_{AB} fijo), la probabilidad de transición es mayor cuando la velocidad en el cruce es mayor. Para $V_{AB} > 5\hbar\omega_0$ observamos una decoherencia fuerte, es decir, casi la mitad del paquete de ondas

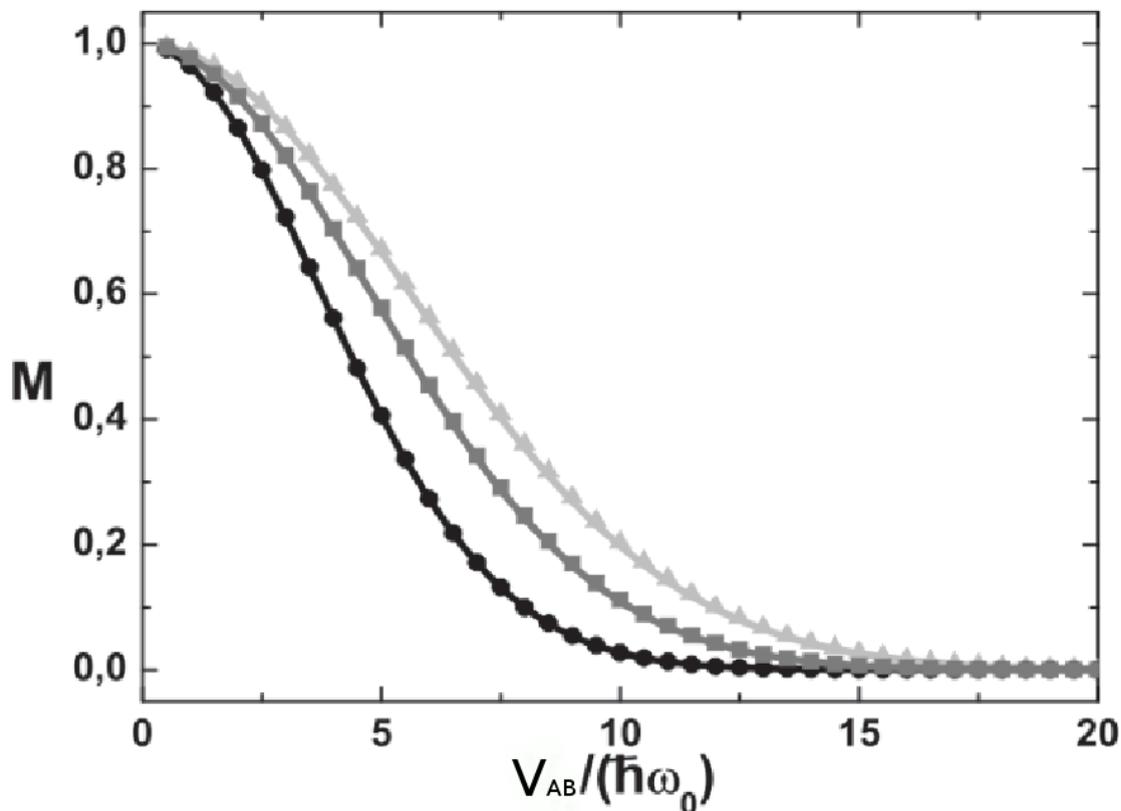


Figura 4.4: Comparación entre el LE evaluado en la primera caída y la probabilidad de LZ (curvas sólidas), como función de V_{AB} , para diferentes energías de los paquetes de ondas. De arriba hacia abajo, los triángulos grises claro corresponden a $\bar{E} = 400,5\hbar\omega_0$, los cuadrados grises a $\bar{E} = 225,5\hbar\omega_0$ y los círculos negros a $\bar{E} = 100,5\hbar\omega_0$.

cambia su proyección de espín. Como consecuencia, \mathcal{S} alcanzará rápidamente un estado mezcla independientemente del estado inicial, siendo este último una superposición coherente o incoherente. Esto puede dificultar la *fragilidad* relativa de estos estados. Por esta razón, consideramos $V_{AB} \gtrsim \hbar\omega_0$ que continúa siendo un régimen no-perturbativo.

Justo antes del tercer escalón aparece un resurgimiento. A partir de la Fig. 4.3 podemos notar que estos resurgimientos se repiten en cada uno de los escalones siguientes. Este fenómeno puede interpretarse mediante la imagen semiclassical de la Fig. 4.1 (b), dado que los picos del LE aparecen exactamente al tiempo en el que el paquete original y el que escapó a la segunda parábola se cruzan. En otras palabras, los pasajes sucesivos conllevan interferencias significativas entre las componentes $|A\rangle$ y $|B\rangle$ del paquete de ondas evolucionado. De hecho, este tipo de interferencias particulares, responsable de los resurgimientos del LE, es una manifestación de la conocida conmensuración de fase de Stückelberg [SAN10], que aparece en un TLS cuando una fuerza periódica lleva a pasajes consecutivos a través del cruce evitado.

Otro hecho notable es que los escalones sucesivos del LE se hacen cada vez más

profundos a medida que la coherencia de fase entre cada paquete comienza a decaer. En este régimen, no se espera que la fórmula para un único pasaje 4.17 sea válida. Sin embargo, asumiendo que cada vez que el paquete de ondas atraviesa el cruce evitado ocurre un proceso LZ (es decir, se cumple la Ec. (4.17)), puede calcularse un tiempo de decaimiento característico τ_ϕ en una aproximación Markoviana. Este tiempo característico estará dado por la fracción de los ciclos del HO que se requieren para alcanzar un decaimiento específico,

$$e^{-1} = (P_{LZ})^{2n},$$

dado que por cada ciclo el paquete de ondas atraviesa dos veces la brecha. Luego,

$$1/n = -2 \ln[P_{LZ}] = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|V_{AB}|^2}{m\omega_0^2 q_C \dot{q}_C}.$$

Como el período de oscilación es constante, $\tau_\phi = n (2\pi/\omega_0)$:

$$\frac{1}{\tau_\phi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{AB}|^2 \frac{1}{2\pi m\omega_0 q_C \dot{q}_C} \quad (4.18)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{AB}|^2 \left[\frac{1}{4\pi \sqrt{E_C (E_0 - E_C)}} \right] \quad (4.19)$$

$$= \left| \frac{V_{AB}}{\hbar} \right|^2 2\pi \hbar N_1(E_0) = (\tau_{AB})^{-2} \tau_B, \quad (4.20)$$

donde E_0 es la energía del estado inicial y E_C la brecha de energía, que está dada por la Ec. (4.6). Por lo tanto, la tasa de decaimiento diverge a medida que la diferencia entre E_0 y E_C disminuye. Además, estados iniciales con energías mayores que E_0 decaen más lentamente. La última línea describe la tasa de decaimiento Markoviana en términos de la densidad de estados directamente acoplados $N_1(E_0)$, y en términos de las escalas de tiempo características $\tau_{AB} = \hbar/|V_{AB}|$ y $\tau_B = 2\pi\hbar N_1(E_0)$.

El decaimiento exponencial correspondiente puede ser visto como una aproximación Markoviana a la degradación del LE respecto al proceso de flip-flop. Como se muestra en la Fig. 4.3, la comparación con el decaimiento del LE es sólo válida durante el primer ciclo. Pasajes repetidos producirán efectos de memoria que no están contenidos en la aplicación sucesiva de la fórmula de LZ para un único pasaje. Notablemente, observamos que el LE se comporta como una Gaussiana $M(t) = \exp[-\frac{1}{2}(t/\tau_G)^2]$. Dentro de un rango de energías considerablemente grande, la escala de tiempo de la Gaussiana resulta ser alrededor de 1/3 del tiempo Markoviano, es decir que $\tau_G \simeq \tau_\phi/3$.

En el contexto de sistemas de espines que interactúan con un baño de espines, Zurek y colaboradores [ZCP07] han argumentado que un decaimiento Gaussiano del LE puede identificarse con una caminata aleatoria en el espacio de energías. En la representación del espacio de Fock de nuestro sistema, es claro que la decoherencia es un proceso concatenado: la transición entre un estado de espín y el otro controlada por $\tau_{AB} = \hbar/|V_{AB}|$ seguido de un proceso de difusión cuántica a lo largo de la coordenada energía (cadena vertical en la Fig. 4.1 (a)). Este último puede ser

identificado con dicha caminata aleatoria, con una SP dada por $|J_0(2t\sqrt{n}V_g/\hbar)|^2$. Para tiempos cortos, esta SP resulta ser una condición para mantener la coherencia entre ambos estados de espín, y es esencialmente Gaussiana con una escala de tiempo $\tau_{B,QD}(E_0) = \frac{4}{\hbar}\sqrt{E_0 E_C}$. Así, es interesante notar que a pesar del factor numérico, la tasa de decoherencia Gaussiana no-Markoviana continua estando descrita por la Ec. 4.19. Esta característica también está presente en la fórmula de interpolación Gaussiana a exponencial propuesta por Flambaum e Izrailev [FI01] para tiempos cortos, cuando los efectos de memoria son aún efectivos. Sin embargo, a pesar de la plausibilidad de los argumentos mencionados, éstos son más apropiados para describir el decaimiento de un único autoestado de energía pero no son suficientes para proveer una descripción cuantitativa de la degradación de las interferencias colectivas sutiles que están involucradas en la dinámica semiclásica de paquetes de onda.

4.6. Decoherencia y fragilidad

Con el propósito de estudiar la *fragilidad* del estado no-local definido en la Ec. (4.9), fijamos su energía media $\bar{E} \equiv (E_1 + E_2)/2 = (\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + 1)/2 \gg E_C$, y analizamos el LE para un conjunto de diferencias de energía $\Delta E \equiv |E_1 - E_2| = |\alpha_1^2 - \alpha_2^2|$. Aquí, E_1 y E_2 son las energías de cada paquete de ondas semiclásico individual que compone el estado no-local. Resumimos el comportamiento observado graficando $M(t)$ para dos casos representativos en la Fig. 4.5. Allí, comparamos el LE para un estado inicial no-local, una superposición incoherente y el valor promedio de los LEs que corresponden a la dinámica independiente de los dos estados semiclásicos individuales (ver la Ec. (4.15) en el Apéndice). Cuando $\Delta E = 0$ (Fig. 4.5 (a)), no hay casi diferencia entre el comportamiento del LE en los tres casos, dado que los escalones se presentan al mismo tiempo y poseen la misma profundidad. Asignamos este efecto a una particularidad de la interacción considerada, que siendo dependiente de energía, produce un cambio equivalente en las fases cuánticas de cada paquete de ondas de la superposición. Entonces, sólo el tunelamiento adiabático contribuirá al proceso decoherente y éste tiene el mismo efecto para el estado no-local que para la superposición incoherente. La diferencia entre ambos casos reside en que los resurgimientos asociados a la fase de Stückelberg, que ocurren cuando las componentes del paquete de ondas que permanecieron con la misma proyección de espín interfieren con aquellas que la cambiaron. De hecho, la superposición incoherente muestra mayores resurgimientos. Cuando $\Delta E \neq 0$ la situación cambia. Para $\bar{E} = 150\hbar\omega_0$ el estado no-local se degrada más rápidamente que la superposición incoherente a medida que ΔE aumenta, es decir que el LE para el estado no-local tiende a ser menor. Esto significa que a medida que ΔE aumenta, los estados no-locales (en energía) se vuelven más frágiles (Fig. 4.5 (b)). La no-localidad espacial no resulta suficiente para asegurar una diferencia en el comportamiento de estados iniciales diferentes. En particular, si $\alpha_1 = |\alpha|$ y $\alpha_2 = -|\alpha|$ entonces $\Delta E = 0$ pero $\Delta q \neq 0$. Como se muestra en la Fig. 4.5 (a), este caso no muestra evidencia de fragilidad relativa.

Con el propósito de cuantificar las observaciones previas, definimos el LE medio como $\bar{M} = 1/T \int_0^T M(t)dt$. A $T = 20/\omega_0$ calculamos la diferencia $\Delta\bar{M} = |\bar{M}_{inc} - \bar{M}_{cat}|$, donde \bar{M}_{inc} y \bar{M}_{cat} indica el LE medio de la superposición incohe-

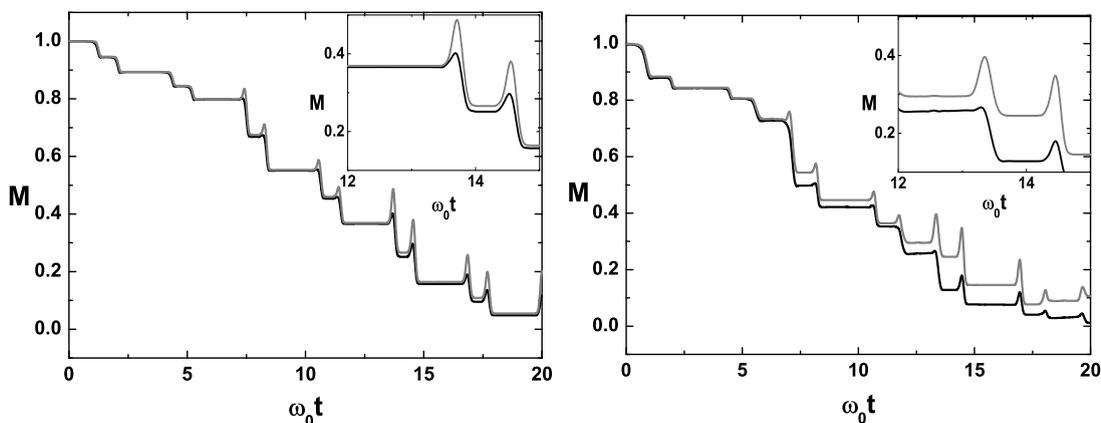


Figura 4.5: Comportamiento del LE para un estado no-local (curva negra) y del LE para una mezcla incoherente (curva gris), dado por la Ec. 4.15. La dinámica del LE está dada por $\bar{E} = 150\hbar\omega_0$, $E_A = 0$, $E_B = 100\hbar\omega_0$, $V_g = 10\hbar\omega_0$, $V_{AB} = 2\hbar\omega_0$. (a) $\Delta E = 0$ y (b) $\Delta E = 200\hbar\omega_0$.

rente y del estado no-local respectivamente. Así, $\Delta\bar{M}$ corresponde al área entre las dos curvas, M_{inc} y M_{cat} . La magnitud $\Delta\bar{M}$ constituye nuestro cuantificador de *fragilidad*. En la Fig. 4.6 mostramos cómo $\Delta\bar{M}$ aumenta con ΔE para diferentes \bar{E} dado que $\Delta E \gtrsim 100\hbar\omega_0$. Las leyes de escaleo resultan exponenciales con la diferencia de energía: $\Delta\bar{M} \sim \exp[(\Delta E)/\bar{E}^\nu]$, donde $\nu \simeq 3,5$. Esto significa que la fragilidad del estado no-local aumenta a medida que crece la no-localidad en energía. Además, notemos que $\Delta\bar{M}$ no se anula aún cuando $\Delta E = 0$. Dos observaciones contribuyen a la interpretación de este efecto. Por un lado, ΔE debe exceder la incerteza en energía natural de cada paquete individual que compone el estado inicial. Por otro lado, dado que ocurren sucesivos procesos LZ que contribuyen a $\Delta\bar{M}$, un valor finito para $\Delta E = 0$ puede asociarse con los resurgimientos que aparecen inmediatamente antes de que un proceso de LZ defina un escalón en el LE. Siendo originado en una commensuración de fases específica, los estados no-locales más frágiles siempre tienen resurgimientos más pequeños que los que ocurren para un estado superposición incoherente. Tal efecto es más apreciable cuando \bar{E} se acerca a E_C . Además, la Fig. 4.6 muestra que la fragilidad tiende a desaparecer y los efectos de ΔE disminuyen a

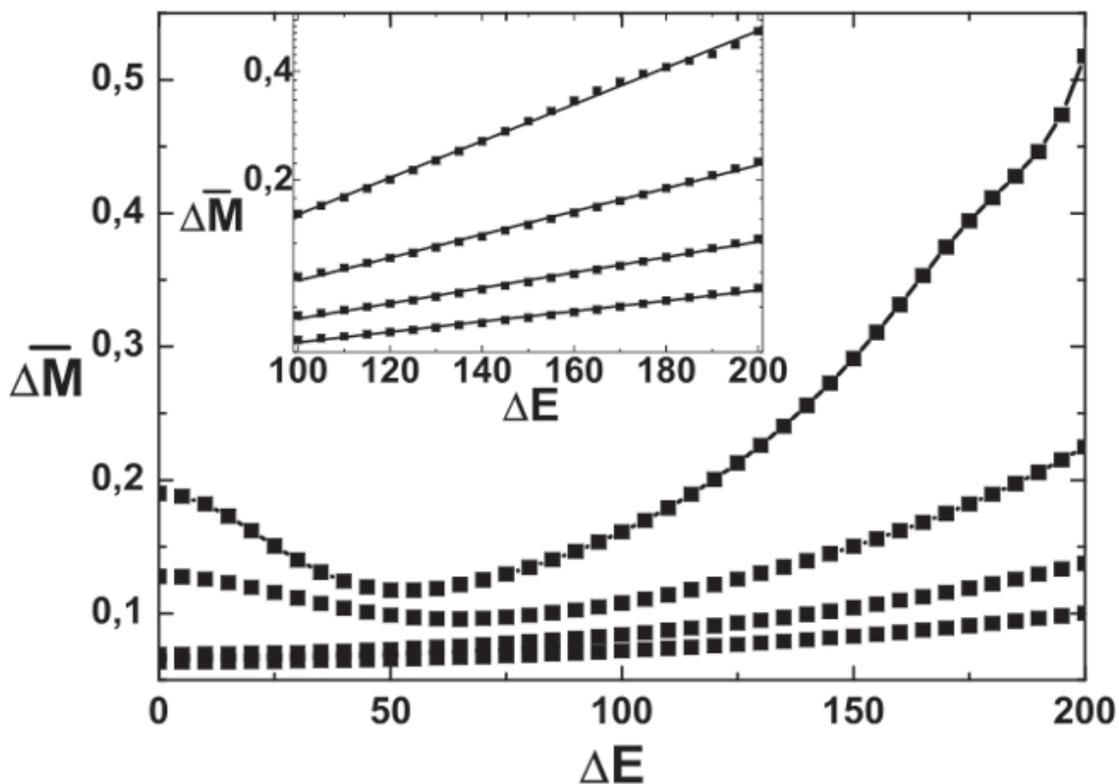


Figura 4.6: $\Delta\bar{M}$ como función de ΔE . De arriba hacia abajo, $\bar{E} = 150\hbar\omega_0$, $\bar{E} = 200\hbar\omega_0$, $\bar{E} = 250\hbar\omega_0$ y $\bar{E} = 300\hbar\omega_0$. Inset: $\Delta\bar{M}$ como función de ΔE en escala logarítmica. Los ajustes lineales indican una dependencia asintótica exponencial para $\Delta E \gtrsim 100\hbar\omega_0$.

medida que \bar{E} aumenta. Ciertamente, si \bar{E} es muy grande, el LE del estado no-local no presenta cambios en su comportamiento incluso cuando ΔE varía para un rango amplio de valores. Podemos interpretar este hecho como una consecuencia de la dependencia de la perturbación con la energía, que para estados iniciales con \bar{E} alta implica que el factor LZ es casi 1. Luego, el tunelamiento a través del cruce evitado es despreciable y la perturbación es menos efectiva como proceso decoherente.

4.7. Conclusiones

En este Capítulo empleamos un modelo bosón-espín para estudiar la decoherencia de un oscilador armónico debido a su interacción con un simple ambiente binario no-degenerado. Dado que el número de estados permitidos del sistema es mucho mayor que los del ambiente, este enfoque conceptual contrasta con la visión usual de sistemas cuánticos abiertos. Una particularidad de nuestro modelo es que el cambio en la configuración de espín sólo es efectiva cuando la coordenada de oscilador es tal que la interacción produce la degeneración de los estados de espín. Luego, la dinámica del proceso de transición entre los dos estados de espín está limitada a ocurrir sólo

en un conjunto acotado de valores cercanos a una coordenada precisa del oscilador armónico. Esta situación, que involucra un conjunto no-ligado de energías discretas, notablemente es bien descrita en términos de la teoría de Landau-Zener, que ha sido desarrollada para un sistema de dos niveles que evoluciona bajo una interacción dependiente del tiempo.

Cuantificamos la degradación de la fase cuántica que produce el ambiente mediante el Eco de Loschmidt. En particular, nos concentramos en la fragilidad relativa de superposiciones coherentes de paquetes de onda (estados no-locales) respecto de superposiciones incoherentes de los mismos paquetes. Esto requiere de la evaluación de la dinámica de dichos estados. Una herramienta que utilizamos para que los cálculos no presenten dificultades numéricas fue el tratamiento de funciones de onda, que involucra un dado número N de estados en el espacio de Hilbert, en lugar de la descripción completa de la matriz densidad, que involucra matrices de dimensión $N \times N$. Los resultados indican que las superposiciones coherentes de paquetes semiclásicos asociados a energías diferentes son más frágiles que los incoherentes. La fragilidad aumenta con la diferencia de energía, es decir, la no-localidad en la representación energía, entre los paquetes de onda individuales. En nuestro modelo, no hay evidencia de una fragilidad estrictamente relacionada con una no-localidad espacial. Sin embargo, cuando la no-localidad espacial está asociada a una no-localidad en energía, el sistema se vuelve cada vez más frágil debido al proceso decoherente.

La fragilidad de los estados no-locales, que aumenta exponencialmente, puede relacionarse con el problema de la termalización en sistemas cuánticos cerrados [PSSV11]. En la Ref. [Deu91] fue propuesto construir un estado no-local con dos funciones de onda macroscópicas (semiclásicas) con energías diferentes, con el propósito de analizar el promedio temporal de cualquier observable particular. En tal situación, para recuperar las predicciones estándar (clásicas) microcanónicas para ese observable, las interferencias entre funciones de onda deben ser despreciables. Nuestros resultados constituyen un paso hacia esa dirección, dado que verificamos que cuanto más separados en energía están los paquetes, más fácilmente se descorrelacionan, es decir que su coherencia de fase de vuelve más frágil.

Como resultado de este trabajo ha sido publicado el artículo *Fragility of superposition states evaluated by the Loschmidt echo* [BZP13].

Capítulo 5

Hacia una descripción más realista: Sistemas de muchos cuerpos

5.1. Introducción.

En los capítulos anteriores hemos estudiado modelos simples, que pueden estar representados por Hamiltonianos de una partícula fermiónica no-interactuante. En particular, en los Capítulos 3 y 4, el testigo dinámico utilizado ha sido el LE, que hemos definido como la señal que se obtiene luego de un procedimiento de reversión temporal imperfecta. La naturaleza de los casos estudiados hasta aquí nos ha permitido considerar el cálculo del LE en su versión más simple, la del LE de un cuerpo. Éste nos ha permitido cuantificar la decoherencia y estudiar la presencia de una QDPT. Con la intención de acercarnos más a la realidad y describir los experimentos mencionados en la Introducción, el siguiente paso está dado por considerar sistemas más complejos. En sistemas de espines, el LE implica la inyección de un exceso de polarización en el sistema que se encuentra en equilibrio a temperatura infinita. Luego, éste evoluciona *hacia adelante* hasta un determinado instante, en el que se cambia el signo del Hamiltoniano mediante un procedimiento de reversión que hace que el sistema evolucione *hacia atrás* durante un período de tiempo simétrico. Por último, se mide la polarización local del espín en donde se inyectó inicialmente. Dado que en la práctica cualquier experimento de este tipo resultaría imperfecto, el LE se atenuará debido a la presencia de grados de libertad no controlados, que tentativamente pueden atribuirse al ambiente, a imperfecciones en el protocolo experimental o incluso a interacciones internas del sistema. Resulta intuitivo aceptar que la dinámica de un sistema complejo de muchos cuerpos eventualmente producirá que una excitación inicial localizada se expanda homogéneamente en todo el sistema. Tal proceso, que en el contexto de los sistemas de espines se conoce como *difusión de espín*, conducirá al sistema a la *equilibración*. Sin embargo, este concepto ingenuo encuentra pronto limitaciones. Por un lado, P. W. Anderson descubrió que bajo ciertas condiciones se puede excluir la difusión de la excitación [And54]. Este problema aún genera interés, tanto como la equilibración de sistemas cuánticos

cerrados de muchos cuerpos [PSSV11, GLTZ10, EFG14, NH14]. Por otro lado, aún este fenómeno de difusión cuando parece irreversible, una serie de experimentos en NMR han revelado que el estado aparentemente equilibrado contiene correlaciones que codifican la memoria del estado inicial [BH84]. El tratamiento de este tipo de sistemas nos posiciona ante la necesidad de reformular el LE como una función de auto-correlación de espín. En lo que resta de esta Tesis nos centraremos en calcular esta función, a la que nos referiremos simplemente como LE.

Al considerar la dinámica de un sistema real de espines interactuantes, uno se encuentra con que la evaluación numérica del LE para un sistema *finito* débilmente perturbado podría no justificar las observaciones experimentales [LUP98]. Dado que los experimentos involucran sistemas casi *infinitos*, uno se podría preguntar si los mecanismos que producen el decaimiento del LE y la equilibración del sistema emergen eventualmente a partir del aumento progresivo del tamaño del sistema. En este Capítulo abordamos ese interrogante considerando cálculos de sistemas de $N = 12, 14$ y 16 espines interactuantes, cuya dinámica involucra el espacio de Hilbert completo de dimensión 2^N [DBZP13]. Estudiamos un modelo de espines con interacción Dipolar *todos contra todos*, cuyas fluctuaciones estadísticas pequeñas facilitan el análisis del TL. Como en el caso del eco de polarización [ZME92, LUP98], el estado inicial está dado por una excitación local en un único espín, y la detección también se realiza localmente [PLU95, ZDLP12, ZDI⁺13].

El comportamiento del LE tiene regímenes bien marcados, un decaimiento a tiempos cortos gobernado por una ley cuadrática, seguido de un decaimiento exponencial y finalmente una saturación a tiempos largos. En particular, analizamos en detalle el régimen exponencial y mostramos que, en presencia de una pequeña perturbación Hamiltoniana, el decaimiento del LE sigue una FGR, como si el sistema estuviera interactuando con un continuo. Esto indica que el sistema se comportaría como su propio ambiente. Más aún, observamos que la excitación se mantiene distribuida homogéneamente a pesar de la reversión. En otras palabras, la equilibración inducida por el Hamiltoniano no-perturbado es irreversible en presencia de una perturbación arbitrariamente pequeña. El mecanismo físico responsable de tal FGR corresponde a una proliferación de interacciones efectivas de dos y de cuatro cuerpos, mediada por procesos virtuales. Notablemente, mostramos que el régimen de la FGR es más amplio a medida que el tamaño del sistema aumenta. Esta observación implicaría que, en el TL, la proliferación de interacciones efectivas es el mecanismo principal que rige la irreversibilidad.

5.2. La formulación del Eco de Loschmidt en sistemas de espines.

La difusión de una excitación local en los sistemas experimentales puede ser descrita considerando un sistema de N espines $1/2$ que se encuentran en un estado de temperatura infinita, es decir una mezcla completamente despolarizada, más una polarización inyectada localmente. Esto significa que su estado a $t = 0$ está dado por la matriz densidad:

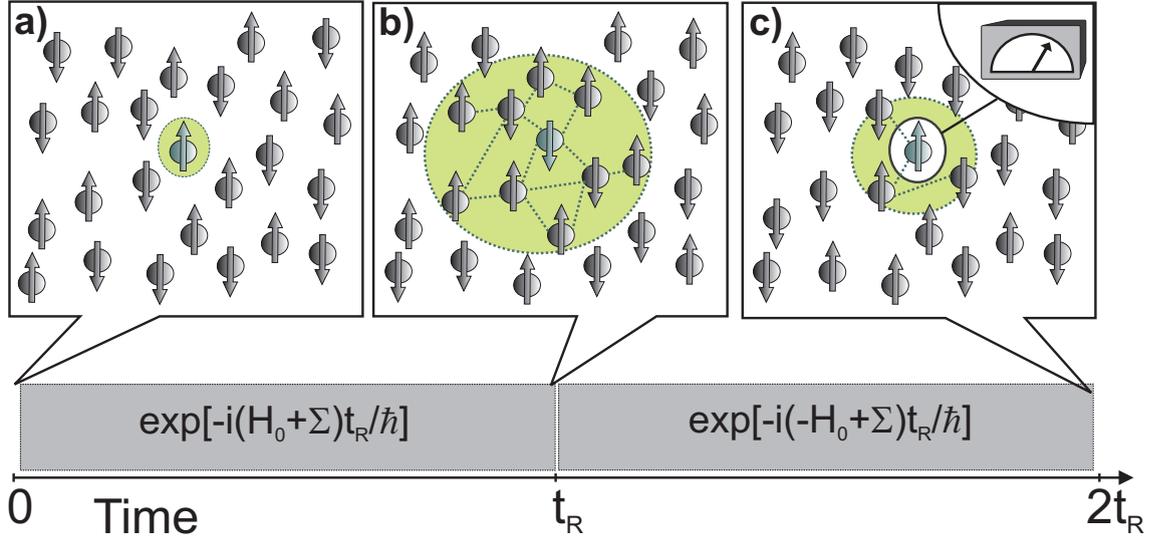


Figura 5.1: (a) Representación pictórica del estado inicial de polarización local, dado por la Ec. (5.1). La dinámica perturbada transforma el estado inicial en un estado correlacionado, representado en (b). Finalmente, la inversión temporal, que involucra el cambio de signo de H_0 en t_R . Finalmente, (c) se realiza una medición local en el mismo espín inicialmente polarizado.

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{2^N} (\hat{\mathbf{I}} + 2\hat{S}_1^z). \quad (5.1)$$

Aquí, $\hat{\rho}_0$ representa el estado en el que el espín 1 está polarizado mientras que el resto no lo está, es decir que $\text{tr}[\hat{S}_1^z \hat{\rho}_0] = \frac{1}{2}$ y $\text{tr}[\hat{S}_i^z \hat{\rho}_0] = 0 \forall i \neq 1$.

Con la intención de describir los experimentos originales, la evaluación numérica del LE consiste en una reversión temporal imperfecta y luego una medición local, como está esquematizado en la Fig. 5.1.

El protocolo de la Fig. 5.1, muestra primero una evolución *hacia adelante* gobernada por el Hamiltoniano \hat{H}_0 hasta un instante de tiempo t_R . A partir de ese momento comienza una evolución simétrica *hacia atrás*, gobernada por un Hamiltoniano $-\hat{H}_0$. Dado que, como hemos mencionado, es inevitable el control imperfecto sobre el sistema, existen perturbaciones que denotamos $\hat{\Sigma}$, que estarán presentes en ambas evoluciones. Los operadores evolución hacia adelante y hacia atrás están dados por

$$\hat{U}_{(+)}(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (\hat{H}_0 + \hat{\Sigma}) t \right], \quad (5.2)$$

y

$$\hat{U}_{(-)}(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (-\hat{H}_0 + \hat{\Sigma}) t \right], \quad (5.3)$$

respectivamente. Luego de ambas evoluciones, se realiza una medición local de la polarización en el sitio 1, en $t = 2t_R$, resultando

$$M_{11}(t = 2t_R) = 2\text{tr} \left[\hat{S}_1^z \hat{U}_{LE}(t) \hat{\rho}_0 \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \right] = 2\text{tr} \left[\hat{S}_1^z \hat{\rho}_t \right], \quad (5.4)$$

donde $\hat{U}_{LE}(2t_R) = \hat{U}_{(-)}(t_R)\hat{U}_{(+)}(t_R)$ y la dependencia temporal está implícita en $\hat{\rho}_t$, que, en la imagen de Schrödinger, resulta,

$$\hat{\rho}_t = \hat{U}_{LE}(t)\hat{\rho}_0\hat{U}_{LE}^\dagger(t). \quad (5.5)$$

Luego de una manipulación algebraica y tomando como estado inicial el de la Ec. (5.1), el LE puede reescribirse como:

$$M_{1,1}(t) = \frac{1}{2^{N-2}} \text{tr}[\hat{U}_{LE}^\dagger(t)\hat{S}_1^z(0)\hat{U}_{LE}(t)\hat{S}_1^z(0)] = \frac{\text{tr}[\hat{S}_1^z(t)\hat{S}_1^z(0)]}{\text{tr}[\hat{S}_1^z(0)\hat{S}_1^z(0)]}, \quad (5.6)$$

en donde la dependencia temporal está escrita en la representación de Heisenberg,

$$\hat{S}_1^z(t) = \hat{U}_{LE}^\dagger(t)\hat{S}_1^z(0)\hat{U}_{LE}(t). \quad (5.7)$$

Notemos que la Ec. (5.6) es una función de correlación en el mismo sitio pero a diferentes tiempos, por eso se la denomina función de auto-correlación.

En términos del producto interno de Hilbert–Schmidt entre la matriz densidad inicial y la evolucionada, dadas por las Ecs. (5.1) y (5.5) respectivamente, el LE puede escribirse como:

$$M_{1,1}(t) = 2^N \text{tr}[\hat{\rho}_0\hat{\rho}_t] - 1 = 2 \frac{\text{tr}[\hat{\rho}_0\hat{\rho}_t]}{\text{tr}[\hat{\rho}_0\hat{\rho}_0]} - 1. \quad (5.8)$$

La Ec. (5.8) puede interpretarse como el solapamiento estadístico entre dos estados, como en la definición estándar del LE para paquetes de onda [JP01] y para estados mezcla [CDPZ03b, BZP13].

Pueden derivarse expresiones equivalentes para el LE descomponiendo la matriz densidad en una base de estados puros. Para hacerlo, consideremos la base computacional Ising $\{|i\rangle\}$ y definamos un conjunto \mathcal{A} de índices j que etiquetan aquellos estados de la base cuyo espín 1 está orientado hacia arriba (en la dirección paralela al campo magnético externo), es decir $j \in \mathcal{A} \Leftrightarrow \hat{S}_1^z |j\rangle = +\frac{1}{2} |j\rangle$. Puede verificarse entonces que $\hat{\rho}_0 = \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} |i\rangle \langle i|$. Entonces, como se introdujo en la Ref. [PLU95],

$$\begin{aligned} M_{1,1}(t) &= 2 \left[\sum_{i \in \mathcal{A}} \sum_{j \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left| \langle j | \hat{U}_{LE}(t) | i \rangle \right|^2 - \frac{1}{2} \right] \\ &= \left[\sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \left(\left| \langle i | \hat{U}_{LE}(t) | i \rangle \right|^2 + \sum_{j \in \mathcal{A} (j \neq i)} \left| \langle j | \hat{U}_{LE}(t) | i \rangle \right|^2 - \sum_{j \in \mathcal{A}^C} \left| \langle j | \hat{U}_{LE}(t) | i \rangle \right|^2 \right) \right], \end{aligned} \quad (5.9)$$

donde \mathcal{A}^C es el complemento de \mathcal{A} , es decir $j \in \mathcal{A}^C \Leftrightarrow \hat{S}_1^z |j\rangle = -\frac{1}{2} |j\rangle$. Aquí, hay dos términos que contribuyen al observable local $M_{1,1}(t)$. Este balance de probabilidades conlleva al comportamiento asintótico apropiado de $M_{1,1}(t)$ de acuerdo a las simetrías que restringen la evolución.

Haciendo uso de la identidad $\hat{S}_1^z = \hat{S}_1^+ \hat{S}_1^- - \frac{1}{2} \hat{\mathbf{1}}$ en la Ec. (5.10), la invariancia de la traza ante permutaciones cíclicas asegura que $\text{tr}[\hat{S}_1^z(t)\hat{S}_1^z(0)] = \text{tr}[\hat{S}_1^-(0)\hat{S}_1^z(t)\hat{S}_1^+(0)] - \frac{1}{2} \text{tr}[\hat{S}_1^z(t)]$. Además, como $\text{tr}[\hat{S}_1^z(t)] = \text{tr}[\hat{S}_1^z(0)] = 0$, se tiene que:

$$M_{1,1}(t) = 2 \sum_i \frac{1}{2^{N-1}} \langle i | \hat{S}_1^-(0) \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z(0) \hat{U}_{LE}(t) \hat{S}_1^+(0) | i \rangle \quad (5.10)$$

$$= 2 \sum_{i \in \mathcal{F}_1} \frac{1}{2^{N-1}} \langle i | \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}_{LE}(t) | i \rangle, \quad (5.11)$$

que representa una forma explícita de reescribir la Ec. (5.4) como un promedio sobre ensamble. Aquí, resulta crucial el hecho de que \hat{S}_1^z es un operador *local* ya que permite escribir su promedio en la Ec. (5.11) como el valor de expectación calculado con un único estado superposición puro [ADLP08],

$$M_{1,1}(t) \simeq 2 \langle \Psi_{neq} | \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}_{LE}(t) | \Psi_{neq} \rangle, \quad (5.12)$$

donde:

$$|\Psi_{neq}\rangle = \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{\sqrt{2^{N-1}}} e^{i\varphi_i} |i\rangle, \quad (5.13)$$

con φ_i una fase aleatoria distribuida uniformemente en $[0, 2\pi)$. En rigor, el lado derecho de la Ec. (5.12) requiere un promedio sobre distintas realizaciones de la fase aleatoria. Las fluctuaciones estadísticas disminuyen a medida que aumenta el número de realizaciones [ADLP08]. En particular, para sistemas con $N \gtrsim 10$, estas fluctuaciones son despreciables al considerar ~ 10 realizaciones. En sistemas con tamaño relativamente grande ($N \sim 20$) una única realización de fases es suficiente para obtener un bajo nivel de tales fluctuaciones. El estado en la Ec. ((5.13)) representa una superposición aleatoria que imita exitosamente el cálculo del promedio sobre ensamble y por ello provee una mejora cuadrática en el uso de los recursos computacionales [ADLP08, PPV14]. La Ec. (5.13) puede reescribirse como:

$$|\Psi_{neq}\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes \sum_i \frac{1}{\sqrt{2^{N-1}}} e^{i\varphi_i} |\xi_i\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\Phi_{2^{N-1}}\rangle. \quad (5.14)$$

Aquí, el índice i suma sobre todos los estados del espacio de Hilbert de un conjunto de $N - 1$ espines y $|\xi_i\rangle$ representa la base computacional Ising del espacio de Hilbert de $N - 1$ espines. En consecuencia, $|\Phi_{2^{N-1}}\rangle$ es una superposición aleatoria no-polarizada que está definida en el espacio de Hilbert de $N - 1$ espines.

5.3. El modelo *todos contra todos*.

Consideramos el estado inicial dado por la Ec. (5.1), cuya polarización está orientada a lo largo de la dirección de referencia z en la terna del laboratorio. En esta dirección, el abrumador campo Zeeman separa energéticamente los estados de acuerdo a su proyección de espín total. Entonces, pese a que los espines están sujetos a la interacción del tipo dipolo-dipolo completa, su evolución está dada por el Hamiltoniano Dipolar Truncado [Sli80],

$$\hat{H}_{dip} = \sum_{i,j}^N J_{ij}^{dip}(N) \left[2\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \left(\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y \right) \right]. \quad (5.15)$$

$$= \sum_{i,j}^N J_{ij}^{dip}(N) \left[2\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{1}{2} \left(\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+ \right) \right]. \quad (5.16)$$

Esta interacción conserva la proyección de espín y de acuerdo a eso recibe el nombre de *secular*. La simetría $\left[\hat{H}_{dip}, \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^z \right] = 0$ provee de una estructura relevante de subespacios, dada por la proyección de espín específica en z : $\nu = \sum_{i=1}^N S_i^z = \frac{N}{2}, (\frac{N}{2} - 1), \dots, -\frac{N}{2}$. En un sistema de N espines, hay $N + 1$ subespacios con ν definido, y por lo tanto la dinámica inducida por \hat{H}_{dip} se mantendrá estrictamente confinada a cada uno de los subespacios.

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

$$J_{ij}^{dip}(N) = J_{ji}^{dip}(N) = (1 + \delta J) \times (-1)^k \times \frac{J_0}{\sqrt{N}}. \quad (5.17)$$

Aquí, δJ es un número aleatorio tomado de una distribución uniforme en el intervalo $[-0,1,0,1]$ que asegura la eliminación de degeneraciones al mismo tiempo que mantiene las fluctuaciones del segundo momento pequeñas. Como en un cristal el signo de las interacciones dipolares depende de la orientación espacial del vector inter-espín, tomamos k de una distribución binaria aleatoria en $\{0,1\}$. El precio a pagar en un modelo todos contra todos es la ausencia de una estructura dinámica jerárquica, como en los sistemas experimentales.

El factor $1/\sqrt{N}$ asegura que el cuadrado del segundo momento *local* σ^2 de la interacción Dipolar se mantiene constante a medida que cambia N :

$$\sigma^2 \simeq \sigma_i^2 = \sum_{j(\neq i)}^N \left(\frac{J_{ij}^{dip}(N)}{2} \right)^2 \simeq \frac{J_0^2}{4}.$$

Por lo tanto, independientemente del tamaño de los sistemas considerados, $\hbar/\sqrt{\sigma^2}$ recupera el tiempo característico T_2 de la interacción espín-espín y, en consecuencia, J_0 provee la unidad natural de energía.

Una evolución hacia adelante gobernada por interacciones de muchos cuerpos de acuerdo con \hat{H}_{dip} es revertida experimentalmente mediante una secuencia de pulsos apropiada, como está reportado en la Ref. [UPL98]. Con el propósito de llevar a cabo tal cambio de signo $\hat{H}_{dip} \rightarrow -\hat{H}_{dip}$, se debe rotar el estado de espín en la dirección de un campo de radiofrecuencias (rf) que se enciende inmediatamente. Este campo de rf es perpendicular al campo Zeeman original y define un nuevo sistema de referencia (o terna) rotante. En la terna rotante, redefinimos la dirección z y el campo Zeeman que provee el campo de rf está dado por:

$$\hat{H}_Z = \sum_{i=1}^N \hbar\omega_1 \hat{S}_i^z, \quad (5.18)$$

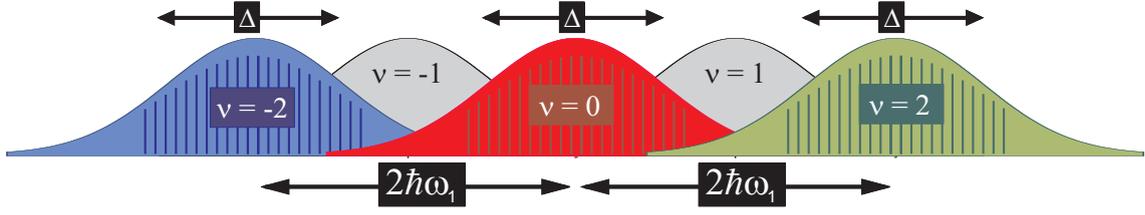


Figura 5.2: Representación pictórica de la LDOS del Hamiltoniano $\hat{H}_{dip} + \hat{H}_Z$ respecto del estado dado por la Ec. (5.1).

Nótese que \hat{H}_Z crea saltos (*gaps*) de energía finitos, de magnitud $\hbar\omega_1$, que separan los subespacios según su proyección de espín. Evidentemente, estos gaps no son tan efectivos como la separación *infinita* que genera el imán (en la terna del laboratorio). Como consecuencia, los términos del Hamiltoniano que no conservan polarización, llamados *no-seculares*, se tornan relevantes. El signo de las contribuciones no-seculares no puede ser invertido experimentalmente. Así, estos constituyen la perturbación $\hat{\Sigma}$, que aquí están representados por un Hamiltoniano de cuantos dobles (DQ por sus siglas en inglés: *Double Quantum*)

$$\hat{\Sigma} = \hat{H}_{dq} = \sum_{i,j}^N J_{ij}^{dq}(N) \left[\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x - \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y \right] \quad (5.19)$$

$$= \sum_{i,j}^N J_{ij}^{dq}(N) \left[\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^+ + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^- \right]. \quad (5.20)$$

Aquí, la intensidad del acoplamiento $J_{ij}^{dq}(N)$ satisface una definición análoga a la de la Ec. (5.17). Notemos que $\left[\hat{H}_{dq}, \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^z \right] \neq 0$ dado que \hat{H}_{dq} mezcla subespacios cuya proyección de espín difiere en 2 [BMGP85]. Experimentalmente, estas transiciones inter-subespacio se suprimen parcialmente al incrementar la intensidad del campo de rf, es decir $\hbar\omega_1$ [Usa99, PLU+00].

Con el propósito de simular el procedimiento del LE, asumimos que la evolución hacia adelante está gobernada por el Hamiltoniano no-perturbado $\hat{H}_0 = \hat{H}_{dip} + \hat{H}_Z$. A pesar de que esta evolución corresponde a la terna del laboratorio, la inclusión del término \hat{H}_Z se debe a una reversión simétrica. Además, dado que $\left[\hat{H}_{dip}, \hat{H}_Z \right] = 0$, su inclusión no introduce ninguna dinámica no-trivial. A un tiempo t_R , una secuencia de pulsos cambia el signo de \hat{H}_{dip} , y comienza una evolución simétrica perturbada hacia atrás. Luego, la dinámica hacia atrás está descrita por $-\hat{H}_0 + \hat{\Sigma} = -\hat{H}_{dip} - \hat{H}_Z + \hat{H}_{dq}$, que corresponde a la terna rotante en el experimento. Los operadores evolución en cada período t_R son $\hat{U}_+(t_R) = \exp[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_R]$ y $\hat{U}_-(t_R) = \exp[-\frac{i}{\hbar}(-\hat{H}_0 + \hat{\Sigma}) t_R]$ respectivamente.

La información contenida en el dominio temporal, esencialmente dada por la escala de tiempo experimental T_2 , puede complementarse con la imagen espectral que brinda la densidad local de estados (LDOS por sus siglas en inglés: Local Density of States). La LDOS muestra cómo un estado particular se distribuye entre los autoestados de un Hamiltoniano dado. Existe una amplia literatura en la que se

reconoce a la LDOS como indicador de la aparición del caos [SBI12, WR13], de escalas de tiempos de relajación [DBMP08, DZP11, THVS14] y la intensidad de las fluctuaciones alrededor de un estado estacionario [ZDTH+13]. Pese a que nuestra evaluación de la dinámica no se basa en la diagonalización [DBZP13], podemos inferir la forma de la LDOS no-perturbada ($\hat{H}_{dip} + \hat{H}_Z$) con respecto al estado inicial definido en la Ec. (5.1), como mostramos pictóricamente en la Fig. 5.2. Cuando $\hbar\omega_1 = 0$, los subespacios de proyección de espín están degenerados y la LDOS no-perturbada es una única Gaussiana de ancho $\Delta^2 = \sum_i \sigma_i^2/4 \simeq N\sigma^2/4$, es decir el cuadrado del segundo momento *global* de \hat{H}_{dip} . Si $\hbar\omega_1 \gtrsim \Delta$, los subespacios de la LDOS se separan unos de otros. Un subespacio cuya proyección de espín es ν tiene una energía media $E_\nu \simeq \nu\hbar\omega_1$, y por lo tanto la LDOS no-perturbada dentro de cada subespacio es:

$$P_\nu(\varepsilon) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} \exp\left[-\frac{(\varepsilon - E_\nu)^2}{2\Delta^2}\right]. \quad (5.21)$$

El dominio temporal puede ser recuperado explícitamente a partir de la transformada de Fourier de $P_\nu(\varepsilon)$ [THVS14].

5.4. La aproximación Regla de Oro de Fermi estándar en sistemas de espines.

Introducimos los regímenes del decaimiento del LE, siguiendo el paradigma de las Refs. [JP01, JSB01, CLM+02]. Si la perturbación durante la evolución hacia atrás es extremadamente pequeña, la expansión del operador LE a tiempos cortos resulta en un decaimiento cuadrático que se extiende hasta que aparecen las recurrencias. Esto constituye el régimen perturbativo, en el cual

$$\begin{aligned} M_{1,1}(t) &= 2 \langle \Psi_{neq} | \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}_{LE}(t) | \Psi_{neq} \rangle \\ &\simeq 1 - \frac{1}{4} \langle \Psi_{neq} | \left[\hat{\Sigma}^2 - 2\hat{\Sigma} \hat{S}_1^z \hat{\Sigma} \right] | \Psi_{neq} \rangle \left(\frac{t}{\hbar} \right)^2 \\ &\simeq 1 - [t/\tau_\phi]^2. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Aquí, $1/\tau_\phi$ aumenta linealmente con la intensidad de la perturbación, medida a través de su segundo momento local. De hecho, $\Sigma_{\alpha\beta}$, los elementos de matriz de $\hat{\Sigma}$, no superan el espaciamiento de niveles $d_{\alpha\beta}$ asociados a α y β , dos estados directamente conectados.

A medida que la perturbación aumenta, el segundo momento local supera el espaciamiento típico entre dos estados directamente conectados. En este punto ocurre la aparición de un decaimiento gobernado por la FGR. En tal caso, las energías perturbadas \tilde{E}_α se obtienen partir de las energías no-perturbadas E_α , mediante una serie perturbativa de segundo orden, que debe ser evaluada en el TL:

$$\tilde{E}_\alpha \simeq E_\alpha + \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_\beta \frac{|\Sigma_{\alpha\beta}|^2}{d_{\alpha\beta} + i\eta} = E_\alpha + \Delta_\alpha - i\Gamma_\alpha,$$

donde el corrimiento real Δ_α y la corrección imaginaria Γ_α están definidas como

$$\Delta_\alpha = \mathcal{P} \sum_{\beta} |\Sigma_{\alpha\beta}|^2 / d_{\alpha\beta}, \quad (5.23)$$

$$\Gamma_\alpha = 2\pi \sum_{\beta} |\Sigma_{\alpha\beta}|^2 \delta(E_\beta - E_\alpha). \quad (5.24)$$

Aquí \mathcal{P} representa el valor principal. En la mayor parte de los casos de interés, los Δ_α son pequeños corrimientos de energía, que pueden ser despreciados. Notemos que el decaimiento que introducen los Γ_α requieren la *mezcla de un número infinitamente grande de estados cuasi-degenerados*. Adicionalmente, los Γ_α pueden reemplazarse por su promedio local en energía,

$$\langle \Gamma \rangle = 2\pi \langle \Sigma^2 \rangle / d. \quad (5.25)$$

Aquí, d representa el espaciado medio de niveles de estados directamente conectados. Por lo tanto, con las aproximaciones estándar de la FGR, el operador LE deja de ser unitario y contiene un decaimiento

$$\hat{U}_{LE}(t) \rightarrow \sum_{\alpha} e^{i\tilde{E}_\alpha t/\hbar} e^{-\Gamma_\alpha t/\hbar} |\alpha\rangle \langle \alpha| \simeq \sum_{\alpha} e^{-\Gamma_\alpha t/\hbar} |\alpha\rangle \langle \alpha|. \quad (5.26)$$

Eventualmente, algunas \tilde{E}_α pueden tener parte imaginaria nula. Luego, el operador evolución \hat{U}_{LE} es un proyector sobre el subespacio expandido por los autoestados asociados a tales \tilde{E}_α . La Ec. (5.26) la aproximación estándar del LE en la Teoría de Matrices Aleatorias (RMT por sus siglas en inglés: *Random Matrix Theory*) [JSB01, CLM+02].

5.5. De las interacciones virtuales hacia una Regla de Oro de Fermi Efectiva.

Hemos mencionado que la perturbación no-secular $\hat{\Sigma}$ sólo mezcla estados correspondientes a diferentes subespacios Zeeman. Entonces, el requerimiento previo de la FGR de mezclar estados cuasi-degenerados no se aplica. Sin embargo, como han sugerido los experimentos, esta interacción puede actuar a través de términos seculares efectivos, que pueden hacerse importantes en el TL [PLU+00]. En lo siguiente, formalizamos estas ideas, mostrando que pequeñas perturbaciones de hecho pueden conectar estados cuasi-degenerados vía procesos virtuales.

Dada una proyección total de espín específica ν , el subespacio \mathcal{S}_ν correspondiente está acoplado a los subespacios $\mathcal{S}_{\nu+2}$ y $\mathcal{S}_{\nu-2}$ por la interacción DQ. En otras palabras, la perturbación $\hat{\Sigma}$ produce transiciones con $\Delta\nu = \pm 2$ que involucran una diferencia de energía de $2\hbar\omega_1$. Sin embargo, hay transiciones de órdenes más altos que impiden tal diferencia de energía. Por ejemplo, cuando el estado $|\uparrow\downarrow\rangle$ transiciona al estado $|\uparrow\uparrow\rangle$ y luego de vuelta a $|\downarrow\uparrow\rangle$, se obtiene una interacción flip-flop efectiva entre los espines 1 y 3. Esto constituye un acoplamiento efectivo intra-subespacio de orden $(J^{dq})^2/(\hbar\omega_1)$. Un proceso más sofisticado ocurre cuando $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ transiciona a $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$

y luego de vuelta a $|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$. Este proceso constituye una interacción efectiva de cuatro cuerpos. Por lo tanto, si los saltos de energía $\hbar\omega_1$ son lo suficientemente grandes, las transiciones *inter*-subespacio son truncadas, pero entonces se establecen las transiciones *intra*-subespacio mediadas por subespacios satélite. Esto nos conduce a un Hamiltoniano efectivo,

$$\hat{V}_{eff} \simeq \sum_{k,l}^N \sum_{i,j}^N \frac{J_{lk}^{dq} J_{ij}^{dq}}{8\hbar\omega_1} \left(\hat{S}_l^+ \hat{S}_k^+ \hat{S}_i^- \hat{S}_j^- + \hat{S}_l^- \hat{S}_k^- \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^+ \right). \quad (5.27)$$

Este resultado encuentra justificación formal tanto en la aproximación de Hamiltonianos Efectivos mediante el tratamiento de la GF [PTM02] como en la teoría de Hamiltonianos Promedio [HW68]. Resulta crucial notar que \hat{V}_{eff} ciertamente puede mezclar estados cuasi-degenerados de un subespacio particular \mathcal{S}_ν . Más aún, puede acoplar estados en \mathcal{S}_ν que no estaban originalmente acoplados mediante \hat{H}_{dip} . En la práctica, esto significa que aparecen elementos de matriz efectivos en lugares en los que la matriz original \hat{H}_{dip} tenía entradas nulas, conllevando una proliferación considerable de las interacciones.

En principio, pueden ocurrir interferencias destructivas. Por ejemplo, la transición del estado $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ hacia $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ y luego hacia $|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$ podría cancelar la transición del estado $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ hacia $|\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$ y luego hacia $|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$. Sin embargo, muchas de las interferencias destructivas habilitadas por un modelo homogéneo todos contra todos, es decir $J_{lk}^{dq} = J_{ij}^{dq}$ para cualquier índice l, k, i, j , son removidas debido a que hemos tomado parámetros k y δJ aleatorios. Otros modelos realistas de espines, en los que la intensidad y el signo de la interacción espín-espín depende de las posiciones relativas de los espines, no exhiben este tipo de interferencias. Basados en los mismos argumentos, las correcciones de los acoples efectivos en la Ec. (5.27) generan entradas *casi* aleatorias en el Hamiltoniano de cada subespacio. Esta proliferación se puede justificar modelando la dinámica a través de la RMT en lugar de ensamblajes aleatorios de dos cuerpos [BF71, FGI96].

El paso siguiente consiste en formular la descripción de una FGR efectiva, como en la RMT. Definimos el segundo momento medio de las interacciones virtuales:

$$\langle V_{eff}^2 \rangle = \left\langle \sum_{\beta} \left| \langle \beta | \hat{V}_{eff} | \alpha \rangle \right|^2 \right\rangle_{\alpha} = \left| a \frac{(J^{dq})^2}{2\hbar\omega_1} \right|^2, \quad (5.28)$$

donde a es un coeficiente geométrico que cuenta el número promedio de estados conectados a un estado particular α . Además, $\langle \cdot \rangle_{\alpha}$ denota el promedio sobre todos los autoestados no-perturbados α . En analogía con la Ec. (5.25),

$$\Gamma_{eff} \sim 2\pi \langle V_{eff}^2 \rangle d_{eff}^{-1} = 2\pi \left| a \frac{(J^{dq})^2}{2\hbar\omega_1} \right|^2 d_{eff}^{-1}, \quad (5.29)$$

donde d_{eff}^{-1} es la densidad de estados directamente conectados por la interacción virtual. Ésta puede ser estimada como $d_{eff} \sim bJ^{dip}$ para algún coeficiente geométrico $b \ll 1$. Ambos coeficientes, a y b representan una sutil interacción entre N , el número de coordinación de la red, las reglas de selección de la interacción, etc.

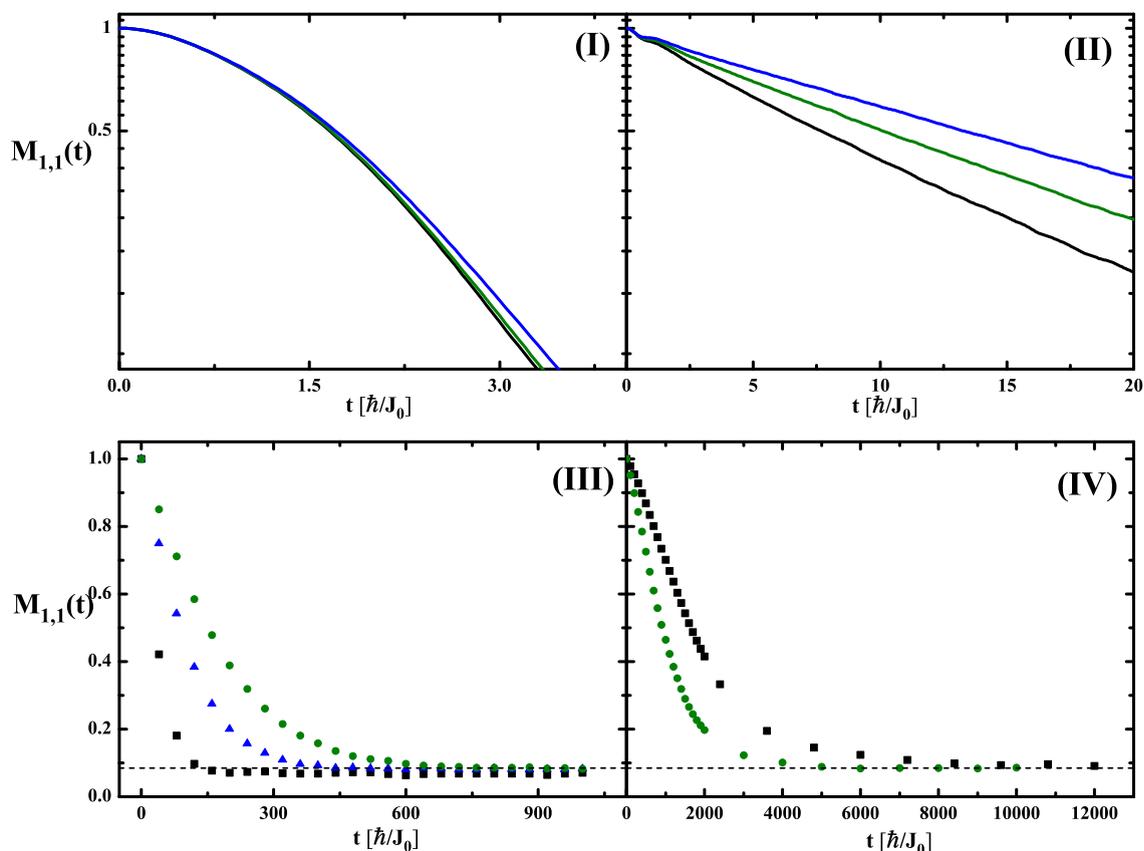


Figura 5.3: Dependencia temporal del LE en un sistema de $N = 14$ espines. Las magnitudes de $(J^{dq})^2/(\hbar\omega_1)$ son, de arriba hacia abajo, (I): $0,67J_0, 1,35J_0, \infty$; (II): $0,19J_0, 0,21J_0, 0,23J_0$; (III): $0,071J_0, 0,048J_0, 0,038J_0$; (IV): $0,013J_0, 0,009J_0$. Las figuras (I) y (II) están en escala logarítmica mientras que las figuras (III) y (IV) están en escala lineal.

En lo que sigue, presentamos un estudio numérico de la dinámica del LE para mostrar cómo depende de la intensidad de la perturbación efectiva $\Sigma_{eff} = (J^{dq})^2/(\hbar\omega_1)$ con el objetivo principal de encontrar la aplicabilidad de la FGR.

5.6. Evaluación numérica del Eco de Loschmidt.

La Fig. 5.3 muestra los decaimientos típicos del LE para diferentes intensidades de la perturbación Σ_{eff} . En particular, las Figs. 5.3 (I) y (II) muestran una transición de Gaussiano a exponencial a medida que Σ_{eff} decrece. Una transición similar ha sido reportada para la SP de estados específicos de muchos cuerpos [FI01, SBI12].

Las Figs. 5.3 (III) y (IV) muestran un plateau asintótico finito para $M_{1,1}(t)$ que se establece cuando la perturbación es lo suficientemente pequeña, es decir que $\hbar\omega_1$ es grande. Con el propósito de cuantificar tal observación, graficamos en la Fig. 5.4 las asíntotas del LE $M_{1,1}(t \rightarrow \infty)$ como función de Σ_{eff} . Por debajo de un umbral de perturbación, digamos $\Sigma_{eff} \lesssim 0,05J_0$ en la Fig. 5.4, el LE equilibra ligeramente

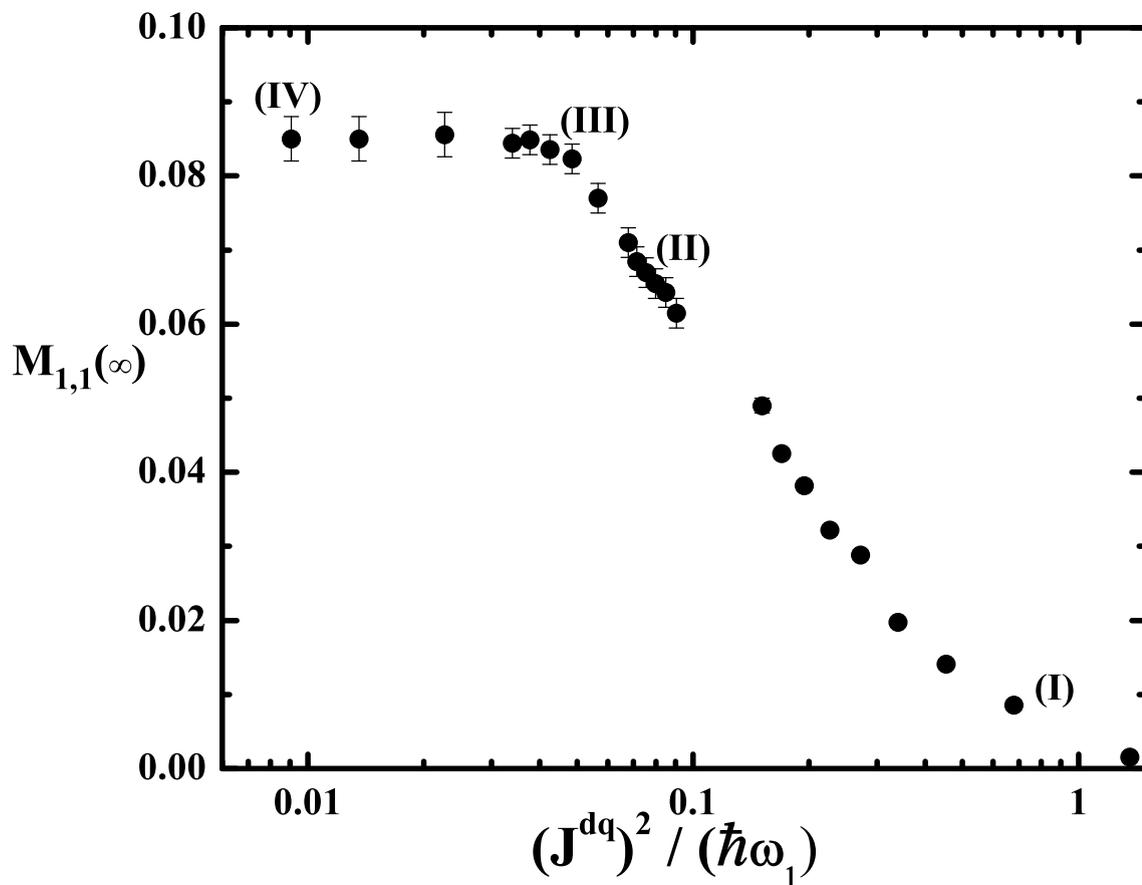


Figura 5.4: Asíntota del LE $M_{1,1}(t \rightarrow \infty)$ en función de $(J^{dq})^2/(\hbar\omega_1)$ (en unidades de J_0). Las etiquetas I, II, III y IV corresponden a los casos representativos mostrados en la Fig. 5.3. El conjunto de datos corresponde a un sistema de $N = 14$ espines.

superior a $1/N$. La asíntota $1/N$ se vuelve más precisa para N por encima de 18 (no se muestran los datos). Es importante notar que esta equilibración va más allá que la que ocurre en la evolución hacia adelante ,

$$2 \langle \Psi_{neq} | \hat{U}_+^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}_+(t) | \Psi_{neq} \rangle \xrightarrow{(t \rightarrow \infty)} 1/N. \quad (5.30)$$

Ciertamente, una reversión perfecta de $\hat{U}_+(t)$ sería capaz de deshacer la equilibración hacia adelante. Sin embargo, el hecho que $M_{1,1}(t \rightarrow \infty)$ se mantenga $\sim 1/N$ significa que la perturbación estabiliza el *desparramo* de la polarización de espín, provocando que tal proceso se convierta en un fenómeno irreversible. Más aún, debemos notar que el estado final conserva la proyección total de espín a pesar de la naturaleza no-conservativa de la perturbación DQ. De hecho, esto evidencia la relevancia de las interacciones efectivas discutidas más arriba, dado que proveen el mecanismo de decaimiento del LE sin comprometer la conservación de la proyección de espín.

Para cuantificar el decaimiento del LE, definimos el tiempo característico τ_ϕ como $M_{1,1}(\tau_\phi) = 2/3$. Graficamos las tasas de decaimiento $1/\tau_\phi$ en la Fig. 5.5 como función de Σ_{eff} para $N = 12, 14, 16$. Para cada tamaño del sistema, identificamos los

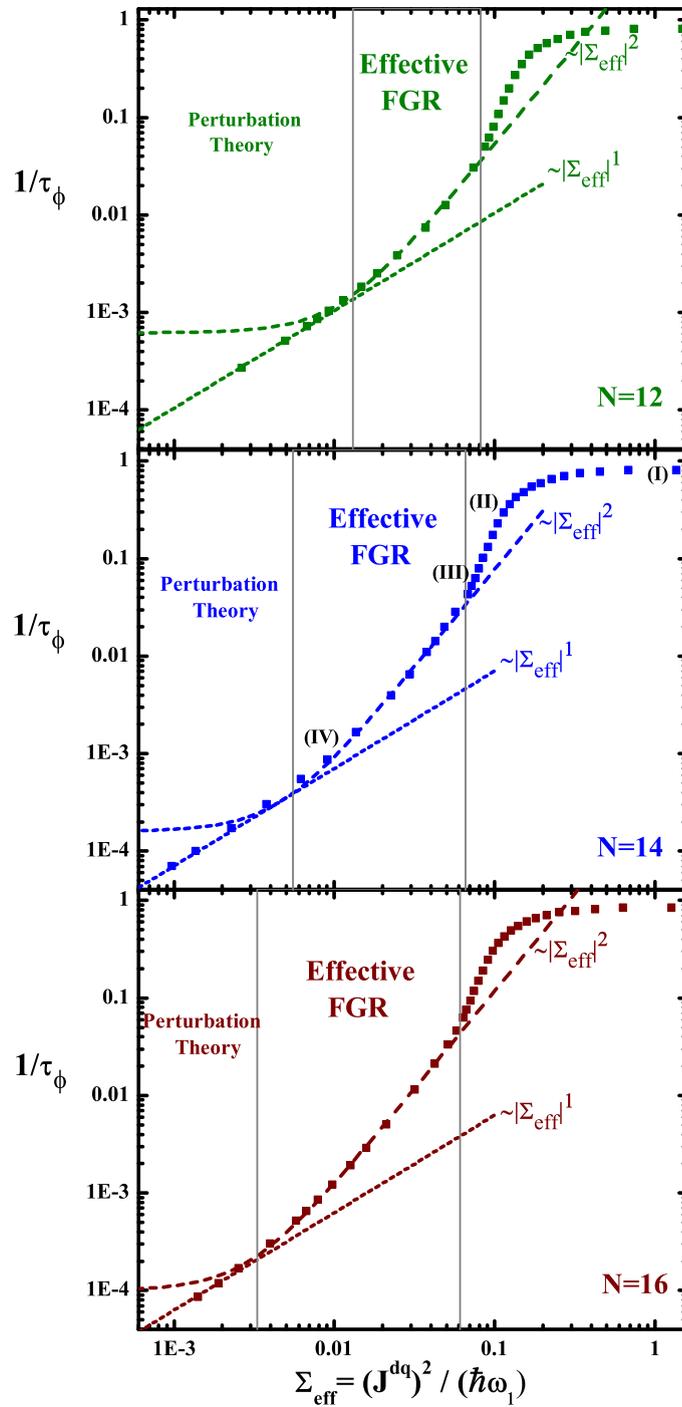


Figura 5.5: Tasas de decaimiento $1/\tau_\phi$ (en escala logarítmica, en unidades de J_0/\hbar) del LE en función de la perturbación efectiva $\Sigma_{\text{eff}} = (J^{\text{dq}})^2 / (\hbar\omega)$ (en unidades de J_0), para un sistema de $N = 12, 14, 16$ espines. Están incluidas las etiquetas I, II, III y IV de las Figs. 5.3 y 5.4 en el caso del sistema de $N = 14$ espines.

regímenes en los que la tasa de decaimiento es proporcional a Σ_{eff} y en los que aumenta con Σ_{eff}^2 . El primer caso puede entenderse como estrictamente perturbativo,

como el decaimiento descrito por la Ec. (5.22). El segundo está asociado con el régimen FGR efectiva, dado por la Ec. (5.29), como $1/\tau_\phi - 1/\tau_{\phi,N}^0 \propto \Sigma_{eff}^2$ y $1/\tau_{\phi,N}^0 \rightarrow 0$ cuando $N \rightarrow \infty$. La observación numérica de que la aparición del régimen FGR se mueve hacia perturbaciones más débiles a medida que N aumenta constituye el resultado principal de este Capítulo.

La comparación entre las Figs. 5.4 y 5.5 para el caso $N = 14$ evidencia que el régimen en el que la FGR efectiva es válida coincide con la equilibración $\sim 1/N$ de la polarización de espín. Este hecho contrasta con el comportamiento no-ergódico esperado en el régimen perturbativo. En términos de escalas de tiempo, dada una perturbación arbitrariamente pequeña que tiene asociada un tiempo característico τ_ϕ dado por la FGR efectiva, si la evolución hacia adelante $\hat{U}_+(t)$ ocurre durante un tiempo $t \gg \tau_\phi$, entonces la equilibración dada por la Ec. (5.30) se vuelve irreversible para cualquier propósito práctico.

5.7. Conclusiones.

Calculamos en una serie de sistemas finitos de espines el LE, definido aquí como la polarización local que se recupera luego de un procedimiento de reversión temporal perturbado, mostrando una gran riqueza de regímenes dinámicos. Para ello evaluamos sistemas dinámicos de espines interactuantes empleando su espacio de Hilbert completo. Con el propósito de analizar la emergencia del TL a medida que N aumenta, adoptamos un modelo de interacciones todos contra todos. La dinámica hacia adelante está generada por un Hamiltoniano Dipolar truncado reversible \hat{H}_0 que provee una descomposición natural del espacio de Hilbert en subespacios de una proyección de espín definida. Como en los experimentos originales, una perturbación no-reversible $\hat{\Sigma}$ acopla subespacios que están separados por una energía controlable.

Analizamos un régimen en el cual la perturbación induce interacciones efectivas de dos y de cuatro cuerpos. Estas interacciones efectivas pueden mezclar estados cuasi-degenerados que no estaban directamente acoplados por el Hamiltoniano Dipolar. Más aún, estas interacciones están caracterizadas por una FGR efectiva, cuyo rango de validez aumenta hacia perturbaciones más débiles a medida que N aumenta. El análisis de este umbral respeta una secuencia específica: primero $N \rightarrow \infty$ y luego $\|\hat{\Sigma}\| \rightarrow 0^+$. Así, en el TL, incluso una perturbación minúscula conducirá al decaimiento del LE, gobernado por una FGR efectiva y a la posterior equilibración de la polarización. La FGR efectiva se acentúa debido al mecanismo de proliferación de interacciones efectivas.

En el modelo estudiado, la propia dinámica hacia adelante puede producir la equilibración asintótica de la polarización en el sistema. Notablemente, si el sistema permanece equilibrado durante un tiempo mayor que el de la FGR efectiva, permanecerá así irreversiblemente. Por lo tanto, pese a que el estado equilibrado contiene correlaciones que codifican el estado inicial del sistema, estas correlaciones se vuelven irrelevantes en presencia de pequeñas perturbaciones. Este hecho repercute directamente sobre la capacidad de revertir el Hamiltoniano, que será completamente infructuosa.

Este trabajo ha sido publicado en un artículo titulado *Proliferation of effec-*

tive interactions: Decoherence-induced equilibration in a closed many-body system [ZBP15]. Además, un estudio detallado del LE local, empleado en este Capítulo, y del LE global, definido como el valor medio del cuadrado del solapamiento entre dos *funciones de onda de muchos cuerpos*, que evolucionan bajo la influencia de Hamiltonianos perturbados (no incluido en la Tesis) ha sido publicado en el artículo *Loschmidt echo in many-spin systems: contrasting time scales of local and global measurements* [ZBLP16].

5.8. Apéndice I: El sistema de tres niveles.

Consideramos el sistema de tres niveles, cuyo Hamiltoniano está dado por:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} E_1 & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & E_2 & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & E_3 \end{bmatrix}. \quad (5.31)$$

La situación física de interés es una en la que $V_{ij} \simeq E_1 \simeq E_2 \ll E_3$, que en el problema de espines representa la diferencia de energías Zeeman entre diferentes subespacios de proyección de espín. Aquí, tal diferencia provee una descomposición natural del espacio de Hilbert en los subespacios que abarcan los estados 1 y 2, llámese A , y el que abarca el estado 3, llámese B . Entonces, definimos los proyectores ortogonales \mathcal{P} y $\mathcal{Q} = (\mathbf{I} - \mathcal{P})$ que proyectan el espacio de Hilbert sobre los subespacios A y B respectivamente.

Consideramos aquí que el subespacio A tiene una energía media $E_0 \simeq \frac{1}{2}(E_1 + E_2)$, y la diferencia $E_3 - E_0$ corresponde a la energía Zeeman $\hbar\omega_1$. Discutimos dos métodos para construir un Hamiltoniano efectivo que provea un panorama general de cómo un subespacio particular resulta afectado por otro subespacio cuya energía es considerablemente diferente, es decir que $\hbar\omega_1 \gg 0$. La primera aproximación consiste en una expansión perturbativa de los propagadores (GFs) en la representación energía. El segundo método consiste en promediar los operadores evolución mediante la teoría de Hamiltonianos promedio, que se realiza explícitamente en el dominio temporal.

5.8.1. Teoría de perturbaciones de orden infinito.

En primer lugar, consideramos la proyección del Hamiltoniano \hat{H} sobre el subespacio A , que describe al subespacio A *aislado*:

$$\hat{H}_A = \mathcal{P}\hat{H}\mathcal{P}, \quad (5.32)$$

cuyo propagador o la función de GF correspondiente es:

$$G_A^{(0)}(\varepsilon) = \begin{bmatrix} \varepsilon - E_1 & -V_{12} \\ -V_{21} & \varepsilon - E_2 \end{bmatrix}^{-1}. \quad (5.33)$$

Análogamente, dado que

$$\hat{H}_B = \mathcal{Q}\hat{H}\mathcal{Q} = (\mathbf{I} - \mathcal{P})\hat{H}(\mathbf{I} - \mathcal{P}) \quad (5.34)$$

es la proyección sobre el subespacio B aislado, la GF asociada es:

$$G_B^{(0)}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - E_3}. \quad (5.35)$$

La interacción que conecta ambos subespacios es:

$$V_{AB} = \mathcal{P}\hat{H}\mathcal{Q} = \mathcal{P}\hat{H}(\mathbf{I} - \mathcal{P}), \quad (5.36)$$

$$V_{BA} = \mathcal{Q}\hat{H}\mathcal{P} = (\mathbf{I} - \mathcal{P})\hat{H}\mathcal{P}. \quad (5.37)$$

La serie perturbativa para G_A es:

$$\begin{aligned} G_A &= G_A^{(0)} + G_A^{(0)}V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} + G_A^{(0)}V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)}V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} + \dots \\ G_A &= G_A^{(0)} \left[\mathbf{I} + V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} + \left(V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} \right)^2 + \left(V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} \right)^3 + \dots \right] \\ G_A &= G_A^{(0)} \left[\mathbf{I} + V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} \left[\mathbf{I} + \left(V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} \right) + \left(V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A^{(0)} \right)^2 + \dots \right] \right] \\ G_A &= G_A^{(0)} \left[\mathbf{I} + V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}G_A \right] \end{aligned} \quad (5.38)$$

que resulta la conocida ecuación de Dyson para G_A . Al introducir la auto-energía

$\Sigma_A = V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}$, la ecuación de Dyson queda

$$G_A = \frac{1}{\left[G_A^{(0)} \right]^{-1} - V_{AB}G_B^{(0)}V_{BA}} = \frac{1}{\left[G_A^{(0)} \right]^{-1} - \Sigma_A} \quad (5.39)$$

$$= \left[\begin{array}{cc} \varepsilon - E_1 - \frac{V_{13}V_{31}}{\varepsilon - E_3} & -V_{12} - \frac{V_{13}V_{32}}{\varepsilon - E_3} \\ -V_{21} - \frac{V_{23}V_{31}}{\varepsilon - E_3} & \varepsilon - E_2 - \frac{V_{23}V_{32}}{\varepsilon - E_3} \end{array} \right]^{-1} \quad (5.40)$$

$$\begin{aligned} &= \left[\left(\begin{array}{cc} \varepsilon - E_1 & -V_{12} \\ -V_{21} & \varepsilon - E_2 \end{array} \right) - \left(\begin{array}{cc} \Sigma_{22}(\varepsilon) & \Sigma_{23}(\varepsilon) \\ \Sigma_{32}(\varepsilon) & \Sigma_{33}(\varepsilon) \end{array} \right) \right]^{-1} \\ &= [\varepsilon I - \tilde{H}_A(\varepsilon)]^{-1}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Notemos que la matriz auto-energía $\Sigma_A(\varepsilon)$ representa una interacción efectiva entre los estados del subespacio A mediada por un estado (virtual) perteneciente al

subespacio B . De forma análoga, podemos escribir la serie perturbativa para G_B :

$$\begin{aligned}
G_B &= G_B^{(0)} + G_B^{(0)} \left[V_{BA} G_A^{(0)} V_{AB} G_B^{(0)} \right] + G_B^{(0)} \left[V_{BA} G_A^{(0)} V_{AB} G_B^{(0)} \right]^2 + \dots \\
G_B &= G_B^{(0)} \left[\mathbf{I} + V_{BA} G_A^{(0)} V_{AB} G_B \right] \\
G_B &= \frac{1}{\left[G_B^{(0)} \right]^{-1} - V_{BA} G_A^{(0)} V_{AB}} \\
G_B &= \frac{1}{\varepsilon - E_3 - \left(\frac{(\varepsilon - E_1) V_{32} V_{23} + (\varepsilon - E_2) V_{31} V_{13} + V_{31} V_{12} V_{23} + V_{32} V_{21} V_{13}}{(\varepsilon - E_1)(\varepsilon - E_2) - V_{12} V_{21}} \right)} \\
G_B &= \frac{1}{\varepsilon - \underbrace{(E_3 + \Sigma_3(\varepsilon))}_{\tilde{E}_3}} \\
G_B &= \frac{1}{\varepsilon - \tilde{E}_3} \tag{5.42}
\end{aligned}$$

Aún siendo que los argumentos considerados hasta aquí son exactos, para construir explícitamente un Hamiltoniano efectivo independiente de la energía, a partir de dos bloques ortogonales correspondientes a cada subespacio, es necesario acudir a aproximaciones. De hecho, dentro del subespacio A podemos considerar que $E_1 = E_0 + \delta E$, $E_2 = E_0 - \delta E$ y $\varepsilon \simeq \frac{1}{2}(E_1 + E_2) = E_0$, y por lo tanto $\Sigma_A(\varepsilon) \simeq \Sigma_A(E_0)$. Dentro del subespacio B , la aproximación consiste en evaluar $\Sigma_3(E_3)$ y mantener los órdenes dominantes. Luego, una buena aproximación para la dinámica está dada por el Hamiltoniano efectivo:

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} \tilde{E}_1 & \tilde{V}_{12} & 0 \\ \tilde{V}_{21} & \tilde{E}_2 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{E}_3 \end{bmatrix}, \tag{5.43}$$

donde

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_1 &= E_1 - \frac{V_{13} V_{31}}{(E_3 - E_0)}, \\
\tilde{E}_2 &= E_2 - \frac{V_{23} V_{32}}{(E_3 - E_0)}, \\
\tilde{V}_{12} &= V_{12} - \frac{V_{13} V_{32}}{(E_3 - E_0)}, \\
\tilde{E}_3 &= E_3 + \frac{V_{32} V_{23}}{(E_3 - E_0)} + \frac{V_{31} V_{13}}{(E_3 - E_0)}.
\end{aligned}$$

5.8.2. Teoría de Hamiltonianos Promedio.

La idea aquí es tratar explícitamente con la dependencia temporal, utilizando la representación de interacción, para luego separar la dinámica “Zeeman” rápida,

cuyo período es $t_c = 2\pi/\omega_1$. Como antes, el propósito es generar un Hamiltoniano promedio [HW68, EBW04] cuya dinámica se aproxime a la exacta para un conjunto discreto de tiempos, tales que $t = nt_c$.

En primer lugar, separamos el Hamiltoniano original $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_B$ de acuerdo a la diferencia de energía ($E_3 - E_0$):

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 &= \hat{H} - \mathcal{Q}(E_3 - E_0) \\ &= \begin{bmatrix} E_1 & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & E_2 & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & E_0 \end{bmatrix},\end{aligned}$$

y

$$\hat{H}_B = \mathcal{Q}(E_3 - E_0) \quad (5.44)$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (E_3 - E_0) \end{bmatrix}. \quad (5.45)$$

Siguiendo el procedimiento estándar de la teoría de Hamiltonianos promedio [EBW04], el operador evolución completo se separa en dos factores,

$$\hat{U}(t) = \hat{U}_B(t)\hat{U}_1(t), \quad (5.46)$$

con

$$\begin{aligned}\hat{U}_B(t) &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t\right] \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \exp[-\frac{i}{\hbar}(E_3 - E_0)t] \end{bmatrix}\end{aligned} \quad (5.47)$$

y

$$U_1(t) = T \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \tilde{H}_1(t_1) dt_1\right]. \quad (5.48)$$

Aquí, T representa el operador ordenamiento temporal y $\tilde{H}_1(t)$ es el Hamiltoniano \hat{H}_1 escrito en representación de interacción dependiente del tiempo respecto a \hat{H}_B ,

$$\tilde{H}_1(t) = \hat{U}_B^\dagger(t)\hat{H}_1\hat{U}_B(t). \quad (5.49)$$

Como hemos mencionado, la receta general implica una observación estroboscópica, que resulta $\hat{U}(nt_c) = \hat{U}_1(t_c)^n$. El siguiente paso consiste en el cálculo explícito de la aproximación del Hamiltoniano promedio de la Ec. (5.48), para obtener:

$$\hat{U}_1(t_c) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \bar{H}_1 t_c \right] \quad (5.50)$$

$$= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\bar{H}_1^{(0)} + \bar{H}_1^{(1)} + \bar{H}_1^{(2)} + \dots \right) t_c \right]. \quad (5.51)$$

El orden cero es:

$$\begin{aligned} \bar{H}_1^{(0)} &= \frac{1}{t_c} \int_0^{t_c} U_B^\dagger(t_1)^{-1} \hat{H}_1 U_B(t_1) dt_1. \\ &= \begin{bmatrix} E_1 & V_{12} & 0 \\ V_{21} & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (5.52)$$

El primer orden es:

$$\begin{aligned} \bar{H}_1^{(1)} &= \frac{-i}{2t_c} \int_0^{t_c} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \left[U_B^\dagger(t_2)^{-1} \hat{H}_1 U_B(t_2), U_B^\dagger(t_1)^{-1} \hat{H}_1 U_B(t_1) \right] \\ &= \begin{bmatrix} -\frac{V_{13}V_{31}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{V_{13}V_{32}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{(E_1 - E_0)V_{13} + V_{12}V_{23}}{(E_3 - E_0)} \\ -\frac{V_{23}V_{31}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{V_{23}V_{32}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{(E_2 - E_0)V_{23} + V_{21}V_{13}}{(E_3 - E_0)} \\ -\frac{(E_1 - E_0)V_{31} + V_{32}V_{21}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{(E_2 - E_0)V_{32} + V_{31}V_{12}}{(E_3 - E_0)} & \frac{V_{31}V_{13}}{(E_3 - E_0)} + \frac{V_{32}V_{23}}{(E_3 - E_0)} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (5.53)$$

El Hamiltoniano previo puede simplificarse si aproximamos $(E_1 - E_0) \simeq (E_2 - E_0) \simeq 0$. Luego, el Hamiltoniano promedio a primer orden \bar{H}_1 está dado por:

$$\bar{H}_1^{(0)} + \bar{H}_1^{(1)} = \begin{bmatrix} E_1 - \frac{V_{13}V_{31}}{(E_3 - E_0)} & V_{12} - \frac{V_{13}V_{32}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{V_{12}V_{23}}{(E_3 - E_0)} \\ V_{21} - \frac{V_{23}V_{31}}{(E_3 - E_0)} & E_2 - \frac{V_{23}V_{32}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{V_{21}V_{13}}{(E_3 - E_0)} \\ -\frac{V_{32}V_{21}}{(E_3 - E_0)} & -\frac{V_{31}V_{12}}{(E_3 - E_0)} & E_0 + \frac{V_{31}V_{13}}{(E_3 - E_0)} + \frac{V_{32}V_{23}}{(E_3 - E_0)} \end{bmatrix} \quad (5.54)$$

Este Hamiltoniano representa un sistema de tres niveles, cuyas energías son *casi* degeneradas ($\sim E_0$). Una inspección detallada revela que el subespacio A está acoplado al subespacio B mediante acoplos que son de un orden de magnitud más pequeños que los acoplamientos dentro del subespacio A (que son de orden $\sim E_0$),

$$E_3 \gg E_0, V_{ij} \Rightarrow \frac{V_{12}V_{23}}{(E_3 - E_0)} \sim \frac{V_{ij}^2}{E_3} \ll V_{ij}.$$

Esto implica que los subespacios A y B de hecho están débilmente acoplados. Además es importante notar que, a primer orden, el Hamiltoniano promedio \bar{H}_1 proyectado sobre el subespacio A conduce al mismo Hamiltoniano efectivo de la Ec. 5.43,

$$\mathcal{P} \left(\bar{H}_1^{(0)} + \bar{H}_1^{(1)} \right) \mathcal{P} = \mathcal{P} \tilde{H} \mathcal{P},$$

que incluye la interacción efectiva dentro del subespacio A mediada por el subespacio B . Sin embargo, uno naturalmente podría preguntarse acerca de los elementos de matriz que acoplan ambos subespacios, A and B , en la Ec. 5.54. Si se asume que el subespacio A no posee dinámica, es decir que $V_{12} = V_{21} = 0$, entonces tal acoplamiento decae y por lo tanto ambas estrategias conducen al mismo Hamiltoniano efectivo,

$$\bar{H}_1^{(0)} + \bar{H}_1^{(1)} = \tilde{H}.$$

Capítulo 6

Cuantificación de la decoherencia en anillos de espines

6.0.3. Introducción

Si uno pensara que la decoherencia es solo una consecuencia directa de la interacción con un ambiente, entonces se esperaría que cuando este acoplamiento sea nulo la tasa de decaimiento se anule irremediamente. Sin embargo, en los resultados numéricos reportados en la Ref. [ZDLP12], se usa el Eco de Loschmidt (LE) para evaluar la decoherencia en la dinámica de espines ubicados en un anillo cuando la interacción con un segundo anillo que actúa de ambiente, se hace decrecer hasta anularse. La tasa de decoherencia resultante es proporcional al cuadrado de este acoplamiento tal como predice la Regla de Oro de Fermi (FGR). Sin embargo, se observó que la decoherencia a perturbaciones intermedias extrapola a un valor no-nulo que excede las tasas que resultan de tratar el ambiente perturbativamente. Esta observación sugiere que podríamos estar en presencia de un posible régimen independiente de la perturbación (a priori asintótico) que se manifestaría en el límite termodinámico en consonancia con la *hipótesis central de irreversibilidad*. Según esta hipótesis sugerida por los experimentos de NMR, la dinámica propia de un sistema de espines podría generar suficiente complejidad interna como para amplificar el efecto de cualquier perturbación externa (aún cuando esta sea infinitesimal), definiendo así el ritmo de decoherencia.

En este capítulo analizamos cómo se comporta la tasa de decoherencia en un anillo de espines como función del tamaño del sistema, con la expectativa de explorar si ésta es una configuración factible para aplicar técnicas de análisis basados en extrapolación de resultados válidos para tamaño finito (*finite size scaling*). Con este objetivo, analizamos numéricamente el LE en un modelo de espines, que consta de dos anillos acoplados. Cada anillo consiste en N espines $1/2$ acoplados vía una interacción XY . Uno de ellos representa el sistema \mathcal{S} sobre el cual se tiene control, que está acoplado a un segundo anillo no-controlado, que actúa como ambiente \mathcal{E} . La dinámica interna simple de los anillos aislados permite la comparación con modelos de decoherencia basados en sistemas de un cuerpo. En las Refs. [ZDLP12, Zan15] se analizaron las tasas de decaimiento del LE en este tipo de sistemas. Allí, se estudia la decoherencia que produce sobre un anillo de $N = 5$ espines otro anillo de las mismas

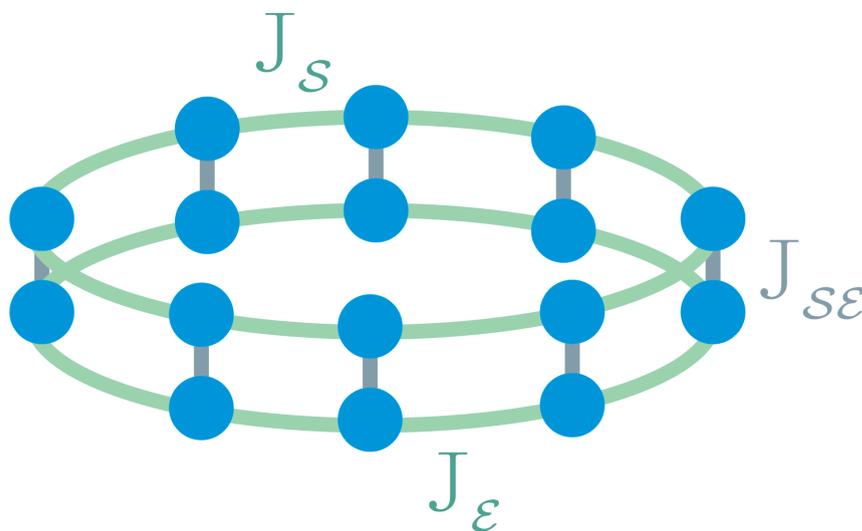


Figura 6.1: El sistema de espines considerado: Dos anillos acoplados mediante una interacción Dipolar. La dinámica de cada anillo es XY, por lo tanto puede mapearse a un sistema de fermiones.

características, que está acoplado al primero vía diferentes tipos de interacción.

La limitación inmediata que surge cuando uno intenta reproducir los resultados experimentales descritos en la Introducción (Fig. 1.2), es que cualquier evaluación numérica del LE involucra un sistema *finito* de espines. En el mismo espíritu que el Capítulo 5, analizaremos aquí si las causas que producen el decaimiento del LE pueden emerger eventualmente al aumentar progresivamente el tamaño del sistema. Es importante mencionar que en los modelos allí analizados, el propio sistema hace las veces del ambiente. En este Capítulo removemos esa restricción ya que existe un ambiente externo dado por el segundo anillo. Consideramos aquí sistemas de $2N = 10, 12, 14, 16, 18$ y 20 espines interactuantes para el modelo de los anillos mencionado. Al igual que en el Capítulo anterior, el estado inicial está dado por una excitación local en un único espín, y la detección también se realiza localmente [PLU95, ZDLP12, ZDI⁺13].

Observamos los diferentes regímenes del LE. A tiempos cortos el decaimiento cuadrático y posteriormente se convierte en exponencial para luego estar descrito por una ley de potencias. La idea central de este Capítulo es analizar el decaimiento tipo FGR del LE a medida que aumenta el tamaño del sistema.

6.0.4. La escalera de espines

El modelo que representa el sistema de espines considerado en este Capítulo, se muestra en la Fig. 6.1. El sistema \mathcal{S} es un anillo de N espines $1/2$, que interactúa con una segunda cadena de N espines $1/2$, que representa al ambiente \mathcal{E} .

El Hamiltoniano de espín total está dado por la Ec. (3.9). De la misma manera, el primer y segundo término representan los Hamiltonianos de \mathcal{S} y de \mathcal{E} respectivamente, mientras que el tercero representa la interacción entre ellos y omitiremos los productos tensoriales con las identidades para simplificar la notación. Tanto \mathcal{S}

como \mathcal{E} están representados por un Hamiltoniano “planar” o XY [MBSH⁺97], que describe las interacciones *flip-flop* homogéneas entre espines adyacentes. Para este modelo, Fig. 6.1, se tiene:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\mathcal{S}} &= \sum_{n=1}^{N-1} J_{\mathcal{S}}(\hat{S}_{\mathcal{S},n+1}^x \hat{S}_{\mathcal{S},n}^x + \hat{S}_{\mathcal{S},n+1}^y \hat{S}_{\mathcal{S},n}^y) + J_{\mathcal{S}}(\hat{S}_{\mathcal{S},1}^x \hat{S}_{\mathcal{S},N}^x + \hat{S}_{\mathcal{S},1}^y \hat{S}_{\mathcal{S},N}^y) \\ &= \sum_{n=1}^{N-1} \frac{J_{\mathcal{S}}}{2}(\hat{S}_{\mathcal{S},n+1}^+ \hat{S}_{\mathcal{S},n}^- + \hat{S}_{\mathcal{S},n+1}^- \hat{S}_{\mathcal{S},n}^+) + \frac{J_{\mathcal{S}}}{2}(\hat{S}_{\mathcal{S},1}^+ \hat{S}_{\mathcal{S},N}^- + \hat{S}_{\mathcal{S},1}^- \hat{S}_{\mathcal{S},N}^+).\end{aligned}\quad (6.1)$$

$$\hat{H}_{\mathcal{E}} = \sum_{n=1}^{N-1} J_{\mathcal{E}}(\hat{S}_{\mathcal{E},n+1}^x \hat{S}_{\mathcal{E},n}^x + \hat{S}_{\mathcal{E},n+1}^y \hat{S}_{\mathcal{E},n}^y) + J_{\mathcal{E}}(\hat{S}_{\mathcal{E},1}^x \hat{S}_{\mathcal{E},N}^x + \hat{S}_{\mathcal{E},1}^y \hat{S}_{\mathcal{E},N}^y) \quad (6.2)$$

$$= \sum_{n=1}^{N-1} \frac{J_{\mathcal{E}}}{2}(\hat{S}_{\mathcal{E},n+1}^+ \hat{S}_{\mathcal{E},n}^- + \hat{S}_{\mathcal{E},n+1}^- \hat{S}_{\mathcal{E},n}^+) + \frac{J_{\mathcal{E}}}{2}(\hat{S}_{\mathcal{E},1}^+ \hat{S}_{\mathcal{E},N}^- + \hat{S}_{\mathcal{E},1}^- \hat{S}_{\mathcal{E},N}^+).\quad (6.3)$$

Aquí $\hat{S}_{\mathcal{S},n}^x$ y $\hat{S}_{\mathcal{E},n}^y$ son las componentes x e y del operador de espín en el sitio n en \mathcal{S} y \mathcal{E} respectivamente, mientras que $\hat{S}_{\mathcal{S},n}^+$ y $\hat{S}_{\mathcal{E},n}^-$ son los operadores de subida y bajada. Como ya hemos mencionado en los Capítulos previos, cadenas lineales representadas por este tipo de Hamiltoniano pueden ser transformados en sistemas fermiónicos no-interactuantes. Al considerar modelos de anillos, aparece el acoplamiento XY extra entre el espín 1 y el N , como consecuencia de la imposición de condiciones de contorno periódicas. Sin embargo, éstas no afectan el mapeo hacia una dinámica de un cuerpo, ver Ref. [LSM61b, DPL04].

El acoplamiento intercadena está dado por:

$$\begin{aligned}\hat{V}_{\mathcal{S}\mathcal{E}} &= \sum_{n=1}^{N/2} J_{\mathcal{S}\mathcal{E}}[2\alpha \hat{S}_{\mathcal{S},n}^z \hat{S}_{\mathcal{E},n}^z - (\hat{S}_{\mathcal{S},n}^x \hat{S}_{\mathcal{E},n}^x + \hat{S}_{\mathcal{S},n}^y \hat{S}_{\mathcal{E},n}^y)] \\ &= \sum_{n=1}^{N/2} J_{\mathcal{S}\mathcal{E}}[2\alpha \hat{S}_{\mathcal{S},n}^z \hat{S}_{\mathcal{E},n}^z - \frac{1}{2}(\hat{S}_{\mathcal{S},n}^+ \hat{S}_{\mathcal{E},n}^- + \hat{S}_{\mathcal{S},n}^- \hat{S}_{\mathcal{E},n}^+)],\end{aligned}\quad (6.4)$$

donde el primer término es una interacción de tipo Ising. El parámetro α determina la anisotropía del acoplamiento y valores específicos pueden representar diferentes escenarios típicos en NMR. En particular, $\alpha = 0$ corresponde a un Hamiltoniano de tipo XY , $\alpha = -1/2$ uno de tipo Heisenberg y $\alpha = 1$ corresponde a un Hamiltoniano Dipolar truncado. Notemos que para cualquier α finito, la interacción $\mathcal{S}\mathcal{E}$ siempre tiene una componente XY . Esto permite un intercambio de polarización que, en representación fermiónica, puede interpretarse como el tuneo de una partícula.

Las constantes reales $J_{\mathcal{S}}$, $J_{\mathcal{E}}$ y $J_{\mathcal{S}\mathcal{E}}$ determinan las escalas de tiempo relevantes de la dinámica. Las primeras dos representan el acoplamiento XY homogéneo en \mathcal{S} y \mathcal{E} respectivamente, mientras que $J_{\mathcal{S}\mathcal{E}}$ representa el acoplamiento intercadena. Para asegurar la degradación suave de la dinámica coherente de \mathcal{S} , fijamos $J_{\mathcal{S}\mathcal{E}}$ en el límite de acoplamiento débil, es decir $J_{\mathcal{S}\mathcal{E}} \ll J_{\mathcal{S}}, J_{\mathcal{E}}$.

6.1. Evaluaciones previas del eco de Loschmidt

Los regímenes de decaimiento del LE ya han sido estudiados en la literatura [JP01, JSB01, CLM⁺02] y observados para un modelo *todos contra todos* en el Capítulo 5 [ZBP15]. Para tiempos muy cortos, el decaimiento resulta cuadrático (ver Ec. (5.22) del Capítulo 5):

$$M_{1,1}(t) = 2 \langle \Psi_{neq} | \hat{U}_{LE}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}_{LE}(t) | \Psi_{neq} \rangle \quad (6.5)$$

$$= 1 - \langle \Psi_{neq} | \left[\hat{\Sigma}^2 - 2\hat{\Sigma}\hat{S}_1^z\hat{\Sigma} \right] | \Psi_{neq} \rangle \left(\frac{t}{\hbar} \right)^2 + \mathcal{O} \left(\frac{t}{\hbar} \right)^3, \quad (6.6)$$

donde $|\Psi_{neq}\rangle$ está dado por la Ec. (5.13) del Capítulo 5. El prefactor

$$\sigma^2 = \langle \Psi_{neq} | \left[\hat{\Sigma}^2 - 2\hat{\Sigma}\hat{S}_1^z\hat{\Sigma} \right] | \Psi_{neq} \rangle$$

es el segundo momento local de $\hat{\Sigma}$. En la mayoría de los casos, luego del decaimiento a tiempos cortos le sigue un régimen exponencial, tipo FGR. Una estimación de la tasa de decaimiento de $M_{1,1}$ en el régimen FGR está dado por:

$$\frac{1}{\tau_\phi} = \frac{2\Gamma_\phi}{\hbar} \simeq \sum_\delta \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\mathcal{SE}}^\delta|^2 N_{1\delta}, \quad (6.7)$$

donde $\sigma^2 = |V_{\mathcal{SE}}^\delta|^2$ es el segundo momento local asociado al proceso δ , que en este contexto puede ser Ising o XY y $N_{1\delta}$ representa una densidad de estados acoplados directamente por la interacción \mathcal{SE} . En la Fig. 6.2 se reproducen de [ZDLP12] las curvas de decaimiento del LE para diferentes valores de $J_{\mathcal{SE}}$. Allí, además del régimen exponencial, podemos identificar un decaimiento cuadrático inicial y una saturación para tiempos largos. Estos resultados corresponden a un sistema de $2N = 10$ espines.

En esta figura puede observarse que la saturación del LE a tiempos suficientemente largos, resulta en una meseta en un valor no-nulo, de alrededor de $1/10$. Esto se debe a que la polarización se comporta ergódicamente respecto de la reversión y por ello se distribuye uniformemente en todo el sistema. Luego, para tiempos largos, la polarización de cada espín resulta $1/(2N)$, para un número $2N$ de espines (recordemos que $2N$ es el número total de espines, siendo que consideramos N espines en cada anillo).

Si uno quiere cuantificar sistemáticamente el régimen exponencial, pueden calcularse las tasas de decaimiento del LE. Éstas han sido estudiadas en la Ref. [ZDLP12], resultando la Fig. 6.3. Allí se observa el comportamiento de las tasas de decaimiento $1/\tau_\phi$ como función de $J_{\mathcal{SE}}^2$. Nótese que la elección de $J_{\mathcal{SE}}^2$ se debe a que ésta es la cantidad apropiada para verificar la validez de la FGR, ya que, según la Ec. (6.7), $J_{\mathcal{SE}}^2$ es la escala típica para el segundo momento de la interacción \mathcal{SE} . En la Fig. 6.3 se muestran las tasas de decaimiento del LE para valores relevantes de anisotropías: $\alpha = 0$ (Hamiltoniano XY), $\alpha = -1/2$ (Hamiltoniano Heisenberg) y $\alpha = 1$ (Hamiltoniano Dipolar truncado).

Se observa que a partir de cierto umbral de perturbación, la tasa de decaimiento se comporta linealmente con el segundo momento de la perturbación. Lo notable es que este ajuste lineal no interpola a cero sino a un valor finito $1/\tau_0$, que parece estar

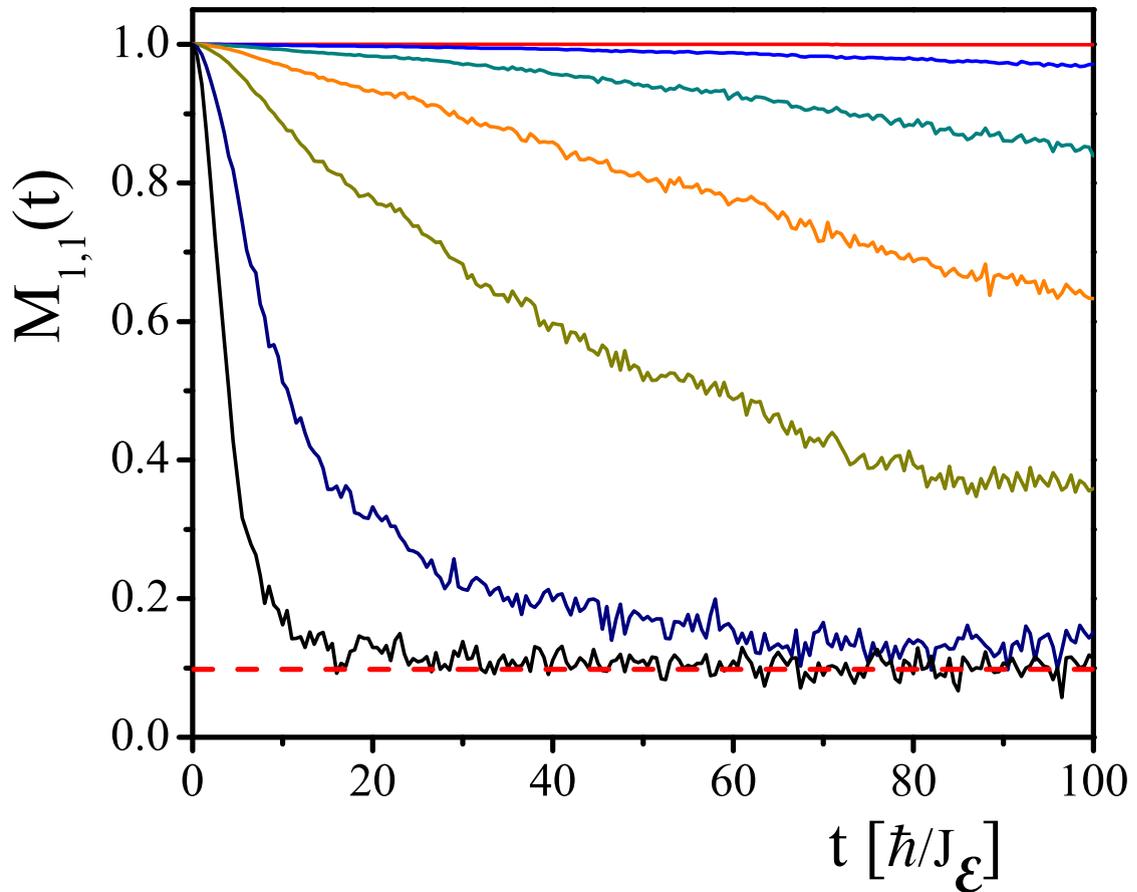


Figura 6.2: $M_{11}(t)$ en función del tiempo de evolución para dos anillos de 5 espines acoplados. Adaptado de [ZDLP12].

relacionado con la naturaleza de la interacción intercadena, ya que aumenta con la anisotropía α . Cada punto ha sido obtenido aproximando una función exponencial a cada curva $M_{1,1}(t)$, sin considerar el comportamiento cuadrático de tiempos cortos y la saturación a tiempos largos. Los resultados discutidos hasta aquí han sido estudiados en la Ref. [ZDLP12]. Inspirados en este trabajo, en lo que sigue estudiamos las tasas de decaimiento del LE para un valor fijo de anisotropía y aumentando progresivamente el tamaño del sistema.

6.2. Aumentando el tamaño del sistema

Consideramos el sistema de la Fig. 6.1 con una interacción intercadena dada por la Ec. (6.4). Elegimos un valor fijo para la anisotropía $\alpha = 1$, es decir una interacción \mathcal{SE} Dipolar.

En la Fig. 6.4 se muestra $M_{11}(t)$ para un valor dado de la perturbación, $J_{\mathcal{SE}} = 0,03J_{\mathcal{S}}$, a medida que aumenta progresivamente el tamaño N_T del sistema.

Si bien en la Fig. 6.4 no se observa una sistemática clara, sí puede notarse que $M_{11}(t)$ posee un comportamiento diferente a tiempos largos según que el número N

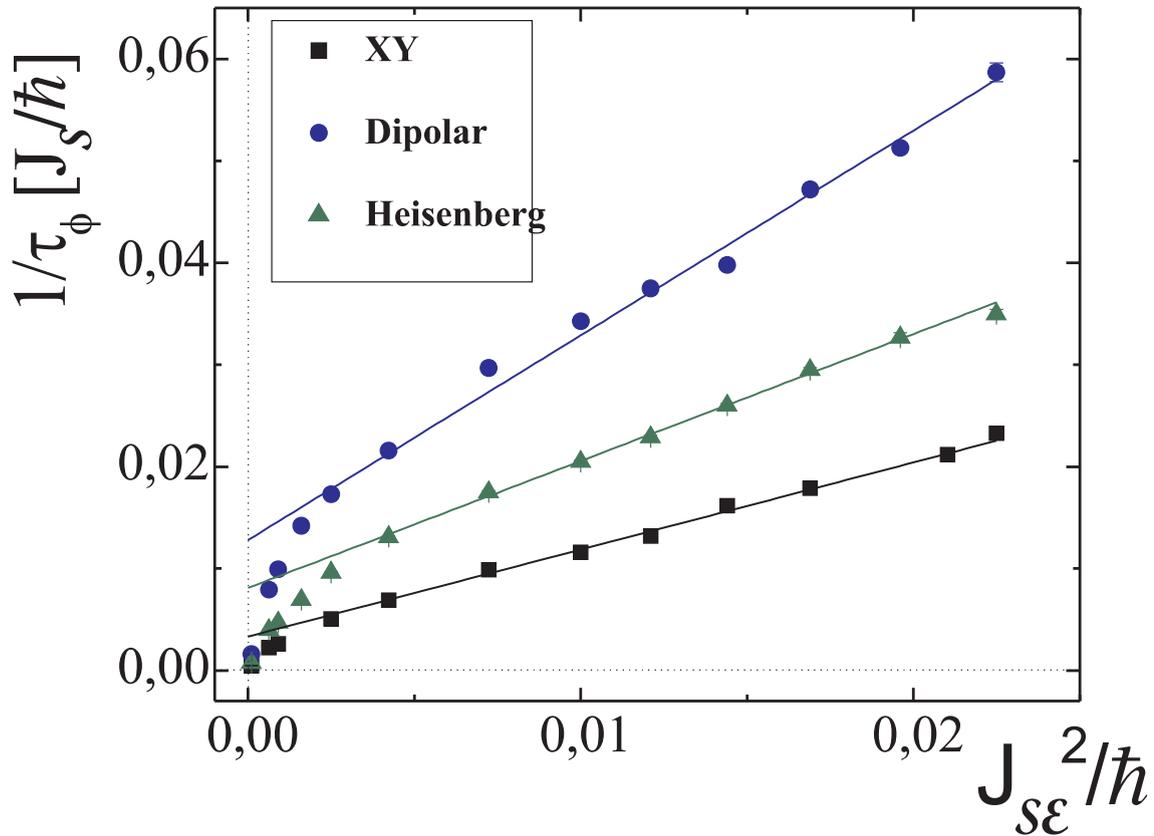


Figura 6.3: Tasas de decaimiento del LE para acoplos intercadena de tipo XY, Ising y Dipolar. Adaptado de [ZDLP12]

de espines en cada cadena sea par o impar. Si bien estas diferencias son notables fuera del régimen FGR, en donde centramos nuestra atención, han representado una dificultad para interpretar los resultados. Diferentes comportamientos asociados a la paridad de anillos de espines ya han sido estudiados en la Ref. [DPL04]. Allí, se muestra que la evolución de paquetes de onda definidos en un anillo con un número N par involucra una mayor diversidad de frecuencias que en el caso de un anillo con N impar. Por este motivo, la conmensuración de frecuencias es más probable en el caso impar. Por el contrario, en el caso par, las recurrencias del tipo de Poincaré estarán menos definidas.

En la Fig. 6.5 hemos separado ambos casos. Allí, observamos que para el caso en que N es impar, luego del decaimiento exponencial se presentan oscilaciones, que no desaparecen cuando N aumenta. Atribuimos este efecto a que los ecos mesoscópicos en este sistema permanecen suficientemente bien definidos. Al igual que en la Ref. [DPL04], la ausencia de este comportamiento cuando N es par indica que se produjo una inconmensuración de las distintas frecuencias. Como consecuencia, este sistema (N par) se comporta más ergódicamente, facilitando el acoplamiento con el ambiente que elimina las interferencias.

En la Fig. 6.6 estudiamos las tasas de decaimiento definidas en analogía con el criterio del Capítulo 5, es decir, el tiempo característico τ_ϕ se define con $M_{1,1}(\tau_\phi) =$

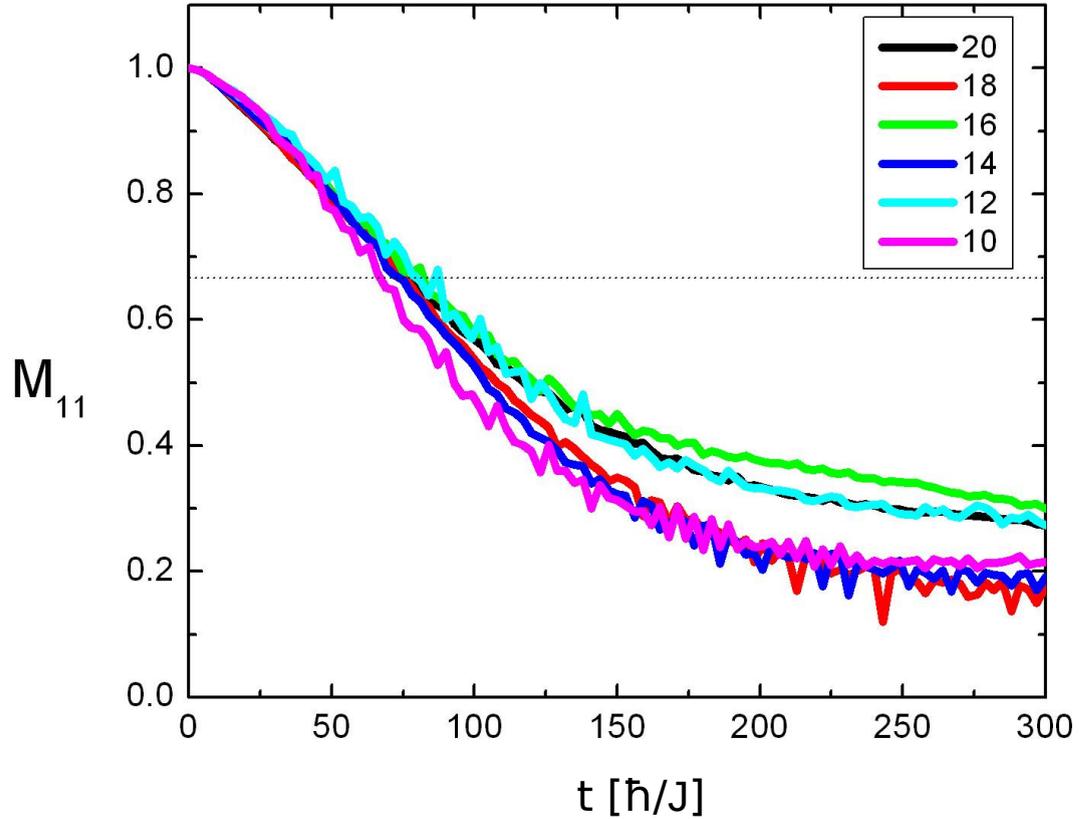


Figura 6.4: M_{11} como función del tiempo total (en unidades de \hbar/J) para diferentes valores de $2N$, desde 10 hasta 20. El valor del acoplamiento inter-cadena es $J_{SE} = 0,03J$.

2/3. Allí, las tasas $1/\tau_\phi$ se grafican en función de J_{SE}^2 para diferentes valores de $N_T = 2N$, que van desde 10 hasta 20 espines. Similares resultados a los expuestos se obtienen con una definición alternativa de τ_ϕ , y que está dada por el ajuste exponencial de las curvas en función del tiempo.

Podemos notar una recta bien definida en el régimen FGR, que extrapola a un valor finito. En particular, hemos ajustado una recta para el caso $N_T = 20$ y resulta:

$$\frac{1}{\tau_\phi} \simeq 4 \frac{J_{SE}^2}{\hbar J_S} + \frac{1}{\tau_0}$$

con

$$\frac{1}{\tau_0} = 0,038 \frac{J_S}{\hbar}.$$

Es importante notar la existencia de este *offset* o valor asintótico en virtud de su similitud con el comportamiento observado en el gráfico 1.2. Tal como se discute en la Introducción, en los sistemas experimentales se explica la presencia de un

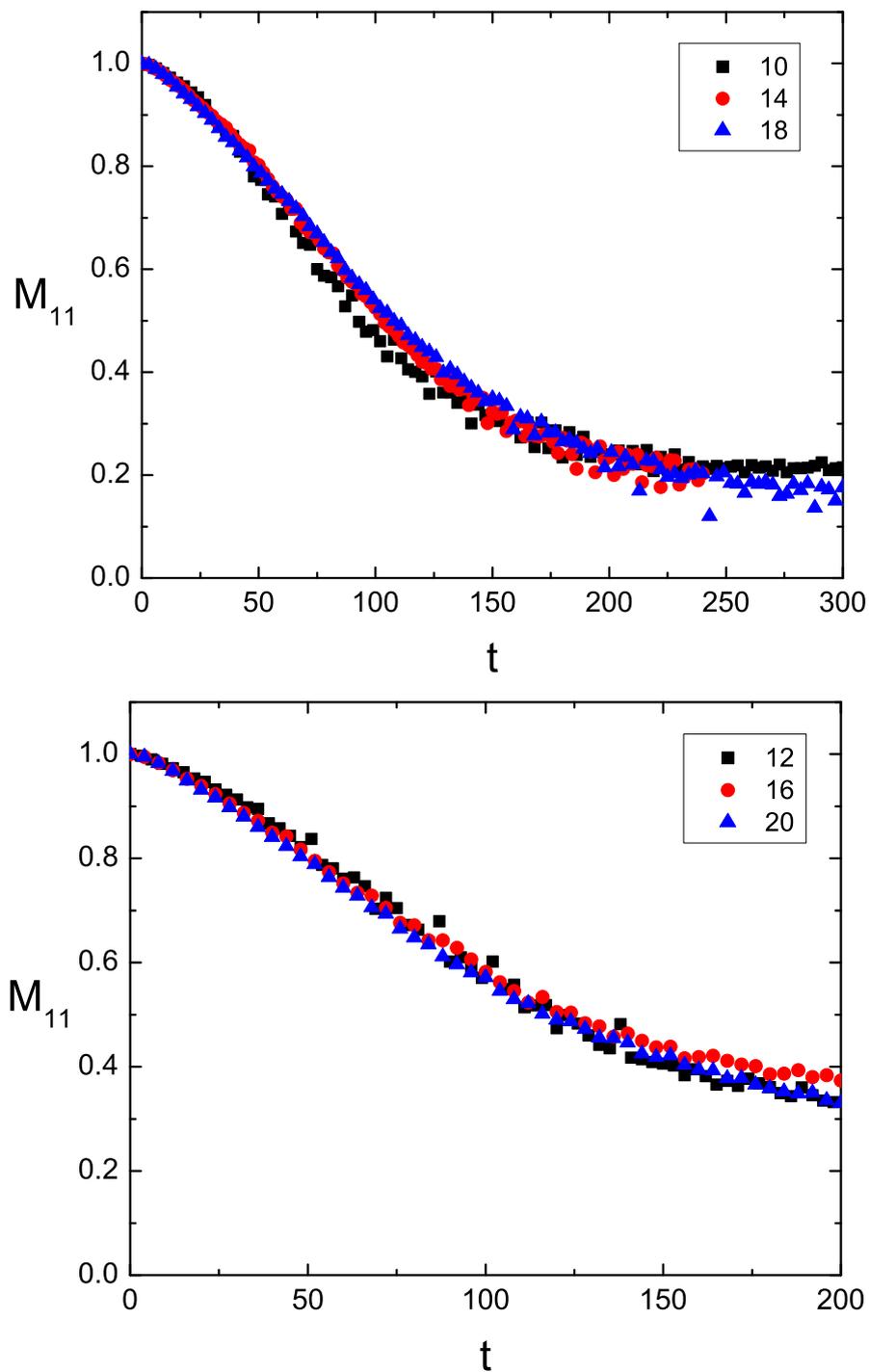


Figura 6.5: M_{11} como función del tiempo total (en unidades de \hbar/J) para diferentes valores de $2N$, distinguiendo los sistemas en los que cada anillo posee un número par o impar de espines. El valor del acoplamiento inter-cadena es $J_{SE} = 0,03J$.

offset argumentando un mecanismo de decaimiento intrínseco, justificado por una inherente caoticidad o complejidad del sistema. A diferencia de la observación expe-

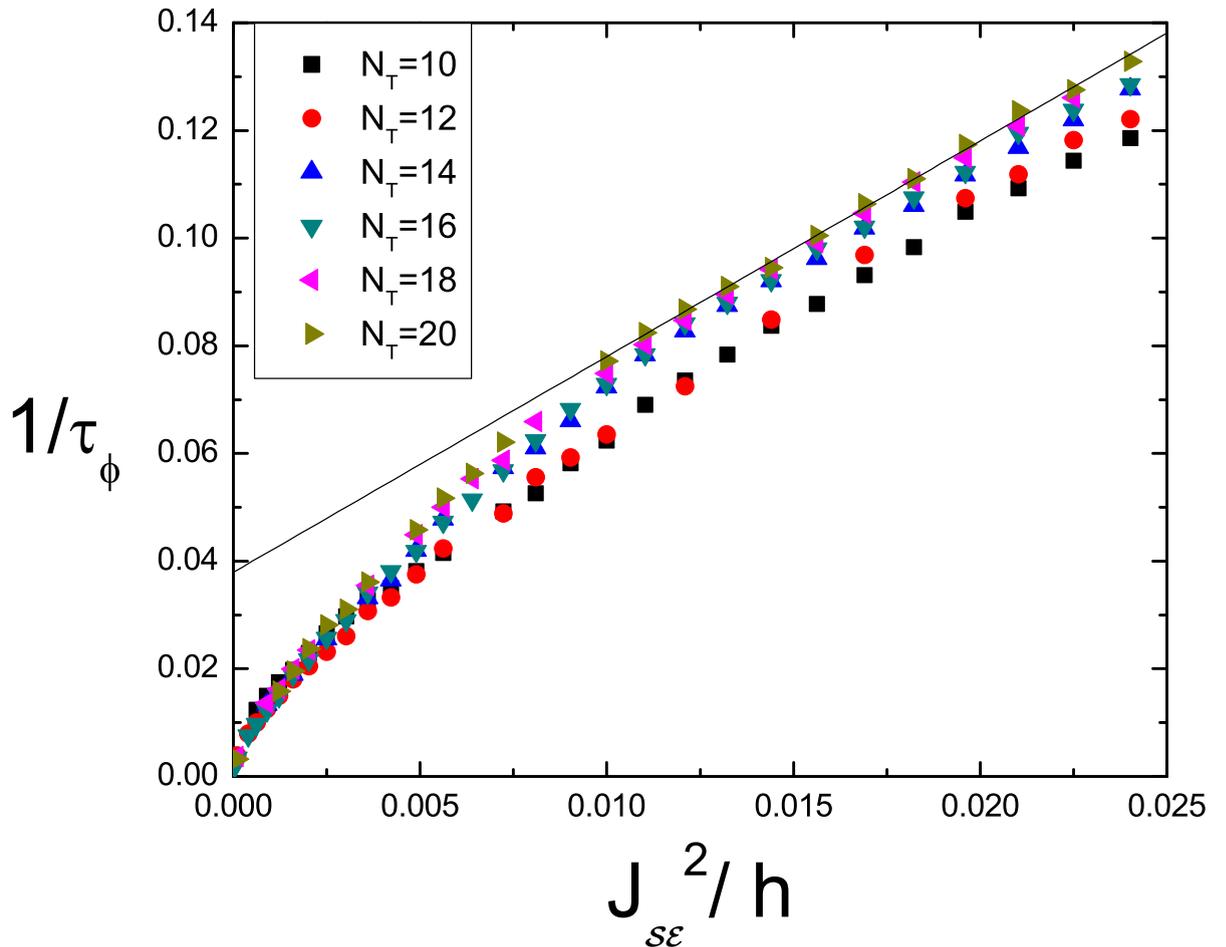


Figura 6.6: Tasa de decaimiento $1/\tau_\phi$ como función de J_{SE}^2 para diferentes valores de $2N$, desde 10 hasta 20.

rimental, en el caso que aquí estudiamos, $1/\tau_0$ es muy pequeño en comparación con el segundo momento del Hamiltoniano revertido. Además, dicha dinámica revertida corresponde aquí a una interacción muy simple: el modelo XY unidimensional. De hecho, éste no es intrínsecamente ergódico, sino que incluso es integrable en el límite de acoplamiento nulo (mapea a fermiones libres). Sólo al introducir el acoplamiento dipolar inter-cadena se rompe la integrabilidad.

Las curvas se aproximan a cero para perturbaciones muy pequeñas debido a la naturaleza finita de los sistemas estudiados. Notemos que para $N_T \gtrsim 14$ los decaimientos de $M_{1,1}(t)$ comienzan a coincidir. Como resultado positivo respecto de nuestra búsqueda, podríamos pensar que, en el TL, se tiende a un $1/\tau_0$ pequeño, pero “intrínseco” al problema. En el Capítulo 5, se observa que a medida que aumenta N_T , el umbral inferior del régimen FGR (valor mínimo de perturbación) se hace más pequeño, aumentando así el dominio de validez de la FGR. En este modelo, no se

observa tal comportamiento al aumentar el tamaño del sistema.

6.2.1. Conclusiones

En este Capítulo hemos estudiado un modelo de espines, que consiste en dos anillos acoplados mediante una interacción Dipolar. La dinámica interna simple de cada anillo puede mapearse a un problema de un cuerpo. Hemos cuantificado sistemáticamente el decaimiento del eco de Loschmidt para este modelo, definido en el contexto de espines como la polarización local que se recupera luego de una reversión temporal imperfecta. Para analizar la emergencia del límite termodinámico, hemos aumentado progresivamente el tamaño del sistema, de la misma forma que en el Capítulo 5.

El comportamiento a tiempos largos difiere según la paridad de cada anillo. Este fenómeno ya ha sido observado anteriormente [DPL04, Dan06] y su origen radica en la posibilidad de conmensurar frecuencias dependiendo de la paridad.

Hemos observado un régimen Regla de Oro de Fermi bien definido, a partir del cual calculamos las tasas de decaimiento del Eco de Loschmidt. Estas tasas de decaimiento se van irremediamente a cero cuando la perturbación se desvanece. Esto es esperable en sistemas de tamaño finito. Sin embargo, podemos observar que la curva que caracteriza el régimen exponencial no extrapola a cero, sino a un valor no-nulo. Esta observación parece consistente con la Hipótesis Central de la Irreversibilidad que hemos discutido previamente: La complejidad propia del sistema amplifica el efecto de cualquier mínima perturbación. No obstante, en el modelo que hemos presentado este valor finito es muy pequeño. Atribuimos esto al hecho de que la dinámica de cada anillo es demasiado simple (integrable en el límite de acoplamiento nulo). Una vía posible para probar esta suposición, radica en el análisis de modelos de anillos cuyas dinámicas internas sean más complejas, por ejemplo, una interacción Dipolar. Esa sería sólo la primer alternativa, pues la geometría unidimensional seguiría siendo una limitación.

Capítulo 7

Una herramienta computacional basada en el paralelismo cuántico

7.1. Introducción

En las discusiones de los Capítulos 5 y 6, quedó claro que, en la búsqueda de propiedades emergentes, resulta de fundamental importancia evaluar la dinámica de sistemas con una cantidad de espines interactuantes tan grande como sea posible. De hecho, estudiar las propiedades del sistema a medida que aumenta su tamaño suele dar lugar a las técnicas denominadas escaleo del tamaño finito (*finite size scaling*). En última instancia, estas técnicas permiten inferir propiedades válidas en el límite termodinámico (TL), $N \rightarrow \infty$ y detectar transiciones de fase. En nuestro caso, el cálculo de la evolución de la función de autocorrelación de espín $M_{1,1}(t)$, que hemos definido en la Ec. (5.6), constituye un desafío computacional para cualquier sistema con $N \gtrsim 10$.

Una alternativa *naive* para evaluar la dinámica del estado mezcla definido en la Ec. (5.1), radica en el almacenamiento “en memoria” y manipulación de la matriz densidad completa (cuyo tamaño escalea como $\sim 2^N \times 2^N$). Esta estrategia tiene fuertes limitaciones, precisamente por la rápida saturación de la memoria disponible. Si uno optara por esta alternativa, difícilmente se podrían alcanzar sistemas de tamaño mayor a $N = 12$. Una segunda opción involucra recurrir a una descomposición en estados puros y evaluar independientemente valores de expectación de los observables deseados. Este procedimiento que consiste en promediar cada una de estas evaluaciones toma la forma de un *promedio sobre ensamble*. En tal caso, se requiere manipular (almacenar) únicamente estados puros, cuyo tamaño escalea como $\sim 2^N$ aunque este número puede reducirse considerablemente seleccionando estados suficientemente representativos [BPP08]. Estos procedimientos son intrínsecamente independientes, y por tanto *paralelizables*.

El método que hemos usado en esta Tesis involucra reemplazar el cálculo anterior usando el *paralelismo cuántico* en un *único estado de superposición aleatoria*. Este método, propuesto en la Ref. [ADLP08], ha permitido acceder a tamaños de *clusters* del orden de 20 espines sin necesidad de excesivos recursos computacionales [Den12, Zan15]. Como hipótesis subyacente para justificar tal estrategia en el cálculo de $M_{1,1}$, la *localidad* tanto de la excitación inicial como del observable considerado

(magnetización local) jugaban un rol crucial. De alguna manera, los observables *no* evaluados toman un rol de “reservorio”, que adopta una gran superposición de configuraciones alternativas y permiten el “autopromedio” de los observables evaluados. En este Capítulo retomaremos la formulación de la autocorrelación de espín y el uso de estados superposición con el propósito de ampliar el rango de aplicación de esta idea. Consideraremos estados cuya magnetización está equidistribuida en todo el sistema, como los que usualmente se encuentran en experimentos de NMR.

7.2. La polarización local y el paralelismo cuántico

Una excitación local en un sistema de N espines $1/2$ interactuantes a temperatura infinita, consiste en un estado mezcla completamente despolarizado con excepción de un espín al cual se ha inyectado polarización localmente. Este estado está descrito por la Ec. (5.1), donde el espín 1 está polarizado mientras los otros no lo están, es decir, $\text{tr}[\hat{S}_i^z \hat{\rho}_1] = \frac{1}{2} \delta_{i,1}$.

Supongamos que tenemos un operador unitario $\hat{U}(t)$ responsable de la evolución del sistema. En un determinado instante de tiempo, se efectúa una medición de la polarización local en el sitio 1:

$$P_{1,1}(t) = 2\text{tr}[\hat{S}_1^z \hat{U}(t) \hat{\rho}_1 \hat{U}^\dagger(t)]. \quad (7.1)$$

Podemos descomponer las matrices densidad anteriores usando una base particular de estados puros. En particular, escribiremos $\hat{\rho}_1$ en el régimen de alta temperatura ($k_B T \gg J$), según la base computacional Ising $\{|i\rangle\}$, también conocida como base S^z -desacoplada. Además definimos el conjunto \mathcal{A} de índices j que etiquetan los estados de la base con el 1^{er} espín polarizado *hacia arriba*, es decir $j \in \mathcal{A} \Leftrightarrow \hat{S}_1^z |j\rangle = +\frac{1}{2} |j\rangle$. Luego, se verifica que

$$\hat{\rho}_1 = \sum_{j \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} |j\rangle \langle j|.$$

Entonces, podemos reescribir la función de autocorrelación dada por la Ec. (7.1),

$$\begin{aligned} P_{1,1}(t) &= 2\text{tr}[\hat{S}_1^z \hat{U}(t) \hat{\rho}_1 \hat{U}^\dagger(t)] \\ &= 2\text{tr}[\hat{U}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}(t) \hat{\rho}_1] \\ &= 2 \sum_i \sum_{j \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \langle i | \hat{U}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}(t) | j \rangle \langle j | i \rangle \\ &= 2 \sum_{i \in \mathcal{A}} \frac{1}{2^{N-1}} \langle i | \hat{U}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}(t) | i \rangle. \end{aligned} \quad (7.2)$$

La expresión 7.2 representa 2^{N-1} cálculos independientes, es decir el promedio sobre ensamble de los estados de la base Zeeman. Aunque estos cálculos son trivialmente paralelizables en procesos independientes, el gran número de estados que

se deben explorar obliga a un cómputo secuencial. El punto crucial aquí es que, dado que \hat{S}_1^z es un operador local (“de un cuerpo”), su evaluación en la Ec. (7.2) puede reemplazarse por el valor de expectación en un estado de superposición puro [ADLP08]. Es decir, el cálculo de promedios sobre conjuntos estadísticamente representativos que introduce la Ec. (7.2) es equivalente a un cálculo con un estado $|\Psi_{neq}\rangle$ que imita al conjunto estadístico y cuya evolución contiene el *paralelismo cuántico*, dado por:

$$P_{1,1}(t) \simeq 2 \langle \Psi_{neq} | \hat{U}^\dagger(t) \hat{S}_1^z \hat{U}(t) | \Psi_{neq} \rangle, \quad (7.3)$$

donde el estado puro $|\Psi_{neq}\rangle$ ha sido definido en a Ec. (5.13) y es el que hemos utilizado en los cálculos del LE en los Capítulos 5 y 6. Esto es conceptualmente diferente e involucra tiempos de cálculo y utilización de memoria muy inferiores. En este punto, es importante enfatizar que la Ec. (7.3) se obtuvo a partir de considerar que tanto la excitación inicial como el observable $P_{1,1}(t)$ son cantidades locales. Es justamente debido al carácter local del observable que el sistema no distingue entre un estado mezcla y el estado puro cuyo entrelazamiento se ha diseñado para representar la mezcla.

7.3. Polarización global y paralelismo cuántico.

Consideremos que la magnetización está equidistribuida en todo el sistema. En este caso, proponemos como estado del sistema:

$$\hat{\rho}_T = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \hat{\rho}_k,$$

con $\hat{\rho}_k$ generalizando la definición de $\hat{\rho}_1$ es decir, $\hat{\rho}_k = (\hat{\mathbf{I}} + 2\hat{S}_k^z)/2^N$. Entonces

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_T &= \frac{1}{2^N} \left(\hat{\mathbf{I}} + \frac{2}{N} \sum_k \hat{S}_k^z \right) \\ &= \frac{1}{2^N} \left(\hat{\mathbf{I}} + \frac{2}{N} \hat{S}_T^z \right) \end{aligned}$$

en donde hemos definido la magnetización total \hat{S}_T^z como la suma de las magnetizaciones de cada espín, es decir $\hat{S}_T^z = \sum_k \hat{S}_k^z$. Luego, se verifica que el valor de expectación de \hat{S}_T^z es:

$$\langle \hat{S}_T^z \rangle = \text{tr} \left[\hat{S}_T^z \hat{\rho}_T \right] = \frac{1}{2}. \quad (7.4)$$

Es decir, la polarización del estado $\hat{\rho}_T$ es 1. Esta polarización está equidistribuida entre todos los espines del sistema, ya que:

$$\langle \hat{S}_k^z \rangle = \text{tr} \left[\hat{S}_k^z \hat{\rho}_T \right] = \frac{1}{2N} \quad \forall k = 1 \dots N. \quad (7.5)$$

En analogía con lo que hicimos antes,

$$\hat{\rho}_T = \sum_j \frac{(N + 2m_z(j))}{N 2^N} |j\rangle \langle j| \quad (7.6)$$

donde $m_z(j) = \langle j | \hat{S}_T^z | j \rangle$. Entonces, tal como en la Ec. (7.3), se tiene que

$$\begin{aligned} P_{T,T}(t) &= 2\text{tr}[\hat{S}_T^z \hat{U}(t) \hat{\rho}_T \hat{U}^\dagger(t)] \\ &= 2\text{tr}[\hat{U}^\dagger(t) \hat{S}_T^z \hat{U}(t) \hat{\rho}_T] \end{aligned} \quad (7.7)$$

$$= 2 \sum_i \langle i | \left[\hat{U}^\dagger(t) \hat{S}_T^z \hat{U}(t) \left(\sum_j \frac{(N + 2m_z(j))}{N 2^N} |j\rangle \langle j| \right) \right] | i \rangle \quad (7.8)$$

$$= 2 \sum_i \frac{(N + 2m_z(i))}{N 2^N} \langle i | \hat{U}^\dagger(t) \hat{S}_T^z \hat{U}(t) | i \rangle \quad (7.9)$$

En analogía al caso del observable local (magnetización local) descripto, la Ec. (7.9) representa el promedio sobre ensamble de todos los elementos de la base Zeeman. Por lo expuesto, este resultado sugiere naturalmente proponer un estado superposición aleatoria dado por

$$|\Phi_{neq}\rangle = \sum_i \sqrt{\frac{(2m_z(i) + N)}{N 2^N}} e^{i\varphi_i} |i\rangle. \quad (7.10)$$

donde φ_i es una fase aleatoria. La suma sobre el índice i en la Ec. (7.10), comprende el espacio de Hilbert completo. A partir de aquí, surge la idea de extender el resultado anterior, proponiendo el cálculo de $P_{T,T}(t)$ mediante el estado $|\Phi_{neq}\rangle$ definido. Así, la Ec. (7.9) se torna en:

$$P_{T,T}(t) \simeq 2 \langle \Phi_{neq} | \hat{U}^\dagger(t) \hat{S}_T^z \hat{U}(t) | \Phi_{neq} \rangle \quad (7.11)$$

Al igual que en el caso del observable magnetización local considerado anteriormente, el lado derecho de la Ec. (7.11) requiere un promedio sobre distintas realizaciones de la fase aleatoria. Sin embargo, en sistemas suficientemente grandes ($N \sim 20$), una única realización de fases es suficiente para obtener un nivel despreciable de fluctuaciones.

Puede verificarse que el estado $|\Phi_{neq}\rangle$ está homogéneamente polarizado en todo el sistema, dado que implica una equidistribución de la polarización total en el sistema de espines,

$$\begin{aligned} 2 \langle \Phi_{neq} | \hat{S}_T^z | \Phi_{neq} \rangle &= 1, \\ 2 \langle \Phi_{neq} | \hat{S}_k^z | \Phi_{neq} \rangle &= N^{-1} \quad \forall k, \end{aligned} \quad (7.12)$$

en consistencia con las Ec. (7.4) y 7.5 respectivamente.

7.4. Comentarios acerca de la Física

En la Ref. [ADLP08], donde se introduce el estado $|\Psi_{neq}\rangle$, dado por la Ec. (5.13), se hace hincapié en el carácter *local* del observable así como también en la necesidad de que haya otros espines en el sistema que actúen como *ambiente*. En este caso, esta última condición se satisface de manera implícita para cada estado $|j\rangle$ que constituye el estado total, cuya localidad se conserva. Si bien uno podría pensar que el observable magnetización total es una magnitud global, las contribuciones locales a la magnetización están totalmente descorrelacionadas entre ellas, es decir, \hat{S}_T^z continúa siendo local.

El estado superposición $|\Phi_{neq}\rangle$ definido en la Ec. (7.10), puede ser utilizado para simular y calcular todas las correlaciones locales P_{ii} , como si cada una de ellas hubiera sido preparada independientemente [Zan15]. La posibilidad de acceder numéricamente a esas cantidad es relevante pues la medición de polarizaciones independientes ya ha sido realizada experimentalmente por Ernst y colaboradores [ZME92]. También en relación a la NMR, una posible aplicación resulta en que es posible preparar experimentalmente estados iniciales de diversa complejidad a partir de estas estados de polarización local. Este tipo de experimentos, en que se estudia la decoherencia en estados con distinto grado de “preparación” (i.e. complejidad obtenida a partir de la evolución de polarizaciones locales), se comenzaron a implementar en el LaNAIS de RMS [SPL07]. Una profundización tanto teórica como experimental de esto podría brindar un vínculo conceptual entre la dinámica del LE y el proceso de termalización en sistemas cuánticos cerrados.

El estado de polarización global definido en la Ec. (7.10) permitiría ampliar sustancialmente el tamaño de muestra de las simulaciones de un experimento estándar en NMR. Al considerar sistemas inicialmente en equilibrio térmico en presencia de un campo magnético ($\hbar\gamma B_0 \ll kT$), este estado tiene la forma:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2^N} \left(\hat{\mathbf{I}} + \frac{\hbar\gamma B_0}{kT} \sum_k \hat{S}_k^z \right) \quad (7.13)$$

puede ser ahora simulado mediante $|\Phi_{neq}\rangle$ para calcular la magnetización total del sistema.

En el campo de la NMR, una técnica muy utilizada para explorar la dinámica de muchos espines correlacionados consiste en la excitación de un tipo de estados de superposición: las Coherencias entre Cuantos Múltiplos (MQC por sus siglas en inglés: *Multiple Quantum Coherences*). Cada orden de coherencia cuántica M suma las probabilidades de todos los estados superposición entre estados Zeeman cuyo momento magnético total difiere en un número entero M . Estas superposiciones son creadas por Hamiltonianos específicos que no conservan la proyección de espín y las intensidades de las MQC pueden hallarse mediante técnicas de codificación de fases. Uno de los resultados de este tipo de experimentos es la cuantificación del número de espines correlacionados por la dinámica (*spin counting*) en cada instante de tiempo. A partir de ello se infieren propiedades de la red de interacciones y del tamaño del sistema de espines. Adicionalmente, pueden brindar información sobre la complejidad propia del estado que, muchas veces, no puede ser determinada mediante el LE.

Nuestro estado superposición $|\Phi_{neq}\rangle$ propuesto en la Ec. (7.10) nos podría permitir simular un experimento de MQC, estableciendo un vínculo entre los experimentos de NMR y los modelos teóricos considerados. La importancia de una técnica fiable para el cálculo de las MQC radica en que hasta ahora, con excepción de casos particulares como los que se mencionarán abajo, sólo pueden estimarse mediante modelos probabilísticos clásicos. Así, utilizaremos la evolución de este estado ante Hamiltonianos que crean coherencias entre cuantos múltiples para estudiar dos casos particulares que convalidarán nuestra propuesta y evidenciarán sus ventajas. En el primero presentamos una variante del eco mágico discutido en el Capítulo 1 y en el segundo calculamos numéricamente las MQC, en un sistema donde estas se reducen a una dinámica muy sencilla, reproduciendo los resultados obtenidos en un experimento real, reportado en la Ref. [RFSO⁺09].

7.5. Simulaciones numéricas

7.5.1. Caso 1. Reversionando el eco de Loschmidt

Consideramos el Hamiltoniano dipolar truncado en presencia de un campo externo,

$$\hat{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[2\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{1}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+) \right] + \sum_i \hbar\omega_{1x} \hat{S}_i^x, \quad (7.14)$$

donde $\langle i, j \rangle$ refiere a primeros vecinos dispuestos en una red cuadrada con condiciones de borde periódicas. Notar que el campo está en la dirección x , de lo contrario la evolución conmutaría con el observable y al conservarse la polarización total su evolución sería trivial.

Consideremos primero una evolución *hacia adelante* durante un tiempo t_1 según un operador evolución $\hat{U}_f(t_1) = \exp[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_f t_1]$. En este caso, elegimos $\hat{H}_f = \hat{H}$. Fijando el tiempo t_1 , luego se aplica un operador evolución que revierte la dinámica anterior, mediante una evolución *hacia atrás* durante un tiempo t_2 . Esta segunda dinámica está dada por $\hat{U}_b(t_2) = \exp[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_b t_2]$. Si la reversión fuera perfecta, entonces $\hat{H}_b = -\hat{H}_f$ y se obtendría un eco unitario para $t_2 = t_1$. Introducimos en este ejemplo una pequeña perturbación en las constantes de interacción,

$$\hat{H}_b = \sum_{\langle i,j \rangle} (-J_{ij} + \delta J_{ij}) \left[2\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{1}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+) \right] + \sum_i (-\hbar\omega_{1x} + \delta(\hbar\omega_{1x})) \hat{S}_i^x. \quad (7.15)$$

Además, en lugar de fijar $t_2 = t_1$, evaluaremos la autocorrelación $P_{T,T}(t)$ usando

$$\hat{U}(t) = \hat{U}_b((t - t_1)\theta(t - t_1))\hat{U}_f(t\theta(t_1 - t) + t_1\theta(t - t_1)), \quad (7.16)$$

con $\theta(t)$ la función escalón de Heaviside. Es decir este operador de evolución permite observar como decae la polarización para tiempos cortos ($t < t_1$), y a partir de allí como se forma el Eco de Loschmidt para generar un máximo a $t \simeq 2t_1$.

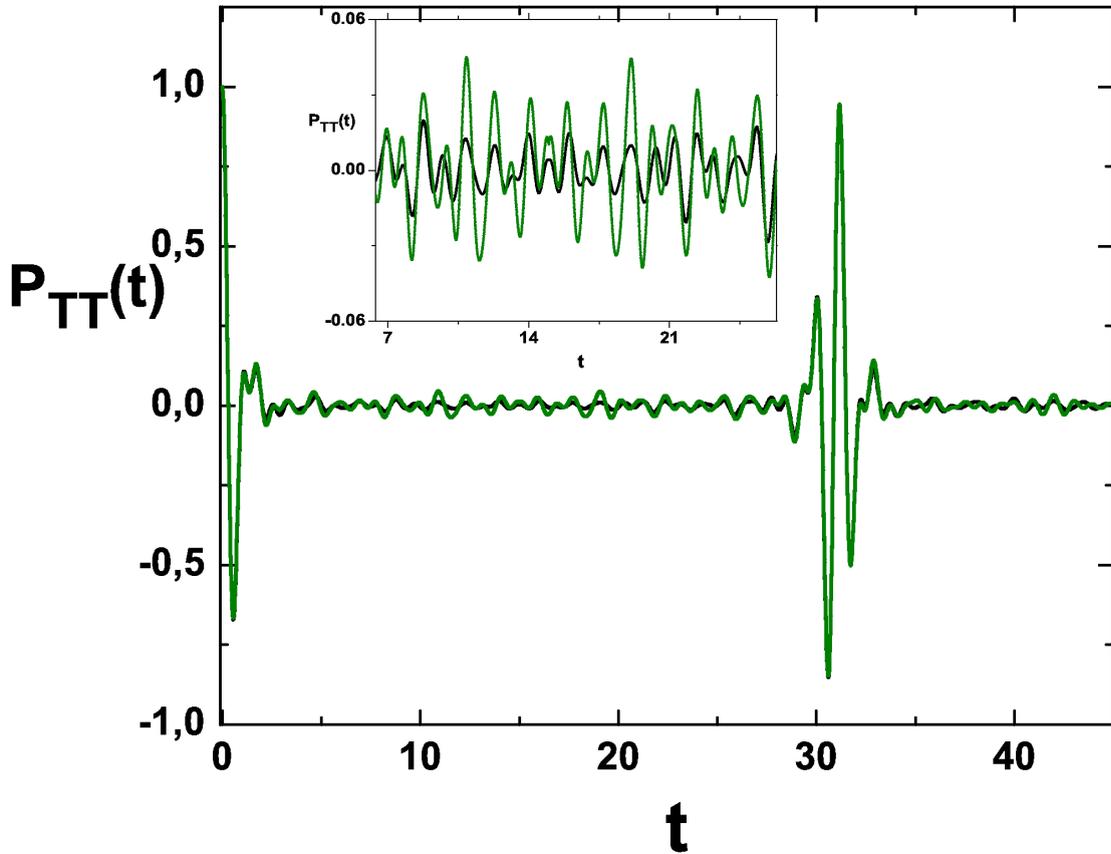


Figura 7.1: $P_{T,T}(t)$ en función del tiempo t (este último en unidades de J/\hbar), de acuerdo con el operador evolución $\hat{U}(t)$ definido por la Ec. (7.16). $N = 12$. En línea continua negra se grafica el cálculo exacto, mediante el *promedio sobre ensamble* (Ec. (7.9)) y en línea continua verde el cálculo mediante el estado entrelazado (Ec. (7.11)). Para esta última cantidad se promediaron 30 realizaciones de fases aleatorias.

En particular, mostraremos simulaciones con $J_{ij} = 1,0J$ (aquí J define la unidad de energía del problema) para $\langle i, j \rangle$ primeros vecinos en la red cuadrada, $\hbar\omega_{1x} = 5,37J$, $\delta J_{ij} = 0,063J$, y $\delta(\hbar\omega) = 0,01J$. Con esta elección de parámetros, en la Fig. 7.1 se presenta $P_{T,T}(t)$ para $N = 12$, comparando las Ec. (7.9) y 7.11. Hemos fijado $t_1 = 15\hbar/J$.

En la Fig. 7.1 presentamos $P_{T,T}(t)$ de acuerdo con el operador evolución $\hat{U}(t)$ definido por la Ec. (7.16). Puede apreciarse una remarcable similitud entre ambos métodos de cálculo, el que involucra el promedio sobre un conjunto estadísticamente representativo y el propuesto aquí, basado en el paralelismo cuántico. Tal como se advierte en el inset, el uso del estado entrelazado provoca oscilaciones de mayor amplitud. Esta diferencia se debe esencialmente a la limitación propia del método para sistemas pequeños. Es de esperar que tales fluctuaciones disminuyan al considerar sistemas más grandes [ADLP08], y por lo tanto mientras mayor sea el sistema, más confiable será nuestro método. Aun así, notamos como observación relevante la ausencia de corrimientos de frecuencias en dichas oscilaciones al comparar ambos

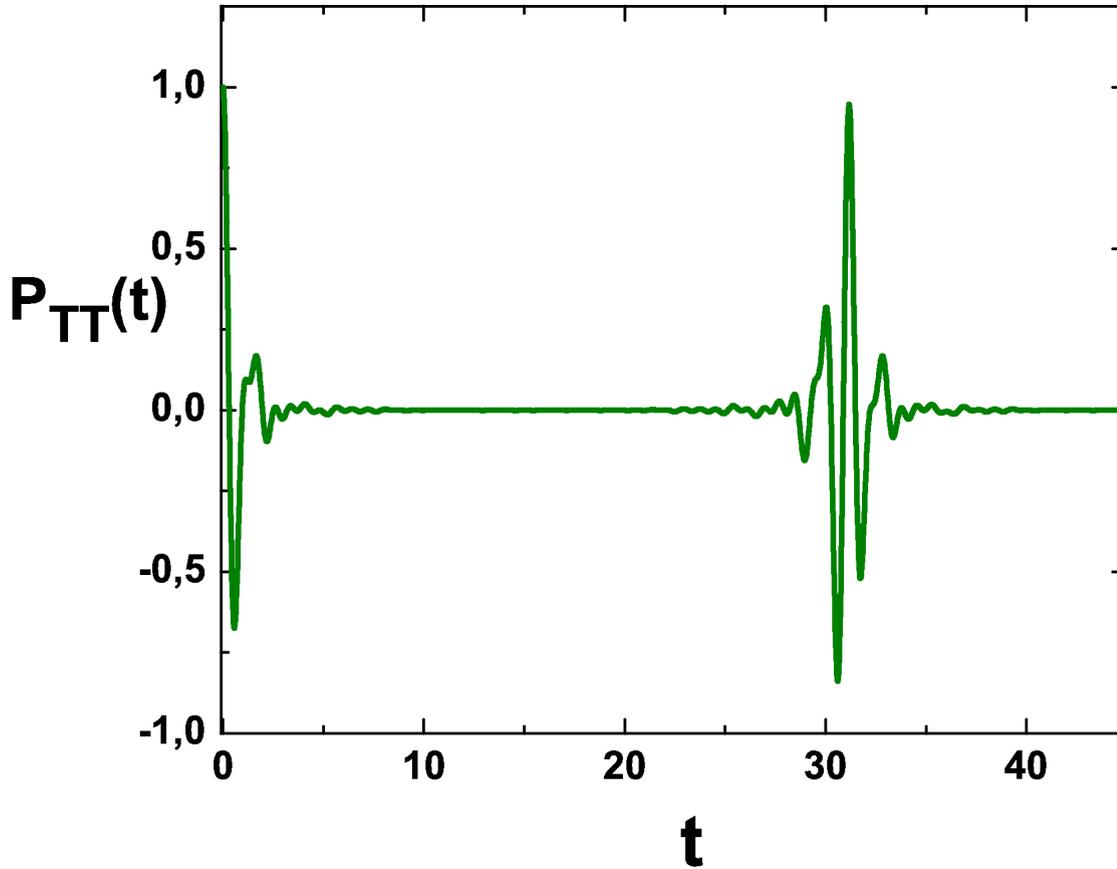


Figura 7.2: $P_{T,T}(t)$ en función del tiempo t (este último en unidades de J/\hbar), de acuerdo con el operador evolución $\hat{U}(t)$ definido por la Ec. (7.16). $N = 25$. Se utiliza el paralelismo de la Ec. (7.11).

métodos.

En la Fig. 7.2 mostramos una simulación análoga de $P_{T,T}(t)$ para $N = 25$ usando la Ec. (7.11). Se advierte una significativa atenuación de oscilaciones. Esto es indicativo de que, en sistemas muy grandes, no se requieren muchas realizaciones para eliminar ruido estadístico. El tiempo de simulación para dicha corrida fue de 6 días en una GPU, mientras que en el hipotético caso de usar la Ec. (7.9) (cálculo de promedio sobre ensamble exacto con la misma precisión del paso Trotter-Suzuki), se requerirían tiempos mayores a 100 años.

7.5.2. Caso 2. Coherencias múltiples

En un experimento típico de NMR sobre un sistema de N espines $1/2$ en presencia de un campo magnético intenso, las intensidades de las MQC pueden hallarse mediante técnicas de codificación de fases. Para ello es necesario conocer la dinámica de una polarización inicialmente equidistribuida en todo el sistema. En esta Sección reproducimos los resultados reportados en la Ref. [RFSO⁺09, RF09], en donde se estudiaron numérica y experimentalmente las MQC de una muestra policristalina

de hidroxiapatita (HAp). Allí, se muestran experimentos en una cadena lineal donde la interacción dipolar entre primeros vecinos es la parte más relevante. En ella se analiza la evolución de las intensidades de las MQC de orden 0 y 2, que son las únicas que se pueden formar en esta cadena bajo la acción de un Hamiltoniano de cuantos dobles (DQ). La evolución de un estado inicial bajo una interacción DQ a primeros vecinos en un sistema 1-d se puede reducir a la dinámica de fermiones no-interactuantes. De esto resulta que, si bien no pueden ser creados órdenes de coherencia mayores a 2, pueden obtenerse soluciones analíticas cerradas. Los autores han contrastado sus resultados experimentales con soluciones analíticas, y también numéricas obtenidas con promedios sobre un conjunto estadístico completo.

Para crear coherencias a partir de un estado térmico, se requiere de un Hamiltoniano que no conmute con la matriz densidad (es decir, con \hat{S}_T^z para el estado térmico definido en la Ec. (7.13)) [RFSO+09]. Este es el caso, por ejemplo, del Hamiltoniano DQ, definido en la Ec. (5.19). En lo que sigue, reproduciremos los resultados expuestos en la Ref. [RFSO+09] proponiendo el cálculo de $P_{T,T}(t)$ mediante la evolución de nuestro estado de magnetización global $|\Phi_{neq}\rangle$. Aquí, el estado inicial, dado por la Ec. (7.13), evoluciona según el Hamiltoniano DQ:

$$\hat{U}_{DQ}(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H_{DQ} t \right],$$

donde H_{DQ} es el Hamiltoniano de cuantos dobles, definido en la Ec. (5.19). Con el propósito de simular el experimento descrito, en un determinado instante de tiempo, el estado comienza una evolución con un Hamiltoniano rotado un ángulo ϕ , es decir:

$$\hat{U}_\phi(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H_\phi t \right],$$

donde

$$H_\phi = \exp \left[-i\phi \hat{S}_T^z \right] H_{DQ} \exp \left[i\phi \hat{S}_T^z \right].$$

Esta rotación se realiza con el fin experimental de *marcar* las coherencias para poder luego codificarlas. Luego de una rotación en un ángulo ϕ alrededor del eje z , un estado de coherencia M adquiere una fase proporcional a M :

$$\langle u | \exp \left[-i\phi \hat{S}_T^z \right] \hat{\rho}_T \exp \left[-i\phi \hat{S}_T^z \right] | v \rangle = e^{i\phi M} \langle u | \hat{\rho}_T | v \rangle$$

siendo $|u\rangle$ y $|v\rangle$ dos estados involucrados en la transición, es decir que la diferencia

de sus momentos magnéticos totales es igual a M . Variando el ángulo ϕ entre 0 y 2π en pasos de $\pi/M_{\text{máx}}$, siendo que $M_{\text{máx}}$ es el máximo orden de coherencia que se detectará, es posible obtener la intensidad de las MQC haciendo una transformada de Fourier rápida (FFT) respecto a ϕ de $P_{T,T}(t)$. El operador evolución total está dado por

$$\hat{U}(2t) = \hat{U}_{DQ}(t) \hat{U}_\phi(t). \quad (7.17)$$

En la Fig. 7.3 se muestra la evolución *hacia adelante* de la polarización total del sistema ($\hat{U}(t) = \hat{U}_{DQ}(t)$). La curva negra representa el promedio sobre ensamble de

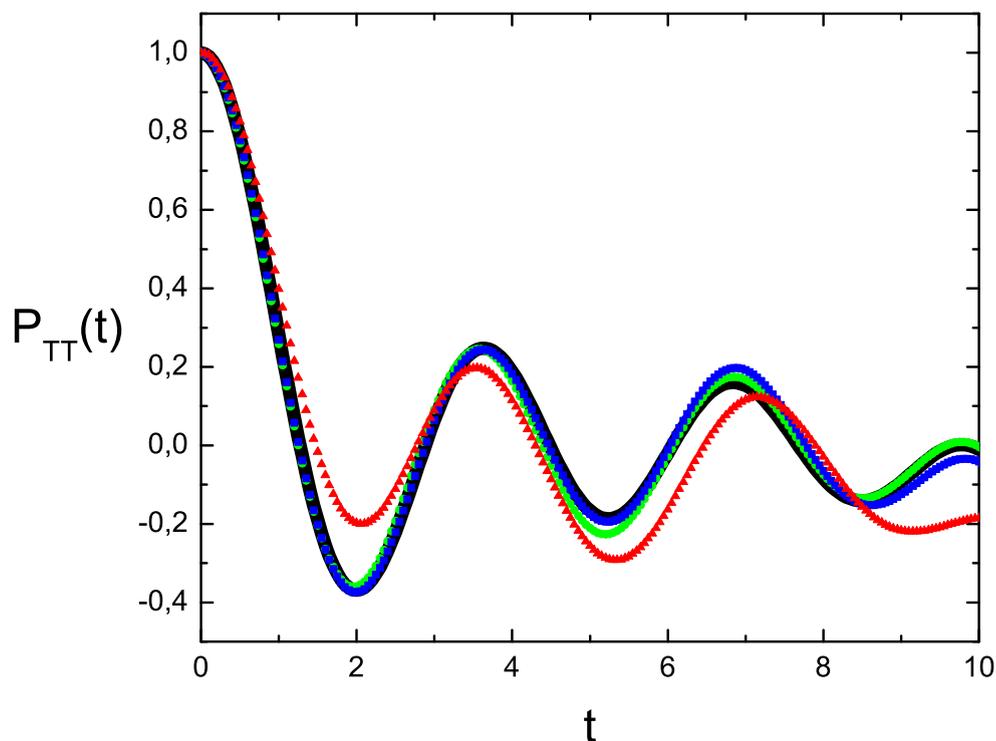


Figura 7.3: $P_{T,T}(t)$ en función del tiempo t (este último en unidades de J/\hbar), de acuerdo con el operador evolución hacia adelante $\hat{U}_H(t)$ definido por la Ec. 7.17 para un sistema de $N = 10$. En línea continua negra se grafica el cálculo serial exacto (Ec. 7.9). El cálculo en paralelo (Ec. 7.11), está representado por la curva: de círculos verdes, cuadrados azules y triángulos rojos para 20, 10 y 1 realización de fases aleatorias respectivamente.

cada uno de los estados de la base Zeeman. Con líneas de puntos se muestran los resultados obtenidos a partir de la cuenta en paralelo para diferentes realizaciones.

Notamos que a partir de 10 realizaciones de fases aleatorias, el observable polarización total del estado $|\Phi_{neq}\rangle$ coincide con el que se obtiene del promedio sobre ensamble completo.

En un arreglo experimental típico, se obtiene una serie de curvas correspondientes a los diferentes valores de ϕ . En la Fig. 7.4 se muestran las evoluciones de la polarización total para diferentes valores de ϕ .

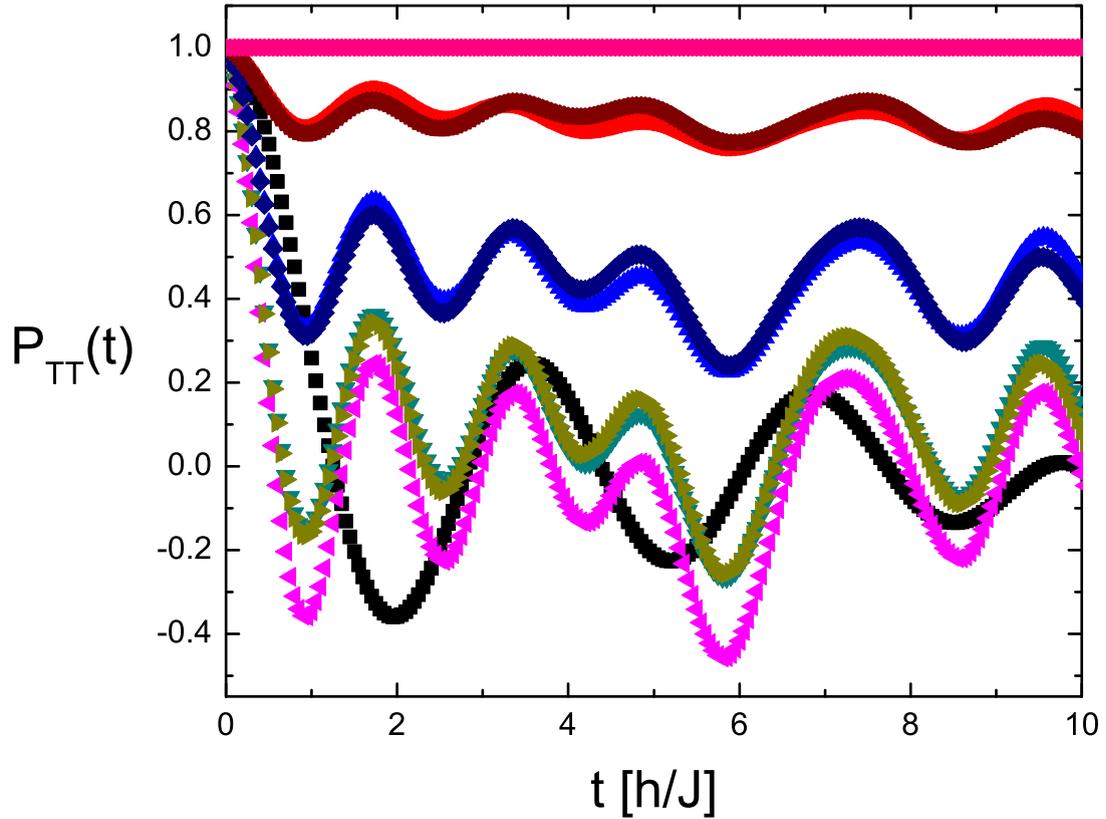


Figura 7.4: $P_{TT}(t)$ en función del tiempo t (este último en unidades de J/h), de acuerdo con el operador evolución $\hat{U}(t)$ definido por la Ec. 7.17 para un sistema de $N = 10$. Las curvas representan diferentes fases, $\phi = 0, \frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{8}, \frac{\pi}{2}, \frac{5\pi}{8}, \frac{3\pi}{4}, \frac{7\pi}{8}$ y π , para 20 realizaciones de fases aleatorias.

Los resultados coinciden con los obtenidos mediante el promedio sobre ensamble y se ha reducido significativamente el tiempo de cálculo.

En la Fig. 7.5 presentamos el cálculo numérico de las MQC de orden 0, 2 y 4 para la hidroxiapatita, y lo comparamos con los resultados analíticos exactos. Dado que el sistema de interés es unidimensional con un Hamiltoniano DQ, los resultados analíticos se obtienen mediante un mapeo a un sistema de fermiones no-interactuantes. Podemos apreciar un excelente acuerdo entre ambos. Las coherencias de orden 0 y 2 oscilan, mientras que la coherencia de orden 4 no se desarrolla, debido al carácter unidimensional del sistema estudiado.

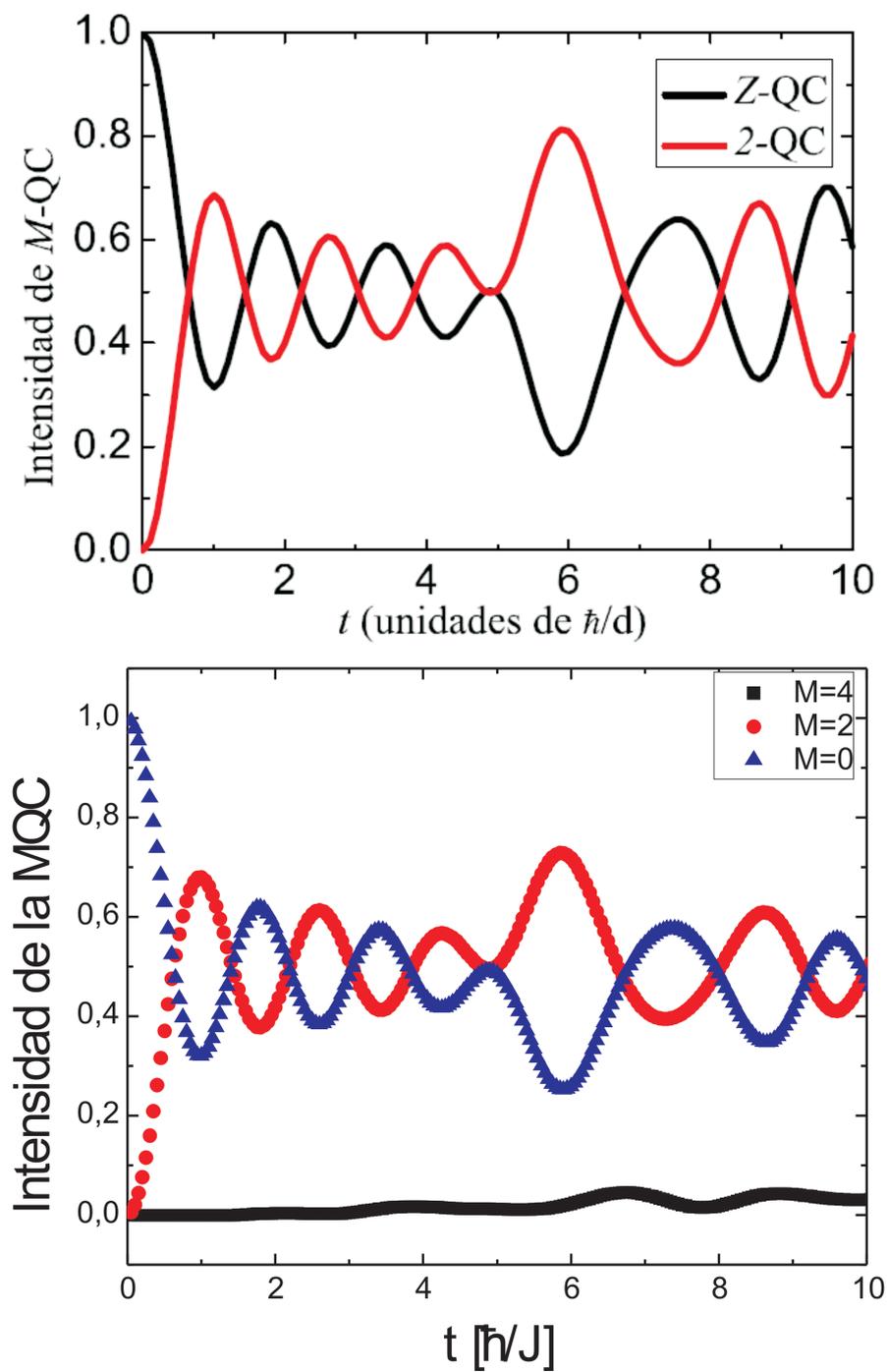


Figura 7.5: Comparación entre los resultados analíticos de las coherencias de orden 0 y 2 del sistema estudiado (arriba) con los obtenidos numéricamente, mediante la evolución del estado entrelazado (abajo).

7.6. Conclusión

En este Capítulo, hemos discutido acerca de las limitaciones que aparecen para evaluar numéricamente la dinámica de un estado mezcla. En cálculos típicos efectuados en la comunidad de NMR, la manipulación de la matriz densidad de dimensión $2^N \times 2^N$ rápidamente satura la memoria disponible. Asimismo, el cálculo de la dinámica mediante descomposición en estados puros y posterior promedio demanda tiempos de ejecución que aumentan exponencialmente con N . Para sobrellevar estos obstáculos de cálculo hemos propuesto una estrategia que supera ampliamente a los métodos vigentes. Ésta se basa en el paralelismo cuántico, que permite reemplazar el promedio sobre ensamble por un cálculo de un único estado de superposición aleatoria. El método propuesto en trabajos anteriores apuntaba a la evaluación de observables locales, cuando el estado inicial también es local. Aquí hemos removido esa restricción al considerar un estado inicial con polarización homogéneamente distribuida en todo el sistema. La importancia de la nueva estrategia aparece particularmente en sistemas inhomogéneos, tal como ocurre en la mayoría de las situaciones experimentales. Ahora un único cálculo permite, en principio, la evaluación completa del observable magnetización total. Remarcamos también que no se requieren hipótesis ad-hoc respecto a la dinámica, y más importante aún, no realizamos ningún tipo de truncamiento del espacio de Hilbert.

Hemos analizado dos casos inspirados en experimentos de NMR. En uno de ellos, estudiamos una variante del eco mágico. Allí observamos un excelente acuerdo entre las simulaciones numéricas completas (cálculo serial) y las obtenidas mediante el cálculo en paralelo propuesto, para un sistema de $N = 12$ espines. Más aún, hemos simulado el mismo experimento aumentando sustancialmente el tamaño del sistema a $N = 25$ espines. Este cálculo, que requeriría tiempos de ejecución serial abrumadoramente largos (de más de 100 años) fue realizado en 6 días en una placa de video.

Por otro lado, hemos estudiado la polarización de un cristal de hidroxiapatita, imitando el protocolo experimental introducido en la Ref. [RFSO⁺09]. Los resultados indican un excelente acuerdo entre el cálculo de conjunto estadístico y el cálculo que aprovecha el paralelismo cuántico. Estos resultados son de gran utilidad para determinar la complejidad, mediante las Coherencia entre Cuantos Múltiplos, de un estado cuántico en diferentes etapas de evolución.

La herramienta aquí desarrollada abre las puertas a un nuevo horizonte de posibilidades para realizar simulaciones eficientes de sistemas con un importante número de espines acoplados. Nuestro estado, siendo representativo de un estado de polarización inicial, permitiría simular, mediante secuencias temporales de Hamiltonianos apropiados, cualquier secuencia de pulsos, incluso experimentos multidimensionales completos.

Capítulo 8

Comentarios Finales

8.1. Conclusiones

A lo largo de esta Tesis hemos estudiado sistemáticamente la dinámica de sistemas cuánticos abiertos y cerrados, haciendo especial énfasis en los procesos de *decoherencia* e *irreversibilidad*. Para ello, el testigo dinámico utilizado ha sido el *Eco de Loschmidt* (LE), que cuantifica la sensibilidad de una evolución cuántica ante perturbaciones no-controladas. La idea subyacente a lo largo de toda la Tesis que justifica la elección de los modelos estudiados y métodos aplicados, radica en establecer condiciones de validez para la *hipótesis central de irreversibilidad*. Según ésta, el grado de complejidad intrínseca de un sistema de muchos cuerpos amplifica el efecto de mínimas perturbaciones, estableciendo la magnitud de la irreversibilidad. El contraste entre los modelos teóricos, que involucran sistemas de tamaño finito, con los experimentos, sugiere que la irreversibilidad podría ser un *fenómeno emergente* del Límite Termodinámico (TL). Por ello, hemos procurado estudiar propiedades emergentes de este TL, $N \rightarrow \infty$, aumentando progresivamente el tamaño N de los sistemas multiespín analizados.

Hemos abordado diferentes sistemas, en orden creciente de complejidad, comenzando a partir de modelos simples, con dinámicas que mapean a fermiones no-interactuantes hasta modelos más complejos, de muchos espines interactuantes. Hemos sido capaces de identificar *Transiciones de Fase en la Dinámica Cuántica* (QDPT), asociadas a cambios drásticos en la dinámica de observables específicos, que surgen como consecuencia de la interacción entre el sistema de interés con un *ambiente*, cuando este último es considerado en el TL.

En particular, en el Capítulo 2 hemos estudiado el transporte electrónico estacionario a través de un sistema de dos niveles (TLS) conectado a procesos de decoherencia, nuevamente asociados a ambientes en el TL. En este caso, tuvimos especial cuidado en asegurar que esta interacción preserve la probabilidad dentro del sistema. Allí, analizamos si la *conductancia* resulta un buen testigo para observar la QDPT que congela las oscilaciones naturales de un TLS.

Para ello, en lugar de resolver la dinámica completa del sistema abierto que brinda el formalismo de Keldysh, hemos adoptado el tratamiento del problema mediante una simplificación de las Ecuaciones Generalizadas de Landauer-Büttiker, tal como son planteadas en el modelo D'Amato-Pastawski. Hallamos que la QDPT del TLS

no se presenta en la conductancia electrónica estacionaria a menos que ya ocurra a nivel del Hamiltoniano efectivo. Notablemente, hemos visto que, para determinadas mediciones, la transición dinámica está oculta debido a la presencia de una *antiresonancia fantasma*. Otro fenómeno resaltante aparece cuando la interacción con el ambiente excede cierto valor crítico. En tal caso, el ambiente puede *absorber* uno de los sitios y, en consecuencia, el sistema de dos niveles se comportará como un sistema efectivo de un único nivel de energía.

En el Capítulo 3, hemos introducido el observable que ha constituido el eje central para proponer la Hipótesis Central de la Irreversibilidad, éste es el LE, es decir la cantidad de excitación recuperada luego de revertir imperfectamente su dinámica. Hemos derivado una ecuación diferencial exacta para describir la evolución del LE, así como también una ecuación análoga para la Probabilidad de Supervivencia de un estado inicial. Esta ecuación nos permite evaluar teórica y numéricamente el comportamiento de la *tasa de decaimiento* del LE, que quedó *explícitamente expresada como un valor de expectación de la perturbación*.

Con estas herramientas, estudiamos el efecto que tiene una perturbación sobre el sistema de dos niveles en dos casos particulares. En primer lugar, consideramos un *ambiente Markoviano*, es decir que no tiene memoria y podemos despreocupar su estructura energética. En segundo lugar, hemos tenido en cuenta los efectos de memoria introducidos por un ambiente finito. En ambos casos hemos supuesto que el ambiente perturba a un único estado del sistema, lo que denominamos *ambiente quirral*. Los resultados muestran la presencia de un comportamiento crítico de nuestro testigo dinámico, que se expresa como una no-analiticidad de la tasa de decaimiento del LE en función de la intensidad de la interacción con el ambiente. Para un valor crítico de la interacción, las oscilaciones de la Probabilidad de Supervivencia se congelan y, a partir de ese valor, el sistema entra en un régimen sobreamortiguado. Notablemente, de acuerdo con esta formulación, la decoherencia aparece naturalmente como un efecto *no-uniforme* en el tiempo. Ésta depende del estado del sistema y de la interacción específica con el ambiente. Así, observamos que el LE posee períodos de mesetas, que se correlacionan con cancelaciones temporarias de la tasa de decoherencia. Estos resultados son consistentes con recientes observaciones y reaparecen al considerar otros modelos y dinámicas, tanto numéricas [FAP15] como experimentales [SLB+16].

En el Capítulo 4, hemos empleado un modelo bosón-espín para estudiar la decoherencia de un oscilador armónico debido a su interacción con un ambiente binario no-degenerado. El enfoque que hemos adoptado aquí es conceptualmente diferente de los Capítulos previos, e incluso distinto a la visión usual de sistemas cuánticos abiertos, dado que aquí el número de estados permitidos del sistema es mucho mayor que los del ambiente. Una particularidad de nuestro modelo es que la dinámica del proceso de transición entre los dos estados de espín está limitada a ocurrir mientras el oscilador transita a través de un valor específico de su coordenada armónica. Un resultado interesante es que esta situación está bien descrita en términos de la *teoría de Landau-Zener*, originalmente desarrollada para describir transiciones en un sistema de dos niveles que evoluciona bajo una interacción dependiente del tiempo.

Mediante el LE, hemos cuantificado la degradación que un ambiente binario produce en la fase cuántica. En particular, nos concentramos en la *fragilidad* de

superposiciones coherentes de paquetes de onda (estados no-locales) relativa a superposiciones incoherentes de los mismos paquetes. Los resultados nos indican que las superposiciones coherentes de paquetes semiclásicos asociados a energías diferentes son más frágiles que los incoherentes. Esta fragilidad aumenta con la diferencia de energía, es decir, paquetes no-locales en la representación energía son más frágiles que paquetes de onda individuales, ante perturbaciones de ambiente binario.

Con el propósito de modelar sistemas más cercanos a los experimentos que se realizan en Córdoba, a partir del Capítulo 5 comenzamos a estudiar dinámicas de sistemas de espines interactuantes. La evaluación numérica de estas dinámicas de espines se realiza mediante un algoritmo de paralelismo cuántico [ADLP08], en la aproximación de Trotter-Suzuki, altamente optimizado implementado en procesadores gráficos (GPU) [DBZP13]. Esto nos permite considerar el espacio de Hilbert completo de sistemas más grandes que los que se abordarían con métodos convencionales. En consonancia con los experimentos de Resonancia Magnética Nuclear (NMR), el observable LE *local* se manifiesta como un exceso de polarización en el mismo espín donde se ha inyectado en el instante inicial, luego del procedimiento de reversión descrito. Por ello, la evaluación numérica del eco en sistemas de espines requiere de una definición más general que la estudiada en modelos de un cuerpo, esta vez en términos de una función de autocorrelación. En este Capítulo definimos esta función de autocorrelación de espín y la evaluamos en una serie de sistemas finitos de espines, mostrando una gran variedad de regímenes dinámicos. Con el propósito de analizar una posible emergencia del TL a medida que N aumenta, adoptamos un modelo de interacciones *todos contra todos*. La dinámica hacia adelante está generada por un Hamiltoniano Dipolar truncado reversible \hat{H}_0 que provee una descomposición natural del espacio de Hilbert en subespacios de una proyección de espín definida. Como en los experimentos originales, una perturbación no-reversible $\hat{\Sigma}$ acopla subespacios que están separados por un brecha de energía controlable.

Analizamos aquí un régimen en el cual la perturbación induce interacciones efectivas de dos y de cuatro cuerpos. Estas interacciones efectivas pueden mezclar estados que no estaban directamente acoplados por el Hamiltoniano Dipolar. Más aún, estas interacciones están caracterizadas por una Regla de Oro de Fermi (FGR) efectiva, cuyo rango de validez aumenta hacia perturbaciones más débiles a medida que N aumenta. El análisis de este umbral respeta una secuencia específica: primero $N \rightarrow \infty$ y luego $\|\hat{\Sigma}\| \rightarrow 0^+$. Así, en el TL, incluso una perturbación minúscula conllevará al decaimiento del LE, gobernado por una FGR efectiva y a la posterior equilibración de la polarización. La FGR efectiva se acentúa debido al mecanismo de *proliferación* de interacciones efectivas. Sin embargo, se ha observado que el modelo empleado no contiene suficiente jerarquía en la red de interacciones, como para que su exploración mediante la dinámica natural sea un ingrediente determinante en la tasa de decoherencia. Así, no resultó apropiado para evaluar la Hipótesis Central de la Irreversibilidad.

En cualquier caso, en el modelo estudiado resultó muy interesante observar que la propia dinámica hacia adelante puede producir la *equilibración* asintótica de la polarización en todo el sistema. Notablemente, si el sistema permanece equilibrado durante un tiempo mayor que el de la FGR efectiva, permanecerá así irreversiblemente. Por lo tanto, pese a que el estado equilibrado contiene correlaciones que

codifican el estado inicial del sistema, éstas se vuelven irrelevantes en presencia de pequeñas perturbaciones. Este hecho repercute directamente sobre la capacidad de revertir el Hamiltoniano. En este modelo *todos contra todos*, es el propio sistema el responsable de los procesos de decoherencia y equilibración descritos. En otras palabras, uno podría afirmar que, como consecuencia de una mínima perturbación, *el sistema se ha convertido en su propio ambiente*.

En contraste, en el Capítulo 6 hemos estudiado un modelo que consiste en dos sistemas de espines en mutua interacción, en el que uno actúa como sistema y el otro como ambiente. La idea inicial era que la dinámica interna de uno de los sistemas sea simple, es decir integrable, a los efectos de facilitar evaluaciones analíticas. Por ello, consideramos anillos con interacción interna tipo XY , que puede mapearse a un problema de un cuerpo, mientras que el acoplamiento entre ellos, descrita por una interacción Dipolar, posibilita un apreciable grado de mezcla. Hemos cuantificado sistemáticamente el decaimiento del LE para este modelo. En concordancia con el procedimiento descrito en el Capítulo 5, para analizar la posible emergencia del TL, hemos aumentado progresivamente el tamaño del sistema.

En este modelo, hemos observado que el comportamiento a tiempos largos difiere según la paridad de cada anillo. Este fenómeno ya ha sido observado anteriormente y su origen radica en la posibilidad de conmensurar frecuencias dependiendo de la paridad.

Estudiamos sistemáticamente el decaimiento del LE que resulta exponencial para tiempos largos o perturbaciones grandes. Vimos que estas tasas de decaimiento se van irremediablemente a cero cuando la perturbación se desvanece. Sin embargo, a perturbaciones mayores, la tasa de decaimiento puede separarse en dos términos. El más importante sigue la prescripción de la FGR, en el sentido que resultan proporcionales al cuadrado de la perturbación. Esto es esperable en sistemas de tamaño finito. Sin embargo la tasa de decaimiento contiene un término constante que no depende de la perturbación y que es obtenido de extrapolar la tasa hacia perturbación nula. Este valor finito parece consistente con la *Hipótesis Central de la Irreversibilidad* que hemos discutido previamente: La complejidad propia del sistema-ambiente, considerado en su conjunto, amplifica el efecto de cualquier mínima perturbación que exceda cierto pequeño umbral.

Finalmente, en el Capítulo 7, desarrollamos una nueva herramienta que podría resultar de suma utilidad para evitar las limitaciones que aparecen al evaluar numéricamente la dinámica de un estado mezcla. Aquí, proponemos una posible solución a estas limitaciones, extendiendo el algoritmo de paralelismo cuántico. Éste, que consiste en reemplazar el promedio sobre el conjunto estadísticamente representativo por un cálculo de un único estado de superposición aleatoria, es ahora implementado considerando un estado inicial homogéneamente distribuido en todo el sistema. Esta condición es usual en la mayoría de los experimentos de NMR. En particular, en las implementaciones que están siendo desarrollados en el LaNaIS de RMS en Córdoba para evaluar la irreversibilidad y decoherencia, como procedimientos tipo Eco Mágico para el LE, y en las secuencias que buscan evaluar Coherencias entre Cuantos Múltiplos (MQC) para cuantificar el grado de complejidad inducido por la dinámica cuántica.

Con el objeto de convalidar nuestro método, hemos analizado dos casos de par-

ticular interés, inspirados en experimentos de NMR. En uno de ellos, estudiamos una variante del eco mágico. Allí, observamos un excelente acuerdo entre las simulaciones numéricas completas (cálculo serial) y las obtenidas mediante el cálculo con nuestra implementación del paralelismo cuántico. Además, mostramos el mismo cálculo aumentando sustancialmente el tamaño del sistema, que requeriría tiempos de ejecución abrumadoramente largos mediante el cálculo que considere ensambles estadísticos completos. En un segundo modelo, hemos estudiado la polarización de un cristal de hidroxiapatita, imitando un protocolo experimental de MQC. Los resultados indican un excelente acuerdo entre el cálculo de conjunto estadístico y el cálculo que aprovecha el paralelismo cuántico.

La herramienta aquí desarrollada abre las puertas a un nuevo horizonte de posibilidades para realizar simulaciones eficientes de sistemas con un importante número de espines acoplados. Nuestro estado inicial, siendo representativo de un estado de polarización inicial, permitiría simular, mediante secuencias temporales de Hamiltonianos apropiados, cualquier secuencia de pulsos, incluso experimentos multidimensionales completos.

8.2. Perspectivas futuras

Una posible extensión del estudio de las QDPT mediante el decaimiento del LE consistiría en analizar un sistema de dos espines en presencia de un ambiente de espines bajo la acción de otro Hamiltoniano, como el descrito en el Capítulo 6. Aunque la QDPT fue ampliamente estudiada en el grupo en términos de la dinámica a tiempos positivos, la reversión temporal sólo ha comenzado a considerarse recientemente. La evaluación de γ_{LE} en este tipo de sistemas se puede realizar, en principio, de varias formas. Una de ellas consiste en resolver la dinámica unitaria total de un sistema de dos espines acoplados a una cadena finita de espines y evaluar la función de autocorrelación de espín a partir de ella. Otra forma sería resolver numéricamente la ecuación maestra de Lindblad o las ecuaciones generalizadas de Landauer-Büttiker correspondientes.

En el modelo que hemos estudiado en el Capítulo 6, encontramos que el valor finito de la tasa de decaimiento del IE a perturbación nula es muy pequeño. Atribuimos esto al hecho de que la dinámica de cada anillo es demasiado simple (integrable en el límite de acoplamiento nulo), por lo que la complejidad responsable del decaimiento independiente de perturbación solo existe en presencia de la interacción. Una vía posible para probar esta suposición, radica en el análisis de modelos de anillos cuyas dinámicas internas sean más complejas, por ejemplo, una interacción Dipolar con segundos vecinos. Ésta sería sólo una primer alternativa, pues la geometría unidimensional seguiría siendo una limitación para nuestra hipótesis de que en un cristal la complejidad se incrementa en forma exponencial con el grado de evolución dinámica.

Finalmente, nos ha quedado pendiente, por un lado, el uso de la nueva técnica computacional presentada en el Capítulo 7, basada en la utilización del estado entrelazado construido, en la simulación de un experimento real. Por otro lado, restaría poner a prueba los conceptos de fragilidad de estados de diversa complejidad, de los

que estudiamos en el Capítulo 4, en experimentos de preparación como los descritos [SLB⁺16].

Bibliografía

- [ÁDLP06] Gonzalo A Álvarez, Ernesto P Danieli, Patricia R Levstein, and Horacio M Pastawski. Environmentally induced quantum dynamical phase transition in the spin swapping operation. *The Journal of chemical physics*, 124(19):194507, 2006.
- [ADLP08] Gonzalo A. Álvarez, Ernesto P. Danieli, Patricia R. Levstein, and Horacio M. Pastawski. Quantum parallelism as a tool for ensemble spin dynamics calculations. *Phys. Rev. Lett.*, 101(12):120503, Sep 2008.
- [AKOS14] J. C. Andresen, H. G. Katzgraber, V. Oganesyan, and M. Schechter. Existence of a Thermodynamic Spin-Glass Phase in the Zero-Concentration Limit of Anisotropic Dipolar Systems. *Physical Review X*, 4(4):041016, October 2014.
- [And54] P. W. Anderson. A mathematical model for the narrowing of spectral lines by exchange or motion. *Journal of the Physical Society of Japan*, 9:316, may 1954.
- [B86] M. Büttiker. Role of quantum coherence in series resistors. *Phys. Rev. B*, 33:3020–3026, Mar 1986.
- [BCH11] M. C. Bañuls, J. I. Cirac, and M. B. Hastings. Strong and Weak Thermalization of Infinite Nonintegrable Quantum Systems. *Physical Review Letters*, 106(5):050405, February 2011.
- [BF71] O. Bohigas and J. Flores. Two-body random hamiltonian and level density. *Phys. Lett. B*, 34:261–263, March 1971.
- [BH84] Richard G Brewer and Erwin L Hahn. Atomic memory. *Scientific American*, 251(6):50–57, 1984.
- [BMGP85] J. Baum, M. Munowitz, A. N. Garroway, and A. Pines. Multiple quantum dynamics in solid state nmr. *The Journal of Chemical Physics*, 83(5), 1985.
- [BPP08] Ariel Bendersky, Fernando Pastawski, and Juan Pablo Paz. Selective and efficient estimation of parameters for quantum process tomography. *Physical review letters*, 100(19):190403, 2008.
- [Büt86] M Büttiker. Four-terminal phase-coherent conductance. *Physical review letters*, 57(14):1761, 1986.
- [Büt88] Markus Büttiker. Symmetry of electrical conduction. *IBM Journal of Research and Development*, 32(3):317–334, 1988.

- [BZP13] Denise Bendersky, Pablo R. Zangara, and Horacio M. Pastawski. Fragility of superposition states evaluated by the loschmidt echo. *Phys. Rev. A*, 88:032102, Sep 2013.
- [CBMP10] Carlos J. Cattena, Raúl A. Bustos-Marún, and Horacio M. Pastawski. Crucial role of decoherence for electronic transport in molecular wires: Polyaniline as a case study. *Phys. Rev. B*, 82:144201, Oct 2010.
- [CDPZ03a] F. M. Cucchietti, D. A. Dalvit, J. P. Paz, and W. H. Zurek. Decoherence and the Loschmidt Echo. *Physical Review Letters*, 91(21):210403, November 2003.
- [CDPZ03b] F. M. Cucchietti, D. A. R. Dalvit, J. P. Paz, and W. H. Zurek. Decoherence and the loschmidt echo. *Phys. Rev. Lett.*, 91:210403, Nov 2003.
- [CFABM⁺14] Carlos J Cattena, Lucas J Fernández-Alcázar, Raúl A Bustos-Marún, Daijiro Nozaki, and Horacio M Pastawski. Generalized multi-terminal decoherent transport: recursive algorithms and applications to saser and giant magnetoresistance. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 26(34):345304, 2014.
- [CL84] Sudip Chakravarty and Anthony J. Leggett. Dynamics of the two-state system with ohmic dissipation. *Phys. Rev. Lett.*, 52:5–8, Jan 1984.
- [CLM⁺02] F. M. Cucchietti, C. H. Lewenkopf, E. R. Mucciolo, H. M. Pastawski, and R. O. Vallejos. Measuring the lyapunov exponent using quantum mechanics. *Phys. Rev. E*, 65:046209, Apr 2002.
- [CLP06] F. M. Cucchietti, C. H. Lewenkopf, and H. M. Pastawski. Decay of the loschmidt echo in a time-dependent environment. *Phys. Rev. E*, 74:026207, Aug 2006.
- [CPJ04] Fernando M. Cucchietti, Horacio M. Pastawski, and Rodolfo A. Jalabert. Universality of the lyapunov regime for the loschmidt echo. *Phys. Rev. B*, 70:035311, Jul 2004.
- [Dan06] Ernesto Danieli. *Formalism for the design and control of quantum interferences in the polarization dynamics within a nuclear spin system*. PhD thesis, Universidad Nacional de Cordoba, Argentina, 2006.
- [Dat97] Supriyo Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press, 1997.
- [DBMP08] Axel D. Dente, Raúl A. Bustos-Marún, and Horacio M. Pastawski. Dynamical regimes of a quantum swap gate beyond the fermi golden rule. *Phys. Rev. A*, 78(6):062116, Dec 2008.
- [DBZP13] A. D. Dente, C. S. Bederián, P. R. Zangara, and H. M. Pastawski. GPU accelerated Trotter-Suzuki solver for quantum spin dynamics. *ArXiv e-prints*, April 2013.
- [Den12] Axel D. Dente. *Spin environment induced decoherence: relaxation and quantum synchronization*. PhD thesis, Universidad Nacional de Cordoba, Argentina, 2012.

- [Deu91] JM Deutsch. Quantum statistical mechanics in a closed system. *Physical Review A*, 43(4):2046, 1991.
- [DP90] Jorge L. D'Amato and Horacio M. Pastawski. Conductance of a disordered linear chain including inelastic scattering events. *Phys. Rev. B*, 41:7411–7420, Apr 1990.
- [DPA05] Ernesto P. Danieli, Horacio M. Pastawski, and Gonzalo A. Álvarez. Quantum dynamics under coherent and incoherent effects of a spin bath in the keldysh formalism: application to a spin swapping operation. *Chem. Phys. Lett.*, 402(1-3):88 – 95, 2005.
- [DPL04] E. P. Danieli, H. M. Pastawski, and P. R. Levstein. Spin projection chromatography. *Chem. Phys. Lett.*, 384(4-6):306 – 311, 2004.
- [DPW89] Jorge L. D'Amato, Horacio M. Pastawski, and Juan F. Weisz. Half-integer and integer quantum-flux periods in the magnetoresistance of one-dimensional rings. *Phys. Rev. B*, 39:3554–3562, Feb 1989.
- [DZP11] A. D. Dente, P. R. Zangara, and H. M. Pastawski. Non-markovian decay and dynamics of decoherence in private and public environments. *Phys. Rev. A*, 84:042104, Oct 2011.
- [EBW04] R.R. Ernst, G. Bodenhausen, and A. Wokaun. *Principles of nuclear magnetic resonance in one and two dimensions*. Clarendon Press, Oxford, 2004.
- [EFG14] J. Eisert, M. Friesdorf, and C. Gogolin. Quantum many-body systems out of equilibrium. *ArXiv e-prints*, August 2014.
- [Fan61] U. Fano. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. *Phys. Rev.*, 124:1866–1878, Dec 1961.
- [FAP15] Lucas J. Fernández-Alcázar and Horacio M. Pastawski. Decoherent time-dependent transport beyond the landauer-büttiker formulation: A quantum-drift alternative to quantum jumps. *Phys. Rev. A*, 91:022117, Feb 2015.
- [FGI96] V. V. Flambaum, G. F. Gribakin, and F. M. Izrailev. Correlations within eigenvectors and transition amplitudes in the two-body random interaction model. *Phys. Rev. E*, 53:5729–5741, Jun 1996.
- [FI01] V. V. Flambaum and F. M. Izrailev. Unconventional decay law for excited states in closed many-body systems. *Phys. Rev. E*, 64:026124, Jul 2001.
- [FL81] Daniel S Fisher and Patrick A Lee. Relation between conductivity and transmission matrix. *Physical Review B*, 23(12):6851, 1981.
- [FP06] E Rufeil Fiori and HM Pastawski. Non-markovian decay beyond the fermi golden rule: Survival collapse of the polarization in spin chains. *Chemical physics letters*, 420(1):35–41, 2006.
- [GLTZ10] S. Goldstein, L. J. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zanghì. Long-time behavior of macroscopic quantum systems. *The European Physical Journal H*, 35(2):173–200, 2010.

- [Haa13] Fritz Haake. *Quantum signatures of chaos*, volume 54. Springer Science & Business Media, 2013.
- [Hah50] Erwin L Hahn. Spin echoes. *Physical Review*, 80(4):580, 1950.
- [HGM⁺12] P. Haikka, J. Goold, S. McEndoo, F. Plastina, and S. Maniscalco. Non-markovianity, loschmidt echo, and criticality: A unified picture. *Phys. Rev. A*, 85:060101, Jun 2012.
- [HPK13] M. Heyl, A. Polkovnikov, and S. Kehrein. Dynamical Quantum Phase Transitions in the Transverse-Field Ising Model. *Physical Review Letters*, 110(13):135704, March 2013.
- [HPMZ96] Jonathan J Halliwell, Juan Pérez-Mercader, and Wojciech Hubert Zurek. *Physical origins of time asymmetry*. Cambridge University Press, 1996.
- [HW68] U. Haeberlen and J. S. Waugh. Coherent Averaging Effects in Magnetic Resonance. *Physical Review*, 175:453–467, November 1968.
- [IL99] Yoseph Imry and Rolf Landauer. Conductance viewed as transmission. *Rev. Mod. Phys.*, 71:S306–S312, Mar 1999.
- [JAB02] P. Jacquod, I. Adagideli, and C. W. Beenakker. Decay of the Loschmidt Echo for Quantum States with Sub-Planck-Scale Structures. *Physical Review Letters*, 89(15):154103, September 2002.
- [JP01] Rodolfo A. Jalabert and Horacio M. Pastawski. Environment-independent decoherence rate in classically chaotic systems. *Phys. Rev. Lett.*, 86(12):2490–2493, Mar 2001.
- [JP09] Ph. Jacquod and C. Petitjean. Decoherence, entanglement and irreversibility in quantum dynamical systems with few degrees of freedom. *Adv. in Phys.*, 58(6):67–196, 2009.
- [JSB01] Ph. Jacquod, P.G. Silvestrov, and C.W.J. Beenakker. Golden rule decay versus lyapunov decay of the quantum loschmidt echo. *Phys. Rev. E*, 64:055203, Oct 2001.
- [KJZ02] Zbyszek P. Karkuszewski, Christopher Jarzynski, and Wojciech H. Zurek. Quantum chaotic environments, the butterfly effect, and decoherence. *Phys. Rev. Lett.*, 89:170405, Oct 2002.
- [KS04] Hans Georg Krojanski and Dieter Suter. Scaling of decoherence in wide nmr quantum registers. *Phys. Rev. Lett.*, 93(9):090501, Aug 2004.
- [Lan57] Rolf Landauer. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of Research and Development*, 1(3):223–231, 1957.
- [LCO03] M. L. Ladron de Guevara, F. Claro, and P. A. Orellana. Ghost Fano resonance in a double quantum dot molecule attached to leads. *eprint arXiv:cond-mat/0302154*, February 2003.

- [Leb93] J. L. Lebowitz. Boltzmann's entropy and time's arrow. *Physics Today*, 46:32–38, September 1993.
- [Leb99] J. L. Lebowitz. Statistical mechanics: A selective review of two central issues. *Reviews of Modern Physics Supplement*, 71:346, March 1999.
- [Lin76] G. Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, 48:119–130, June 1976.
- [LPD90] P. R. Levstein, H. M. Pastawski, and J. L. D'Amato. Tuning the through-bond interaction in a two-centre problem. *Journal of Physics Condensed Matter*, 2:1781–1794, February 1990.
- [LSM61a] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Annals of Physics*, 16:407–466, December 1961.
- [LSM61b] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Annals of Physics*, 16:407–466, dec 1961.
- [LUP98] Patricia R. Levstein, Gonzalo Usaj, and Horacio M. Pastawski. Attenuation of polarization echoes in nuclear magnetic resonance: A study of the emergence of dynamical irreversibility in many-body quantum systems. *J. Chem. Phys.*, 108(7):2718–2724, 1998.
- [Mar93] Rudolph A. Marcus. Electron transfer reactions in chemistry. theory and experiment. *Rev. Mod. Phys.*, 65:599–610, Jul 1993.
- [MBSH⁺97] Z. L. Mádi, B. Brutscher, T. Schulte-Herbrüggen, R. Brüschweiler, and R. R. Ernst. Time-resolved observation of spin waves in a linear chain of nuclear spins. *Chem. Phys. Lett.*, 268(3-4):300 – 305, 1997.
- [MFK10] Andrey E. Miroshnichenko, Sergej Flach, and Yuri S. Kivshar. Fano resonances in nanoscale structures. *Rev. Mod. Phys.*, 82:2257–2298, Aug 2010.
- [Mun88] M. Munowitz. *Coherence and NMR*. Wiley, 1988.
- [NH14] R. Nandkishore and D. A. Huse. Many body localization and thermalization in quantum statistical mechanics. *ArXiv e-prints*, April 2014.
- [Nit06] Abraham Nitzan. *Chemical Dynamics in Condensed Phases: Relaxation, Transfer and Reactions in Condensed Molecular Systems: Relaxation, Transfer and Reactions in Condensed Molecular Systems*. OUP Oxford, 2006.
- [PAEI94] V. N. Prigodin, B. L. Altshuler, K. B. Efetov, and S. Iida. Mesoscopic dynamical echo in quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 72:546–549, Jan 1994.
- [Pas91] Horacio M. Pastawski. Classical and quantum transport from generalized landauer-büttiker equations. *Phys. Rev. B*, 44:6329–6339, Sep 1991.
- [Pas92] Horacio M. Pastawski. Classical and quantum transport from generalized landauer-büttiker equations. ii. time-dependent resonant tunneling. *Phys. Rev. B*, 46:4053–4070, Aug 1992.

- [Pas07a] H. M. Pastawski. Revisiting the Fermi Golden Rule: Quantum dynamical phase transition as a paradigm shift. *Physica B Condensed Matter*, 398:278–286, September 2007.
- [Pas07b] Horacio M Pastawski. Revisiting the fermi golden rule: Quantum dynamical phase transition as a paradigm shift. *Physica B: Condensed Matter*, 398(2):278–286, 2007.
- [PB02] Francesco Petruccione and Heinz-Peter Breuer. *The theory of open quantum systems*. Oxford Univ. Press, 2002.
- [Per84] Asher Peres. Stability of quantum motion in chaotic and regular systems. *Phys. Rev. A*, 30:1610–1615, Oct 1984.
- [PJ06] C. Petitjean and Ph. Jacquod. Quantum reversibility and echoes in interacting systems. *Phys. Rev. Lett.*, 97:124103, Sep 2006.
- [PLU95] Horacio M. Pastawski, Patricia R. Levstein, and Gonzalo Usaj. Quantum dynamical echoes in the spin diffusion in mesoscopic systems. *Phys. Rev. Lett.*, 75(23):4310–4313, Dec 1995.
- [PLU⁺00] H. M. Pastawski, P. R. Levstein, G. Usaj, J. Raya, and J. Hirschinger. A nuclear magnetic resonance answer to the boltzmann-loschmidt controversy? *Physica A*, 283(1-2):166 – 170, 2000.
- [PM01] H. M. Pastawski and E. Medina. ‘tight binding’ methods in quantum transport through molecules and small devices: From the coherent to the decoherent description. *eprint arXiv:cond-mat/0103219*, mar 2001.
- [PPV14] Carlos Pineda, Tomaž Prosen, and Eduardo Villaseñor. Two dimensional kicked quantum ising model: dynamical phase transitions. *arXiv preprint arXiv:1409.2915*, 2014.
- [PSSV11] Anatoli Polkovnikov, Krishnendu Sengupta, Alessandro Silva, and Mukund Vengalattore. *Colloquium: Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems*. *Rev. Mod. Phys.*, 83:863–883, Aug 2011.
- [PTM02] Horacio M. Pastawski, L.E.F. Foa Torres, and Ernesto Medina. Electronâphonon interaction and electronic decoherence in molecular conductors. *Chemical Physics*, 281(2â3):257 – 278, 2002.
- [QSL⁺06] H. Quan, Z. Song, X. Liu, P. Zanardi, and C. Sun. Decay of loschmidt echo enhanced by quantum criticality. *Phys. Rev. Lett.*, 96:140604, Apr 2006.
- [RF09] Elena Rufeil-Fiori. *Coherent dynamics of charge and spin excitations in one dimensional systems*. PhD thesis, Universidad Nacional de Cordoba, Argentina, 2009.
- [RFP06] E. Rufeil-Fiori and H. M. Pastawski. Non-markovian decay beyond the fermi golden rule: Survival collapse of the polarization in spin chains. *Chem. Phys. Lett.*, 420(1-3):35 – 41, 2006.

- [RFSO⁺09] E. Rufeil-Fiori, C. M. Sánchez, F. Y. Oliva, H. M. Pastawski, and P. R. Levstein. Effective one-body dynamics in multiple-quantum nmr experiments. *Phys. Rev. A*, 79(3):032324, Mar 2009.
- [RK71] Won-Kyu Rhim and Horst Kessemeier. Transverse-magnetization recovery in the rotating frame. *Physical Review B*, 3(11):3655, 1971.
- [Rot09a] I. Rotter. TOPICAL REVIEW: A non-Hermitian Hamilton operator and the physics of open quantum systems. *Journal of Physics A Mathematical General*, 42(15):153001, April 2009.
- [Rot09b] Ingrid Rotter. A non-hermitian hamilton operator and the physics of open quantum systems. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 42(15):153001, 2009.
- [RP09] E. Rufeil-Fiori and H. M. Pastawski. Survival probability of a local excitation in a non-Markovian environment: Survival collapse, Zeno and anti-Zeno effects. *Physica B*, 404:2812–2815, October 2009.
- [RPW70] W.-K. Rhim, A. Pines, and J. S. Waugh. Violation of the spin-temperature hypothesis. *Phys. Rev. Lett.*, 25:218–220, Jul 1970.
- [RPW71] W-K. Rhim, A. Pines, and J. S. Waugh. Time-reversal experiments in dipolar-coupled spin systems. *Phys. Rev. B*, 3:684–696, Feb 1971.
- [RS04] I. Rotter and A. F. Sadreev. Influence of branch points in the complex plane on the transmission through double quantum dots. *Phys. Rev. E*, 69:066201, Jun 2004.
- [RS05] I. Rotter and A. F. Sadreev. Zeros in single-channel transmission through double quantum dots. *Phys. Rev. E*, 71:046204, Apr 2005.
- [Sac11] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. April 2011.
- [SAN10] SN Shevchenko, Sahel Ashhab, and Franco Nori. Landau–zener–stückelberg interferometry. *Physics Reports*, 492(1):1–30, 2010.
- [SBI12] L. F. Santos, F. Borgonovi, and F. M. Izrailev. Chaos and statistical relaxation in quantum systems of interacting particles. *Phys. Rev. Lett.*, 108:094102, Mar 2012.
- [Sch07] M. Schlosshauer. *Decoherence and the Quantum-to-Classical Transition*. Springer Verlag, 2007.
- [SKV⁺14] M. J. A. Schuetz, E. M. Kessler, L. M. K. Vandersypen, J. I. Cirac, and G. Giedke. Nuclear spin dynamics in double quantum dots: Multistability, dynamical polarization, criticality, and entanglement. *Phys. Rev. B*, 89:195310, May 2014.
- [SLAC09] C. M. Sánchez, P. R. Levstein, R. H. Acosta, and A. K. Chattah. Nmr loschmidt echoes as quantifiers of decoherence in interacting spin systems. *Phys. Rev. A*, 80(1):012328, Jul 2009.

- [SLB⁺16] CM Sánchez, PR Levstein, L Buljubasich, HM Pastawski, and AK Chattah. Quantum dynamics of excitations and decoherence in many-spin systems detected with loschmidt echoes: its relation to their spreading through the hilbert space. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 374(2069):20150155, 2016.
- [Sli80] Charles P Slichter. *Principles of magnetic resonance; 2nd ed.* Springer series in solid state sciences. Springer, Berlin, 1980.
- [SPL07] C. M. Sánchez, H. M. Pastawski, and P. R. Levstein. Time evolution of multiple quantum coherences in NMR. *Physica B Condensed Matter*, 398:472–475, September 2007.
- [THVS14] E J Torres-Herrera, Manan Vyas, and Lea F Santos. General features of the relaxation dynamics of interacting quantum systems. *New Journal of Physics*, 16(6):063010, 2014.
- [UPL98] G. Usaj, H. M. Pastawski, and P. R. Levstein. Gaussian to exponential crossover in the attenuation of polarization echoes in NMR. *Molecular Physics*, 95:1229–1236, December 1998.
- [Usa99] Gonzalo Usaj. *Mesoscopic echoes and polarization echoes in NMR: a study about the spin excitation dynamics in interacting systems*. PhD thesis, Universidad Nacional de Cordoba, Argentina, 1999.
- [Wei78] G. Weinreich. *The Coupled Motions of Piano Strings*. Scientific American offprints. Freeman, 1978.
- [WGJP12] Diego Wisniacki, Arseni Goussev, Rodolfo Jalabert, and Horacio Pastawski. Loschmidt echo. *Scholarpedia*, 7(8):11687, 2012.
- [WR13] D. Wisniacki and A. Roncaglia. Sensitivity to perturbations and quantum phase transitions. *Phys. Rev. E*, 87:050902, May 2013.
- [WRP72] JS Waugh, W-K Rhim, and A Pines. Spin echoes and loschmidt’s paradox. *Pure and Applied Chemistry*, 32(1-4):317–324, 1972.
- [Zan15] Pablo R. Zangara. *El eco de Loschmidt en sistemas de espines: decoherencia, equilibraci3n, localizaci3n y mecanismos emergentes de irreversibilidad*. PhD thesis, Universidad Nacional de Cordoba, Argentina, 2015.
- [ZBLP16] Pablo R. Zangara, Denise Bendersky, Patricia R. Levstein, and Horacio M. Pastawski. Loschmidt echo in many-spin systems: contrasting time scales of local and global measurements. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 374(2069), 2016.
- [ZBP15] Pablo R. Zangara, Denise Bendersky, and Horacio M. Pastawski. Proliferation of effective interactions: Decoherence-induced equilibration in a closed many-body system. *Phys. Rev. A*, 91:042112, Apr 2015.
- [ZCC⁺09] Jingfu Zhang, Fernando M. Cucchietti, C. M. Chandrashekar, Martin Laforest, Colm A. Ryan, Michael Ditty, Adam Hubbard, John K. Gamble, and Raymond Laflamme. Direct observation of quantum criticality in ising spin chains. *Phys. Rev. A*, 79:012305, Jan 2009.

- [ZCP07] W. H. Zurek, F. M. Cucchietti, and J. P. Paz. Gaussian Decoherence and Gaussian Echo from Spin Environments. *Acta Phys. Pol. B*, 38:1685, May 2007. And references therein.
- [ZDI⁺13] Pablo R. Zangara, Axel D. Dente, Aníbal Iucci, Patricia R. Levstein, and Horacio M. Pastawski. Interaction-disorder competition in a spin system evaluated through the loschmidt echo. *Phys. Rev. B*, 88:195106, Nov 2013.
- [ZDLP12] Pablo R. Zangara, Axel D. Dente, Patricia R. Levstein, and Horacio M. Pastawski. Loschmidt echo as a robust decoherence quantifier for many-body systems. *Phys. Rev. A*, 86:012322, Jul 2012.
- [ZDTH⁺13] Pablo R. Zangara, Axel D. Dente, E. J. Torres-Herrera, Horacio M. Pastawski, Aníbal Iucci, and Lea F. Santos. Time fluctuations in isolated quantum systems of interacting particles. *Phys. Rev. E*, 88:032913, Sep 2013.
- [ZME92] Shanmin Zhang, B. H. Meier, and R. R. Ernst. Polarization echoes in nmr. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2149–2151, Oct 1992.
- [Zur81] W. H. Zurek. Pointer basis of quantum apparatus: Into what mixture does the wave packet collapse? *Phys. Rev. D*, 24:1516–1525, Sep 1981.
- [Zur82] W. H. Zurek. Environment-induced superselection rules. *Phys. Rev. D*, 26:1862–1880, Oct 1982.
- [Zur01] Wojciech Hubert Zurek. Sub-planck structure in phase space and its relevance for quantum decoherence. *Nature*, 412(6848):712–717, 2001.
- [Zur03] Wojciech Hubert Zurek. Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. *Rev. Mod. Phys.*, 75(3):715–775, May 2003.