UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

DEPARTAMENTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA, FÍSICA TÉRMICA Y ELECTRÓNICA



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

TRABAJO DE FIN DE GRADO

Código de TFG: ETE25

Caos y física estadística en sistemas cuánticos

Chaos and statistical physics in quantum systems

Supervisor/es: Armando Relaño Pérez

Claudia Greppi Mateos

Grado en Física

Curso académico 2025-2026

Convocatoria ordinaria de junio

Calificación: 9.5

Termalización y ruptura de simetrías discretas en sistemas cuánticos aislados

Resumen:

La hipótesis de termalización de autoestados (ETH, por sus siglas en inglés) es una teoría clave para comprender cómo los sistemas cuánticos aislados alcanzan el equilibrio termodinámico. Constituye el núcleo teórico de este trabajo, que se estructura en una parte teórica y una parte de experimentos numéricos realizados en un sistema físico.

En la primera parte, se analizan las dificultades a las que se enfrenta la física estadística a la hora de definir la ergodicidad, la termalización o el caos en sistemas cuánticos, conceptos fáciles de definir mediante la mecánica clásica. Se introduce la teoría de matrices aleatorias, el teorema ergódico cuántico y la ETH, que se aplican a este tipo de sistemas. Las hipótesis de la ETH, sin embargo, no son compatibles con el fenómeno de la ruptura de simetría, por lo cual se trabajará con una generalización adecuada para estudiar este fenómeno. La ruptura de simetría, que es un caso especial de degeneración, nos lleva a estudiar las transiciones de fase cuánticas, un fenómeno que ocurre exclusivamente en presencia de comportamiento cuántico.

La segunda parte del trabajo trata la aplicación directa de estos conceptos y teorías al modelo de Bose-Hubbard de dos pozos con condiciones de contorno periódicas, que tiene una simetría discreta de reflexión. Se estudia el espectro del hamiltoniano y la evolución temporal de un estado inicial con simetría rota, mediante un parámetro de orden. Se comprueba que en este sistema ocurre una ruptura espontánea de simetría, que lleva al incumplimiento de la ETH generalizada. Esta ruptura de simetría es causa de una transición de fase cuántica, de la que se ha determinado el punto crítico.

Abstract:

The Eigenstate Thermalization Hypothesis (ETH) is a fundamental theory for understanding how statistical quantum systems reach thermodynamic equilibrium. This hypothesis forms the theoretical core of this work, which is structured into a theoretical section a numerical experiments section carried out on a physical system..

In the first part, we analyze the difficulties encountered in statistical physics when defining ergodicity, thermalization, or chaos in quantum systems, concepts that are straightforward to define within classical mechanics. We introduce Random Matrix Theory, the Quantum Ergodic Theorem, and the ETH, which are applied to these types of systems. The assumptions of the ETH, however, are incompatible with the phenomenon of symmetry breaking; therefore, a suitable generalization will be employed to study this phenomenon. Symmetry breaking, which is a special case of degeneracy, leads us to the study of quantum phase transitions, a phenomenon that occurs exclusively in the presence of quantum behavior.

In the second part of the work these concepts and theories are applied to the two-site Bose-Hubbard model with periodic boundary conditions, which exhibits a discrete reflection symmetry. We study both the Hamiltonian spectrum and the temporal evolution of an initial symmetry-broken state, using an order parameter. The results confirm that spontaneous symmetry breaking occurs in this system, leading to a violation of the Generalized ETH. This symmetry breaking drives a quantum phase transition, for which the critical point has been determined.

Índice

1. Introducción **2**

2. Marco teórico **2**
2.1. Ergodicidad, caos y termalización en sistemas clásicos 2
2.2. Caos en sistemas cuánticos 3
2.3. Hipótesis de termalización de autoestados 5
2.4. Ruptura de simetría y ETH 6
2.5. Transiciones de fase clásicas y escalado de tamaño finito 8
2.6. Transiciones de fase cuánticas y ruptura de simetría 9
2.7. Modelo de Bose-Hubbard de 2 pozos 10

3. Objetivos y metodología de la simulación numérica **11**

4. Resultados de la simulación numérica **12**
4.1. Diagonalización del hamiltoniano 12
4.2. Evolución temporal de un estado inicial $|\psi_I\rangle$ 13
4.3. Cumplimiento de la ETH 15
4.4. Transición de fase cuántica 18

5. Conclusiones **19**

1. Introducción

La física estadística, que nace entre finales del siglo XIX y principios del siglo XX, es el puente indispensable entre la mecánica clásica o cuántica y la descripción termodinámica que existía previamente. Los hitos de esta rama de la física son innumerables y aplicables a múltiples tipos de sistemas, desde la ley de los gases ideales y la explicación de la conductividad térmica o eléctrica hasta aplicaciones en sistemas biológicos o redes neuronales.

La base conceptual de la física estadística la conforman nociones de sistemas complejos como caos y ergodicidad. Para los sistemas dinámicos clásicos, estos conceptos se investigaron y desarrollaron a partir del trabajo de importantes figuras como Poincaré o Lorenz. Quedó claro que el caos y la ergodicidad son indispensables para que los sistemas puedan ser descritos mediante la física estadística y se recuperen los resultados de la termodinámica. Pero estos conceptos, que están bien definidos mediante la mecánica clásica, son algo más difusos en mecánica cuántica.

La relación entre caos y ergodicidad y la dinámica cuántica a nivel microscópico es más sutil. La física estadística cuántica, aunque basada en la cuantización como la estadística de Bose-Einstein o de Fermi-Dirac, asume conceptos como la ergodicidad. Sin embargo, definirla y comprobarla en la dinámica cuántica no es evidente. No se puede hacer una analogía directa porque en estos sistemas es imposible trasladar conceptos como el espacio de fases, ya que no existe un análogo cuántico de la trayectoria. Además, la evolución temporal de los sistemas cuánticos se rige por la ecuación de Schrödinger, que es lineal, a diferencia de las ecuaciones de Newton de la mecánica clásica, que llevan de forma natural al comportamiento caótico de los sistemas. De este modo, la conexión entre dinámica y caos no surge de forma evidente. Eso obliga a desarrollar nuevas teorías para estudiar los sistemas complejos cuánticos. Entre estas teorías está la hipótesis de termalización de autoestados, que es el núcleo de este trabajo. En este marco se analizará un sistema concreto: el modelo de Bose-Hubbard de dos pozos con condiciones de contorno periódicas.

2. Marco teórico

2.1. Ergodicidad, caos y termalización en sistemas clásicos

Para poder trasladar al mundo cuántico los conceptos que fundamentan la física estadística, empezaremos por definirlos en sistemas clásicos, donde son más fáciles de entender.

La hipótesis de ergodicidad es de las primeras condiciones impuestas a la hora de trabajar de forma estadística. Según Boltzmann (1871) [1], un sistema ergódico es aquel que explora todas las regiones del espacio de fases permitidas por restricciones macroscópicas, sin preferencia. A tiempo infinito, pasará por cada región del espacio de fases permitida, con probabilidad proporcional al volumen de la región. La ergodicidad está estrechamente relacionada con la trayectoria en el espacio de fases, que se define por el microestado en el que está el sistema en cada instante de tiempo t. Un microestado implica posición y momento bien definidos para cada partícula que compone el sistema.

La ergodicidad está estrechamente relacionada con el concepto de caos. En el artículo de Edward Lorenz de 1963 [2], se define el caos como la fuerte sensibilidad de la evolución con respecto a las condiciones iniciales (aunque el término "caos" es posterior). Las trayectorias caóticas son no periódicas e inestables frente a pequeñas perturbaciones, por lo que un pequeño cambio en las condiciones iniciales generará una trayectoria completamente distinta al cabo de poco tiempo. Este fenómeno es lo que se conoce como efecto mariposa. En general, para que un sistema sea ergódico

es necesario que las trayectorias sean caóticas, ya que, de no ser así, explorarían solo una región acotada del espacio de fases. Hay algunas excepciones en las que ergodicidad no implica caos, pero, por lo general, van de la mano. Para que haya caos el sistema tiene que ser no integrable, es decir, que el número de cantidades conservadas independientes debe ser menor que el número de grados de libertad.

Una excepción que tomará mucha relevancia en este trabajo son los sistemas unidimensionales. Si solo hay un grado de libertad, la conservación de la energía es suficiente para que el sistema sea integrable y por lo tanto no caótico. Sin embargo, en este caso especial, no es necesario que la trayectoria sea no periódica para que se pueda explorar todo el espacio de fases permitido a una cierta energía. Serán entonces sistemas que pueden ser ergódicos sin ser necesariamente caóticos. Podemos imaginar un péndulo simple, que explora todo el espacio de fases restringido por la energía dada, oscilando de forma periódica en torno a un valor de equilibrio.

Otro concepto fundamental será el de termalización, que es la relajación de un sistema a un estado de equilibrio. La termalización depende de las medidas de las variables termodinámicas en tiempos largos. En un sentido fuerte (*strong sense*), un sistema termaliza si el valor de cualquier observable en tiempos largos alcanza un valor de equilibrio y se queda cercano a este valor para la mayor parte de tiempos sucesivos. La termalización en sentido débil implica que el promedio a tiempos largos de los observables se relaja a un estado de equilibrio, pero no es necesario que se mantenga cerca de este a tiempos posteriores. La ergodicidad solo implica esta forma débil de termalización. No establece, por tanto, que las fluctuaciones en torno al valor de equilibrio tengan que ser necesariamente despreciables en tiempos largos, sino que es compatible con que el sistema oscile en torno al valor de equilibrio, como en el caso trivial del péndulo simple. Para que el sistema termalice en sentido fuerte se requiere necesariamente caos además de ergodicidad.

2.2. Caos en sistemas cuánticos

Antes de presentar la ETH es fundamental introducir el estudio estadístico de sistemas cuánticos. Como hemos mencionado anteriormente, al intentar trasladar los conceptos definidos en la sección 2.1 surgen dos problemas fundamentales.

En primer lugar, según la ecuación de Schrödinger, que es lineal, la superposición entre dos estados cuánticos distintos, bajo la evolución determinada por un mismo hamiltoniano, será constante con el tiempo. En mecánica clásica, el alejamiento exponencial entre trayectorias a partir de condiciones iniciales ligeramente distintas, propio de los sistemas caóticos, surge de forma natural a raíz de las ecuaciones de Newton, que son no lineales. El solapamiento no es un análogo adecuado para medir la distancia entre dos microestados distintos.

El segundo problema subyacente es que no tenemos un análogo de la trayectoria clásica. Según el principio de incertidumbre de Heisenberg no se puede determinar de forma exacta y simultánea la posición y el momento, así que no tiene sentido definir un espacio de fases y una trayectoria. En el límite semi-clásico la condición de cuantización de la trayectoria de una partícula es

$$\oint pdq = 2\pi\hbar n. \tag{2.1}$$

Pero está bien definida exclusivamente para trayectorias periódicas estables, que no es el caso de las caóticas. Hay que buscar otras formas de abordar el problema.

Alrededor de 1955 Wigner propuso una descripción radicalmente distinta de núcleos atómicos complejos. A partir de este trabajo se desarrolló la teoría de matrices aleatorias [3] [4] (RMT, del inglés *Random Matrix Theory*), completada posteriormente gracias a las aportaciones de Dyson.

Esta teoría renuncia a tratar de resolver el espectro de sistemas cuánticos complejos, centrándose en cambio en las propiedades estadísticas de los niveles. Según esta teoría, el hamiltoniano de estos sistemas, escrito en una base no afinada (es decir escogida de forma arbitraria), tendrá la forma de una matriz cuyas entradas serán números aleatorios. En vez de resolver un hamiltoniano concreto, se pueden estudiar sus propiedades estadísticas a través de las colectividades de matrices aleatorias que cumplan con las condiciones de simetría propias de ese sistema.

Esta teoría es válida para intervalos de energía pequeños, en los que la densidad de estados es constante, y se reduce a la siguiente expresión para los elementos de matriz de cualquier observable escritos en la base de autoestados hamiltoniano $O_{mn} = \langle E_m | O | E_n \rangle$, donde $|En\rangle$ es un autoestado de autoenergía E_n.

$$O_{mn} = \langle E_n | O | E_m \rangle \approx \widetilde{O}\delta_{mn} + \sqrt{\frac{\bar{O^2}}{\mathcal{D}}} R_{mn}, \tag{2.2}$$

donde $\widetilde{O}$ es la media de los autovalores del observable O, $\mathcal{D}$ es la dimensión del espacio de Hilbert y R_{mn} es una variable aleatoria, que tiene media nula y varianza igual a 1.

Anteriormente, en 1929 [5], von Neumann había propuesto el teorema ergódico cuántico, que establece que cualquier estado inicial, contenido en una cierta capa microcanónica de energía, evolucionará de tal forma de que el valor esperado de cualquier observable se relajará al valor predicho por la colectividad microcanónica y se mantendrá cercano a él en la mayoría de instantes posteriores. Sin embargo, parte de hipótesis que excluyen muchas situaciones físicas existentes, razón por la cual es necesario tratar qué condiciones físicas producen este comportamiento térmico.

Vamos a partir del análisis de la evolución temporal de un estado inicial $|\psi_I\rangle$ que, en la base de autoestados del hamiltoniano, tiene la siguiente forma:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n e^{-iE_n t} |E_n\rangle, \tag{2.3}$$

donde $C_n = \langle E_n | \psi_I \rangle$ y tomando $\hbar = 1$. Calculamos ahora el valor esperado de un observable en este estado dependiente del tiempo.

$$O(t) \equiv \langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle = \sum_{m,n} C_m^* C_n e^{i(E_m - E_n)t} O_{mn} = \sum_n |C_n|^2 O_{nn} + \sum_{m,n \neq m} C_m^* C_n e^{i(E_m - E_n)t} O_{mn}. \tag{2.4}$$

Ahora podemos hacer el promedio temporal del observable para tiempos largos

$$\bar{O} \equiv \lim_{t_0 \to \infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} dt O(t) = \sum_n |C_n|^2 O_{nn} + \lim_{t_0 \to \infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} dt \sum_{m,n \neq m} C_m^* C_n e^{i(E_m - E_n)t} O_{mn}. \tag{2.5}$$

Se observa que el término que va con los elementos diagonales no depende del tiempo, ya que el exponente es exactamente cero. Sin embargo, para el que va con los elementos no diagonales hay una dependencia respecto al tiempo, que no desaparece a menos que haya degeneración de niveles o ruptura de simetría. De esta forma, los términos diagonales serán constantes frente a la integración, mientras, al hacer la integral y el límite $t_0 \to \infty$ para los otros términos, su contribución se anulará. Si asumimos que no hay degeneración de ningún tipo, el valor al que se relaja entonces será el de la *diagonal ensemble* definido como

$$\bar{O} = \sum_n |C_n|^2 O_{nn}. \tag{2.6}$$

Es importante que, en muchos sistemas, la diferencia entre dos niveles energéticos consecutivos

disminuye al aumentar el tamaño del sistema, así que el tiempo de relajación puede llegar a ser muy largo, incluso de escalas mayores que la edad del Universo.

Si los elementos O_{nn} son iguales o muy parecidos entre sí para un mismo valor macroscópico de la energía, a partir de la ecuación (2.6), se ve que el promedio alcanza un mismo valor de equilibrio independientemente de los coeficientes C_n. En ese caso , cada estado inicial termalizaría. El *ansatz* RMT cumple esta condición, porque el valor esperado se reduce a $\widetilde{O}$ para cualquier estado inicial.

Sin embargo, la RMT tiene ciertas limitaciones a la hora de describir sistemas físicos realistas, puesto que, en estos, el valor microcanónico de termalización depende de la energía macroscópica del sistema. Además, según la RMT, las fluctuaciones, que están relacionadas con los elementos no diagonales, son independientes del observable medido, lo cual contradice las observaciones reales. Por lo tanto, hay más información en las matrices de los observables para sistemas físicos reales de la que la que el *ansatz* de la RMT está teniendo en cuenta.

2.3. Hipótesis de termalización de autoestados

La hipótesis de termalización de autoestados (ETH, del inglés *Eigenstate Thermalization Hypothesis*) surge como adaptación de la RMT a sistemas físicos reales. Al igual que esta teoría, se centra en estudiar la evolución de los observables, en lugar de tratar con las funciones de onda o matrices densidad.

El valor esperado de un observable en la colectividad microcanónica en una capa de energía E_0 y anchura ΔE (suficientemente pequeña para considerar E_0 constante pero suficientemente grande como para contener un número grande de estados $\mathcal{N} \gg 1$) se define como sigue:

$$O_{ME}(E_0) \equiv \frac{1}{\mathcal{N}_{E_0,\Delta E}} \sum_{\substack{\alpha \\ |E_0 - E_\alpha| < \Delta E}} O_{\alpha\alpha}. \tag{2.7}$$

Asumiremos inicialmente que no hay degeneración, por lo que el valor al que relaja un observable dependiente del tiempo $O(t)$ es el de la expresión (2.6). Para que la ecuación (2.6) y la (2.7) den el mismo resultado, los elementos diagonales deberán cumplir algunas condiciones. La hipótesis propuesta por Srednicki [6], que es lo que conocemos por ETH, es que los O_{nn} no fluctúan prácticamente entre autoestados con energías similares y que se cumple la siguiente propiedad

$$\langle E_n | \, O \, | E_n \rangle \approx O_{ME}(E_n). \tag{2.8}$$

De esta forma, para un estado inicial "estrecho" en energías y sin considerar degeneraciones, se cumple que $\bar{O} = O_{ME}(\bar{E})$. Esto se ve explícitamente en el *ansatz* con el que se formaliza la ETH, propuesto por Srednicki en 1994 [6], que describe los elementos de las matrices expresados en la base de autoestados del hamiltoniano.

$$O_{mn} = O_{ME}(\bar{E})\delta_{mn} + e^{-S(\bar{E})/2} f_O(\bar{E}, \omega) R_{mn}, \tag{2.9}$$

donde $\bar{E} \equiv (E_m + E_n)/2$, $\omega \equiv E_n - E_m$ y S(E) es la entropía termodinámica a energía E. Además, $O_{ME}(\bar{E})$ y $f_O(\bar{E}, \omega)$ son funciones suaves en su argumento, que dependen del observable considerado. R_{mn} es una variable aleatoria de media nula y varianza igual a 1, como en la RMT.

Se ve claramente que si las matrices tienen esta forma, el valor promedio dado por (2.6) no tendrá dependencia de los C_n de cada estado particular, pero sí que habrá dependencia respecto de la energía. Se cumplirá así el teorema de von Neumann. Además, según este *ansatz*, el valor de los elementos diagonales disminuye exponencialmente con la entropía microcanónica del sistema, que aumentará con la densidad de niveles. Esto asegura que el segundo término de (2.5) se anula, para

cualquier tamaño del sistema, incluso cuando aumenta la densidad de niveles al aumentar N.

Las dos limitaciones de la RMT se han solucionado. Se ha incluido la dependencia de la energía en los observables, ya que los términos diagonales dependen de $\bar{E}$. Además, los términos no diagonales, que están relacionados con las fluctuaciones, dependen de la función f_O que es distinta para cada observable considerado. Cabe destacar que este *ansatz* se reduce a (2.2) si restringimos el intervalo de energías lo suficiente como para que se pueda considerar $f_O(\bar{E}, \omega)$ constante.

2.4. Ruptura de simetría y ETH

Se dice que un hamiltoniano tiene una cierta simetría si bajo la acción de un operador S, de un cierto grupo de simetría unitario, sobre todo estado $|\psi\rangle$, el valor esperado del hamiltoniano no cambia. Esto implica que el hamiltoniano conmute con S, como se ve a continuación.

$$\begin{aligned}(\langle\psi| S^\dagger)H(S|\psi\rangle) = \langle\psi|\,(S^\dagger H S)\,|\psi\rangle) = \langle\psi|\,H\,|\psi\rangle \\ \rightarrow S^\dagger H S = H \rightarrow [S, H] = 0.\end{aligned} \tag{2.10}$$

Si un estado es simétrico bajo S, será entonces autoestado $|\alpha\rangle$ de este operador con autovalor $e^{i\alpha}$, que será una fase pura por ser S unitario.

$$S\,|\psi\rangle = e^{i\alpha}\,|\psi\rangle \;\rightarrow\; |\psi\rangle = |\alpha\rangle\,. \tag{2.11}$$

Las simetrías pueden ser de dos tipos distintos. Las simetrías continuas están asociadas a grupos de Lie y, por el teorema de Noether, definen ciertas corrientes conservadas y sus respectivas cargas. Las simetrías que cumple el hamiltoniano con el que se trabajará en este caso serán discretas, es decir, asociadas a grupos finitos.

Cuando un autoestado no es invariante bajo un operador de simetría S que sí que conmuta con el hamiltoniano, se dice que hay ruptura espontánea de simetría. Como medida de si un estado tiene simetría rota se define un parámetro de orden que indicaremos por M. Consiste en un operador cuyo valor esperado en cualquier autoestado de la simetría es nulo. Si $S\,|\alpha\rangle = e^{i\alpha}\,|\alpha\rangle$, entonces

$$\langle\alpha|\,M\,|\alpha\rangle = 0. \tag{2.12}$$

Además de cumplirse la anterior, para definir un buen parámetro de orden será un requerimiento que

$$M\,|\alpha\rangle = c\,|\beta\rangle\,, \tag{2.13}$$

donde $|\beta\rangle$ es otro autoestado de S, que además será ortogonal a $|\alpha\rangle$.

Si en un autoestado de energía se cumple $\langle E_n|\,M\,|E_n\rangle \neq 0$, la simetría de ese estado está rota y no podrá ser autoestado de S. Al aplicar S sobre este estado obtendremos necesariamente otro estado linealmente independiente. Este otro estado cumplirá

$$H(S\,|E_n\rangle) = S(H\,|E_n\rangle) = E_n(S\,|E_n\rangle). \tag{2.14}$$

Por lo tanto, también $S\,|E_n\rangle$ tiene que ser autoestado de H y debe tener la misma energía E_n. Hemos demostrado de esta forma que es necesaria la degeneración para que haya ruptura de simetría.

Esto también se puede formular de la siguiente forma. Si H y S conmutan, deben poder diagonalizarse en la misma base. En el caso de que el hamiltoniano no esté degenerado, la diagonalización será única y, por lo tanto, cualquier autoestado de éste será también autoestado de S. Para que exista una base en la que el hamiltoniano sea diagonalizable y sus estados no sean autoestados de

S, tiene que haber más de una base posible y, en consecuencia, degeneración en las autoenergías. Solo cuando haya degeneración podrá haber un estado estacionario en el que $\langle M \rangle$ se mantenga no nulo.

Es importante recordar que para obtener la ecuación (2.6) hemos asumido ausencia de degeneración. Si volvemos a la expresión del promedio temporal de un observable en función del tiempo (2.5) y asumimos una posible degeneración en las energías sobrevivirán más términos. Los términos que sobrevivirán estarán asociados a los subespacios degenerados. Por comodidad reescribiremos entonces la base del hamiltoniano como $|E_{n,\alpha}\rangle$, donde la etiqueta n indica la autoenergía E_n y la $\alpha = 1, ..., d_n$ se asocia al autovalor de S. d_n indica el número de autovalores distintos de S, es decir la dimensión del subespacio formado por la envolvente lineal de los autoestados con la misma E_n.

Esta base escogida es general, incluso si no hubiese ruptura de simetría. En este caso, la única diferencia es que $E_{n,\alpha} \neq E_n, \beta$ si $\alpha \neq \beta$, pero tomando los subespacios con energías cercanas tendremos $|E_{n,\alpha} - E_{n,\beta}|$ pequeño.

Una vez definida la base de esta forma, podemos reescribir la ecuación (2.5).

$$\bar{O} = \sum_n \left\{ \sum_\alpha |C_{n,\alpha}|^2 O^{(n)}_{\alpha,\alpha} + \sum_{\alpha,\beta\neq\alpha} C^*_{n,\alpha} C_{n,\beta} O^{(n)}_{\alpha,\beta} \right\} + \lim_{t_0\to\infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} dt \sum_{m,n\neq m} \sum_{\alpha,\beta\neq\alpha} C^*_m C_n e^{i(E_m - E_n)t} O_{mn}. \tag{2.15}$$

Ahora distinguimos tres términos. El primero está asociado a los elementos diagonales del operador en la nueva base, donde $O^{(n)}_{\alpha,\alpha} = \langle E_{n,\alpha}| O |E_{n,\alpha}\rangle$. El segundo término está asociado a los términos no diagonales pero asociados a un mismo subespacio $O^{(n)}_{\alpha,\beta} = \langle E_{n,\alpha}| O |E_{n,\beta}\rangle$ con $\alpha \neq \beta$. En estos términos $e^{i(E_{n,\alpha} - E_{n,\beta})t} = 1$, porque al haber degeneración la diferencia se anula. El promedio a tiempos largos de los demás términos seguirá siendo nulo como para la ETH normal y tenemos entonces que el valor de relajación será

$$\bar{O} = \sum_n \left\{ \sum_\alpha |C_{n,\alpha}|^2 O^{(n)}_{\alpha,\alpha} + \sum_{\alpha,\beta\neq\alpha} C^*_{n,\alpha} C_{n,\beta} O^{(n)}_{\alpha,\beta} \right\}. \tag{2.16}$$

Esta expresión la podemos simplificar más si escogemos para cada subespacio n una base en la que M sea diagonal, $\left|E'_{n,\alpha}\right\rangle$. Reescribiendo los coeficientes del estado inicial en esta base $C'_n = \left\langle E'_{n,\alpha}|\psi_I\right\rangle$, la matriz tendrá como elementos diagonales sus autovalores $\lambda^{(O)}_{n,\alpha}$ y los elementos fuera de la diagonal serán nulos, así que la expresión (2.16) se simplifica a

$$\bar{O} = \sum_n \left\{ \sum_\alpha |C'_{n,\alpha}|^2 \lambda^{(O)}_{n,\alpha} \right\}. \tag{2.17}$$

De esta forma observamos que la evolución del observable depende solo de sus autovalores en cada subespacio n.

La ETH generalizada al caso de ruptura de simetría se resume en dos condiciones para que un sistema termalice al valor microcanónico [7]. Es necesario incluir todas las degeneraciones posibles en la definición de los subespacios n.

$$\max_n \Delta^T_n \equiv \max_n \frac{|\frac{T^{(O)}_n}{d_n} - O_{ME}(E)|}{\eta_O} \xrightarrow{N\to\infty} 0 \tag{2.18}$$

$$\max_{n,\alpha} \Delta^{\lambda}_{n,\alpha} \equiv \max_{n,\alpha} \frac{|\lambda^{(O)}_{n,\alpha} - \frac{T_n}{d_n}|}{\eta_O} \xrightarrow{N\to\infty} 0, \tag{2.19}$$

donde $T_n^{(O)}$ es la traza del operador O en el subespacio n definido como anteriormente $\text{lin}\{|E_{n,\alpha}\rangle\}$ de dimensión d_n, η_O es el espectro del operador y $\lambda^{(O)}_{n,\alpha}$ son los autovalores de O en ese subespacio.

Es importante tener en cuenta que la ruptura de simetría es un fenómeno de degeneración en el límite termodinámico, por eso aparece $N \to \infty$ en estas expresiones. El límite termodinámico (LT) es cuando el tamaño del sistema, es decir, cualquier magnitud extensiva N,V tiende a infinito, manteniendo las magnitudes intensivas fijas. De hecho, la ruptura de simetría implica una degeneración que se hace exacta solo en el LT, aunque al aumentar N se irá aproximando a ser exacta.

Para el parámetro de orden, las expresiones (2.18) y (2.19) se simplifican. El valor esperado M_{ME} será igual a 0, ya que es la traza total de la matriz de M en un espacio con una base de autoestados de S. Además, la traza en cada subespacio será $T_n^{(M)} = 0$, porque también en cada subespacio tenemos una base posible de autoestados de S. En dicha base es evidente que los elementos diagonales de M serán nulos, así que, como la traza es invariante bajo cambio de base del subespacio, se mantendrá nula.

La ecuación (2.18) se cumplirá siempre. Además, como $T_n^{(M)} = \sum_\alpha \lambda^{(M)}_{n,\alpha}$, se podrá comprobar que la suma de los autovalores de M en el subespacio n será nula. Si los autovalores cumplen la (2.19), el promedio seguirá siendo nulo independientemente del estado inicial, por lo que $\bar{M}$ se relajará al valor esperado de la colectividad microcanónica. Si los autovalores no cumplen (2.19) habrá ruptura de simetría en alguna región del espectro y será posible la relajación a un valor no nulo, como se ve a partir de la expresión (2.17).

2.5. Transiciones de fase clásicas y escalado de tamaño finito

En sistemas clásicos estamos familiarizados con el concepto de transición de fase y hay múltiples ejemplos fácilmente observables, como la evaporación del agua o la transición entre ferromagnetismo y paramagnetismo. Una transición de fase sucede cuando en un sistema cambian de forma brusca sus propiedades termodinámicas, al variar algún parámetro termodinámico. Cada fase estará caracterizada por unas propiedades distintas, aunque no haya cambiado la composición microscópica ni el hamiltoniano del sistema.

Hay varios tipos de transiciones de fase y varias formas de clasificarlas, aunque presentaremos la clasificación más extendida. Cuando durante la transición hay dos fases distintas que coexisten, como en el ejemplo del agua del estado sólido al líquido, se denomina transición de fase de primer orden y está caracterizada por un calor latente, que es la energía necesaria para pasar de una fase a la otra. La otra categoría son las transiciones continuas, en las que no hay coexistencia de fases y la transición sucede simultáneamente en todo el sistema. En este tipo de transiciones las primeras derivadas del potencial termodinámico no tienen una discontinuidad, mientras algunas magnitudes termodinámicas divergen. Además este tipo de transiciones ocurren a una determinada temperatura crítica T_c.

Para describir las transiciones de fase es útil definir un parámetro de orden, generalmente indicado por ϕ. Este parámetro tomará un valor distinto de cero y no único en la fase ordenada (con $T < T_c$) y será exactamente cero en la fase desordenada ($T > T_c$).

Ciertas magnitudes termodinámicas, cuando la temperatura se acerca a la crítica, divergen según leyes de potencia de la forma $O \propto |T - T_c|^{x_O}$, donde x_O será denominado exponente crítico.

Habrá diferentes exponentes críticos en función de qué magnitud se mida y existirán relaciones entre ellos, ya que derivan del mismo potencial termodinámico.

Es importante tener en cuenta que las transiciones de fase clásicas son un fenómeno de los sistemas en el LT. En general, las simulaciones de los sistemas tienen la limitación que, al aumentar el tamaño, aumenta el tiempo de la simulación, por lo que no sería posible tomar $N \to \infty$. Mediante la teoría del escalado de tamaño finito, *Finite Size Scaling* (FSS) en inglés, podemos llegar a conclusiones sobre el comportamiento en el LT a través de sistemas finitos.

La teoría FSS surge a partir de la idea de que la longitud de correlación (distancia a la cual las fluctuaciones dejan de estar correlacionadas) en el punto crítico diverge, por lo que estará limitada por el tamaño del sistema. Para cualquier magnitud que diverja en el LT de la forma $O \propto |T - T_c|^{x_O}$ se propone el *ansatz* $O(T) = L^{x_O/\nu} \cdot f_O(L/\xi_\infty)$ (válido para L grande). L es el tamaño del sistema, ν es el exponente crítico relacionado con la longitud de correlación y ξ_∞ es la longitud de correlación en el LT. f_O es una función analítica cercana a cero. La forma funcional de esta funcione es universal y queda determinada exclusivamente por la clase de universalidad, el observable que estemos considerando y las condiciones de contorno impuestas al sistema. La relación entre las magnitudes y el tamaño del sistema permitirá calcular los exponentes críticos.

Se puede usar la FSS de dos formas distintas para calcular los exponentes críticos. La primera es realizando varias simulaciones en T_c, variando el tamaño del sistema. La otra es mediante el desplazamiento del punto crítico aparente, el fenómeno predicho por la FSS que se explica a continuación. Si se hace una simulación variando la temperatura, se observará un punto en el que cambia repentinamente el comportamiento o se observa un máximo si se trata de una magnitud que diverge en el LT. A esto lo llamamos punto crítico aparente, porque no ocurre exactamente en T_c. Según aumentamos el tamaño del sistema se irá acercando al punto crítico, por eso hablamos de desplazamiento, que seguirá una ley de potencias derivable a partir del *ansatz* de la FSS.

$$T_{c,aparente} = A \cdot L^{-1/\nu} + T_c, \tag{2.20}$$

donde A es una constante de proporcionalidad. De esta forma, sin conocer previamente el punto crítico, se podrá realizar un ajuste y obtener ν y T_c.

Uno de los motivos por los que pueden ocurrir las transiciones de fase es la ruptura espontánea de alguna simetría del hamiltoniano, lo cual significa que el estado al que termaliza el sistema no es simétrico mientras las ecuaciones sí que lo son. El sistema se queda confinado en una cierta región del espacio de fases y deja de ser ergódico.

2.6. Transiciones de fase cuánticas y ruptura de simetría

Las transiciones de fase clásicas que hemos descrito en la sección anterior, ocurren al variar la temperatura del sistema y aproximarse a T_c, que será mayor que $0K$. Sin embargo, pueden ocurrir transiciones de fase al cambiar otras variables termodinámicas.

Un tipo muy distinto de transiciones de fase son las que ocurren a temperatura $T = 0K$, al variar otro parámetro. En este caso, no hay fluctuaciones térmicas, así que la transición de fase se deberá exclusivamente a las propiedades cuánticas del sistema. Según la distribución de Boltzmann, que pesa los estados con una probabilidad dada por e^{E/k_BT}, a temperatura nula, el único estado significativamente poblado será el fundamental.

Las transiciones de fase cuánticas pueden parecer fenómenos puramente académicos, ya que suceden a $T = 0K$, que según el tercer principio de la termodinámica es imposible de alcanzar. Sin embargo, sus efectos son muy importantes para describir fenómenos físicos, porque cobran impor-

tancia a temperaturas bajas, cuando el orden de las escalas típicas de energía $\hbar\omega_c$ son de magnitud comparable a la energía térmica k_BT. El estado fundamental estará muy poblado respecto al resto, así que el comportamiento térmico estará influenciado por las fluctuaciones cuánticas. En estos últimos años, el estudio de las transiciones de fase cuánticas ha adquirido mucha relevancia a la hora de explicar fenómenos de materia condensada, como el efecto Hall cuántico o la superconductividad.

Como hemos comentado antes, uno de los motivos por los cuales ocurren las transiciones de fase es la ruptura de simetría. Una de las dos fases, la más ordenada, está caracterizada por la pérdida de una cierta simetría que, en cambio, el hamiltoniano mantiene. La transición cuántica ocurrirá cuando en el estado fundamental se rompa la simetría, pasando de una fase desordenada a otra más ordenada.

Para analizar la ruptura de simetría hemos definido en la sección 2.4 el parámetro de orden M. Para que el parámetro de orden tenga un valor esperado no nulo, tiene que haber degeneración, como se ha demostrado anteriormente. Podremos pasar a describir la transición de fase mediante el *gap* energético entre las dos primeras autoenergías del hamiltoniano Δ. Variando un parámetro del hamiltoniano se observará que el *gap* va a cero y, por lo tanto, el parámetro de orden podrá ser distinto de cero.

Aunque son estructuralmente muy distintas de las transiciones de fase clásicas, podemos aplicar algunos conceptos. Como las simulaciones realizadas serán de tamaño finito, será interesante trasladar la FSS al caso cuántico (sección 4.4).

Ahora el parámetro que indica dónde ocurre la transición ya no es la temperatura T, sino uno de los parámetros del hamiltoniano, U. Además, tamaño del sistema utilizaremos N en vez de L. De esta forma, a partir de la ecuación (2.20) podemos proponer que el punto crítico aparente, indicado por $U_{c,aparente}$, se desplace según la ley de potencias análoga

$$U_{c,aparente} = A \cdot N^{-1/\tilde{\nu}} + U_c, \tag{2.21}$$

donde $\tilde{\nu}$ es distinto en general de ν.

2.7. Modelo de Bose-Hubbard de 2 pozos

En este trabajo se realizará una simulación del modelo de Bose-Hubbard de 2 pozos con condiciones periódicas, con el fin de analizar su comportamiento termodinámico y relacionarlo con la ETH. Es un modelo de bosones indistinguibles que pueden ocupar dos pozos idénticos. El hamiltoniano del sistema es el siguiente:

$$H = -2J\left(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2 \hat{a}_1^\dagger\right) + \frac{U}{N}\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \frac{U}{N}\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2, \tag{2.22}$$

donde $\hat{a}_i^\dagger$,$\hat{a}_i$ son los operadores de creación y destrucción bosónicos en el pozo i. J es el parámetro relacionado con el intercambio de partículas entre pozos y U determina la intensidad de la atracción o repulsión entre partículas en un mismo pozo. Para $U > 0$ el potencial será repulsivo, mientras para $U < 0$ atractivo.

Se cumple que el número de bosones en el pozo i será igual a $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$. El número total de bosones $N = \sum_i \hat{n}_i = \hat{n}_1 + \hat{n}_2$ será una cantidad conservada, puesto que $[H, N] = 0$. Nosotros trabajaremos con el espacio de Fock de estados con N fijo y $\hat{n}_1$ bien definido. Utilizaremos la base $\{|n_1, N - n_1\rangle\}$ donde $n_1 = 0, ..., N$ para definir las matrices.

Este hamiltoniano tiene una simetría respecto al operador reflexión $\hat{R}$, es decir, el intercambio entre los pozos 1 y 2. Para analizar la ruptura de esta simetría se define el parámetro de orden I,

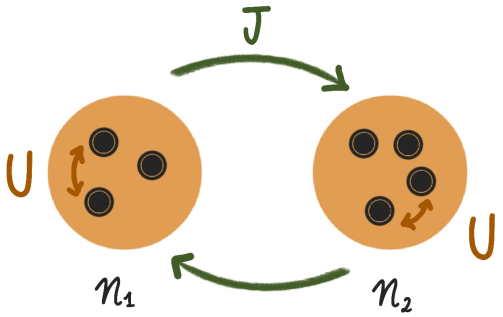


Figura 1: Esquema del modelo de Bose-Hubbard con 2 pozos y condiciones de contorno periódicas. Aparecen los parámetros de corriente J y el de interacción U. Además, están indicados los números de ocupación n_1 y n_2.

llamado *imbalance*.

$$\hat{I} = \hat{n}_1 - \hat{n}_2. \tag{2.23}$$

Al ser parámetro de orden cumplirá que, en los autoestados de $\hat{R}$, el valor esperado de I será nulo ($\left\langle \hat{I} \right\rangle = 0$). Si el valor esperado de $\hat{I}$ es no nulo, el estado está caracterizado por un desequilibrio entre las poblaciones de los dos pozos. En caso de que no haya degeneración, los autoestados de energía deberían tener los dos pozos poblados por igual. Cuando la simetría se rompa, en los subespacios de energía degenerada definidos en la sección 2.4 los autovalores $\lambda^{(I)}_{n,\alpha}$ tomarán valores no nulos, como hemos explicado en la sección 2.4.

En el caso particular de este modelo, el operador de simetría será involutivo, es decir $\hat{R}^2 = \mathbb{1}$. Será por lo tanto el grupo de simetría $\mathbb{Z}_2$, que tiene este único elemento distinto de la identidad. Tiene por lo tanto solo dos autovalores posibles ± 1 y los subespacios degenerados serán de dimensión $d_n = 2$.

Es importante tener en cuenta que este modelo tiene un análogo clásico. Como solo depende de un parámetro n_1, el análogo clásico será unidimensional y por tanto integrable. Podemos predecir que la ETH no se cumplirá de forma estricta y no se podrá hablar de termalización en un sentido fuerte tampoco. Sin embargo, se podrá observar termalización en el sentido débil y analizar el mecanismo de ruptura de simetría.

3. Objetivos y metodología de la simulación numérica

La siguiente sección de este trabajo estará dedicada al análisis de los experimentos númericos sobre el modelo de Bose-Hubbard de dos pozos. El objetivo será aplicar la ETH a un modelo concreto para profundizar sobre su funcionamiento. En particular, se ha escogido un modelo con una cierta simetría para buscar una zona del espectro donde ésta se rompa. Se analizará la ruptura de simetría en el marco de la ETH generalizada y se estudiará también como motivo de una transición de fase.

Para observar la ruptura de simetría y el funcionamiento de la ETH es necesario acercarse al límite termodinámico ($N \to \infty$). Cuando el tamaño del sistema aumenta, las dimensiones del espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ también ($\dim \mathcal{H} = N + 1$) Por este motivo, será necesaria una simulación numérica.

El diseño y la selección de los experimentos escogidos para analizar el sistema ha sido creado de forma autónoma tomando como artículo principal de referencia [7]. Todos los códigos han sido

realizados en *Python* desde cero, también de forma autónoma.

4. Resultados de la simulación numérica

4.1. Diagonalización del hamiltoniano

Lo primero que se ha hecho es diagonalizar el hamiltoniano, encontrando autovalores y autovectores, ya que la ETH (2.9) trabaja con operadores en la base de autoestados del hamiltoniano. Para verificar las condiciones de la ETH generalizada (2.18) y (2.19) también son necesarios los autovalores del operador de orden en los subespacios degenerados.

Los términos atractivos del hamiltoniano son directamente diagonales en el espacio de Fock, pero los términos que van acompañados por la J son no nulos por encima y por debajo de la diagonal. En el espacio de Fock $|n_1 = i\rangle$ con $i = 0, ..., N$ será tridiagonal.

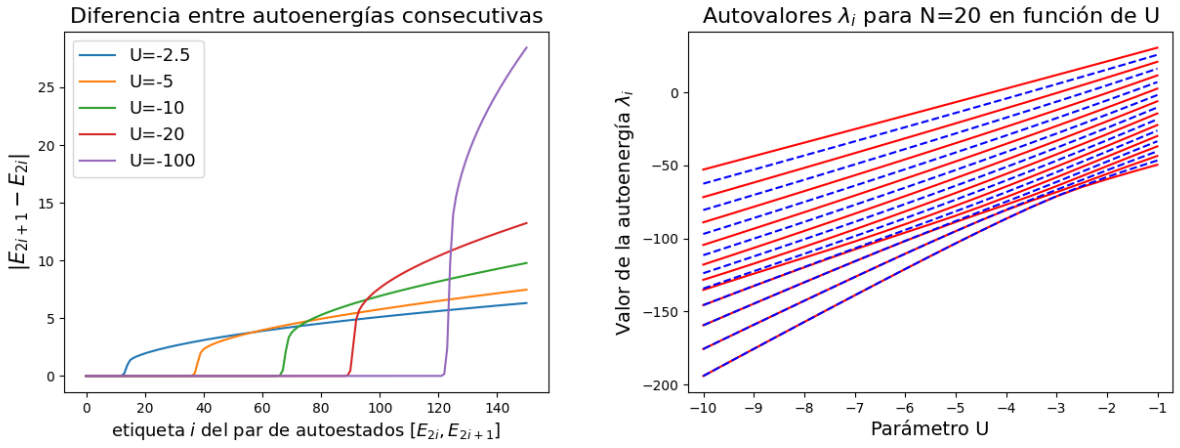
$$H_{i,i} = \frac{U}{N}\left[n_1(n_1-1) + (N-n_1)(N-n_1-1)\right] \tag{4.1}$$

$$H_{i+1,i} = -2J\sqrt{N-n_1}\sqrt{n_1+1} \tag{4.2}$$

$$H_{i-1,i} = -2J\sqrt{n_1}\sqrt{N-n_1+1}. \tag{4.3}$$

En realidad, U y J no son independientes, porque un factor de escala no alteraría cualitativamente los resultados, por lo que tomaremos $J = 1$ y dejaremos variable U.

Al diagonalizar, para ciertos valores del parámetro U, se observa que el espectro se divide en dos zonas. En una de ellas aparecerá una cuasi degeneración entre pares de autoestados, que se corresponde a la ruptura de simetría en el LT. Para valores finitos de N no es una degeneración exacta, pero la distancia entre las dos autoenergías emparejadas disminuye al aumentar el tamaño de N, haciéndose exacta en el LT.



(a) (b)

Figura 2: Gráficas para analizar el espectro del hamiltoniano al variar U. En (a) se muestra la separación entre autoenergías consecutivas en todo el espectro para varios valores de U y $N = 301$. En (b) se muestra cómo varían de los autovalores para $N = 20$ respecto al parámetro U.

Para un valor de N bajo ($N = 20$) se pueden representar todas las autoenergías variando el parámetro U (figura 2(b)). Conforme se aumenta el valor absoluto de U, la interacción atractiva

entre los bosones que están en un mismo pozo adquiere mayor importancia en el hamiltoniano. Cuando pasa un cierto umbral, que define un punto crítico, los estados de mínima energía rompen la simetría de paridad. La atracción entre las partículas de los pozos vence al término que permite que las partículas salten de un pozo a otro. En el estado de mínima energía, por lo tanto, se quedan confinadas en uno de los dos pozos y la simetría se rompe. Si se sigue aumentando la interacción U, cada vez un rango más amplio de autoenergías cumplirá esta condición. Aunque N sea pequeño, ya es suficiente para observar la degeneración.

Para que el análisis sea lo más general posible, buscaremos un valor de U para el que el espectro de energías se divida en una zona con ruptura de simetría y otra sin degeneración. Por lo tanto, como se ve en la figura 2(a), representaremos la diferencia entre autoenergías $E_{2i+1} - E_{2i}$ frente a $i = 0, ..., N/2$, que etiqueta el par dentro del espectro, para distintos valores de U. Esto nos aclarará si se ordenan por pares degenerados. Se vuelve a comprobar que para U más negativas la degeneración ocurrirá en mayor parte del espectro.

Para la figura 2(a) tomaremos $N = 301$. En este caso y en la mayor parte del trabajo se han tomado valores impares de N para que el espacio de Hilbert, que tiene $\dim \mathcal{H} = N + 1$, tenga dimensión par y se pueda hacer un número exacto de pares de estados.

Aunque la degeneración de la ruptura de simetría es exacta solo en el LT, a todos los efectos se puede considerar que lo es. Esto se debe a que el periodo de las oscilaciones será $T = 2\pi/(E_m - E_n)$, por lo que, si la diferencia entre dos autoenergías consecutivas es muy pequeña, el periodo se hará muy largo (ver la ecuación 2.4). Si la cuasi degeneración entre E_m y E_n genera oscilaciones de periodos larguísimos, incluso mayores que la edad del Universo, a todos los efectos se podrá considerar una degeneración exacta y cualquier combinación entre $|E_m\rangle$ y $|E_n\rangle$ se podrá tomar como autoestado. El ordenador tiene una precisión finita a partir de la cual no distingue entre dos números. Por tanto, el programa de diagonalización generará espontáneamente autoestados que serán combinación lineal y podrán ser no simétricos.

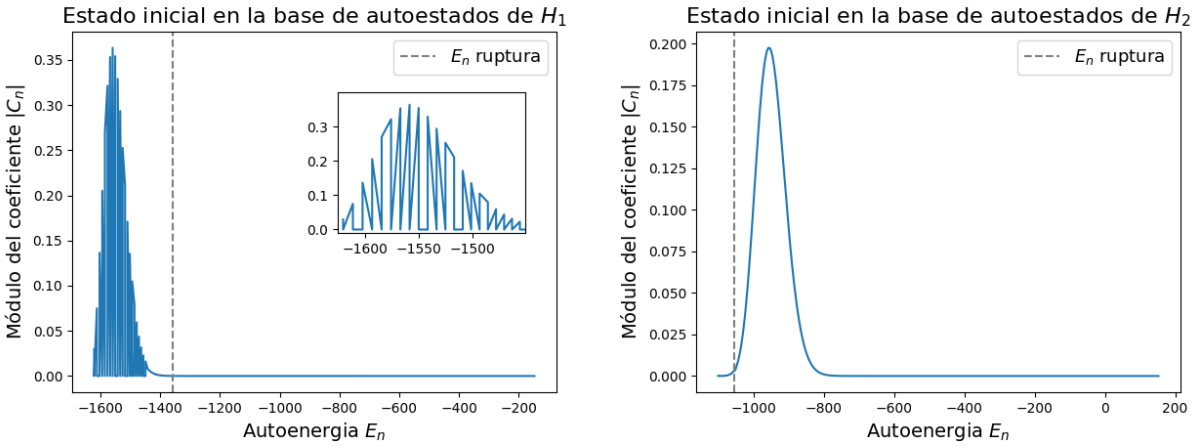
4.2. Evolución temporal de un estado inicial $|\psi_I\rangle$

Para ver el estado de relajación y comprobar si tiende o no al valor microcanónico, calcularemos la evolución temporal del valor esperado del operador de orden. Para ello, será necesario definir la matriz I. En la base de Fock, I es directamente diagonal con autovalores $\lambda^{(I)} = 2n_1 - N$. Para calcular la evolución temporal, dada por (2.3), se necesitarán primero los coeficientes del estado inicial en la base de autoestados del hamiltoniano de evolución $C_n = \langle E_n|\psi_I\rangle$.

Para evitar que el estado inicial sea ya simétrico y que termalice al valor microcanónico por casualidad, prepararemos un estado inicial que tenga específicamente la simetría rota. Para ello diagonalizaremos un hamiltoniano con un $U = -20$ ($N = 301$ en toda esta sección) y tomaremos una combinación lineal de los dos estados fundamentales casi degenerados $\left|E_0^+\right\rangle$ y $\left|E_0^-\right\rangle$ que tenga simetría rota. Es necesario escoger un valor de U para el que el estado fundamental esté degenerado (se compueba para $U = -20$ en la figura 2(a)). Como el ordenador no es capaz de distinguir entre autoenergías, el estado fundamental devuelto directamente por el programa por lo general será ya una combinación lineal. Sin embargo, hay que comprobar que tenga efectivamente la simetría rota que estamos buscando.

Posteriormente calcularemos la evolución con un hamiltoniano con valor de U menos negativo. Este procedimiento, llamado *quantum quench*, consiste en un aumento brusco de la energía del sistema, disminuyendo la atracción entre bosones, para sacar del equilibrio al estado inicial. Según la magnitud de este salto en U, se mantendrá esta simetría rota o no.

Se han escogido dos hamiltonianos distintos, el primero con $H_1 = H(U = -5)$ y el segundo con $H_2 = H(U = -3)$. Para $U = -5$ la atracción entre bosones será todavía muy significativa y eso se reflejará en que una buena parte del espectro seguirá degenerada, mientras para $U = -3$ el término de corriente será más relevante y la degeneración mucho menos evidente. En el primer caso estamos dando un golpe menos brusco en la energía del sistema que en el segundo.



(a) (b)

Figura 3: Estado inicial en la base de autoestados de los distintos hamiltonianos de evolución

En la figura 3 están representados los valores absolutos de los coeficientes del estado inicial en la base de autoestados de cada uno de los hamiltonianos de evolución $C_n = \langle E_n|\psi_I\rangle$. Además aparece una línea gris discontinua que indica aproximadamente en qué punto del espectro ocurre la ruptura de simetría.

Para H_1 ($U = -5$) se observa que los estados mayormente poblados están en la región en la que el hamiltoniano tiene simetría rota, por lo que se esperará que se mantenga así durante la evolución. Además, se puede notar que la población en los estados no es continua, sino que hay claramente niveles completamente despoblados entre otros significativamente poblados. Esto es consistente con el hecho de que el programa calcula estados que son combinación lineal de los simétricos, que tendrán por lo general simetría rota. Por cada subespacio de E_n degenerada, uno de los estados debe mantener un valor esperado de I positivo y el otro negativo para que la traza se mantenga nula. Si el estado inicial tiene cierto desequilibrio en la población de los pozos respecto a uno de ellos, este desequilibrio se tiene que ver reflejado también en la base del nuevo hamiltoniano. Como por cada subespacio habrá un único autoestado con el desequilibrio hacia el mismo lado, solo un autoestado por cada subespacio se verá poblado de forma significativa.

En el caso de H_2, como se ve en la figura 3(b), los estados poblados están mayoritariamente en la zona del espectro a la derecha de la línea gris, que se corresponde a la zona térmica, sin degeneraciones. También se observa que, en comparación con el caso anterior todos los estados están poblados de forma continua. Es coherente con el hecho de que en esta zona todos los autoestados mantendrán la simetría intacta y no habrá productos entre dos con desequilibrio opuesto, que anulen completamente ciertos coeficientes con E_n dentro de una región poblada.

La evolución del parámetro de orden en función del tiempo se observa en la figura 4 para ambos hamiltonianos. También se observa en los paneles (c) y (d) los promedios de $I(t)$, calculados según la definición (2.5). En el caso de H_1 la simetría rota se mantiene: el valor de I fluctúa en torno a -255 y el promedio se estabiliza también en ese valor. Uno de los pozos estará mucho más poblado que el otro. En el rango de tiempos medido no se ve una disminución de las fluctuaciones por lo

que no se puede concluir que alcance ese estado estacionario libre de fluctuaciones. $\langle I \rangle$ se relaja hacia un cierto valor, que no coincide con el microcanónico, y el promedio se estabiliza pero $I(t)$ no se mantiene cerca de éste en la mayor parte de tiempos sucesivos.

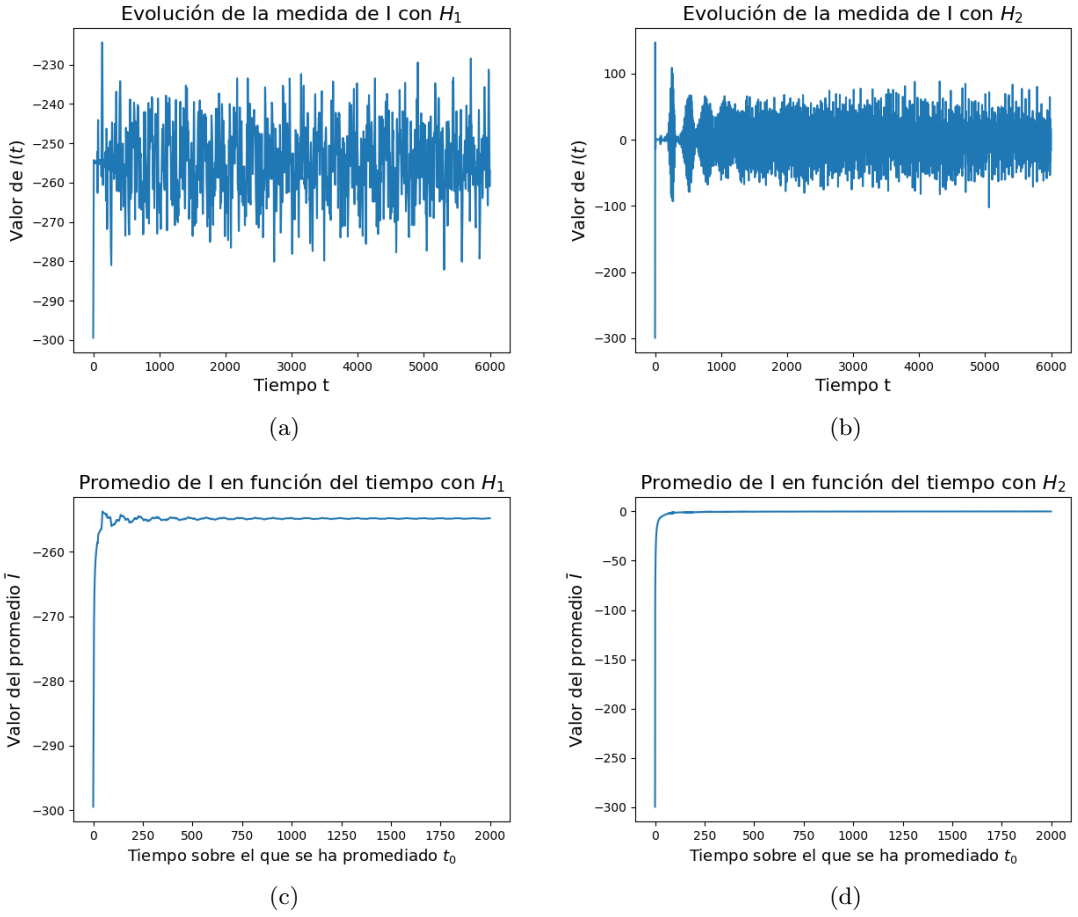


Figura 4: Evolución temporal y promedios de los observables mediante los dos hamiltonianos de evolución.

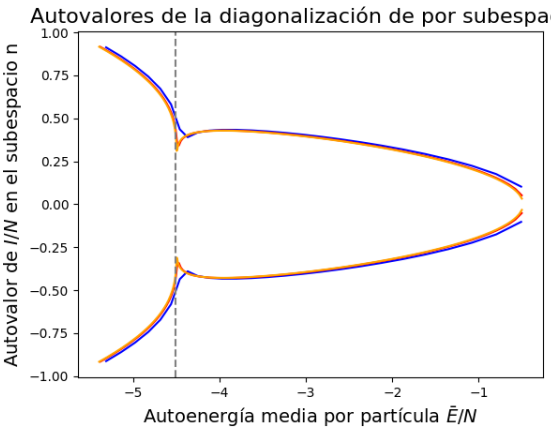
En el caso del hamiltoniano H_2, el valor de I fluctúa en torno al cero, por lo que la simetría en este caso se restaura, ya que el golpe energético es suficiente. También en este caso el valor promedio se estabiliza, así que garantizamos que las fluctuaciones son ruido aleatorio. Sin embargo, como para H_1, en el tiempo considerado, no se observa que haya una disminución notable de éstas con el tiempo, por lo que tampoco hay termalización en sentido fuerte, aunque el estado sí que fluctúe en torno al valor microcanónico.

4.3. Cumplimiento de la ETH

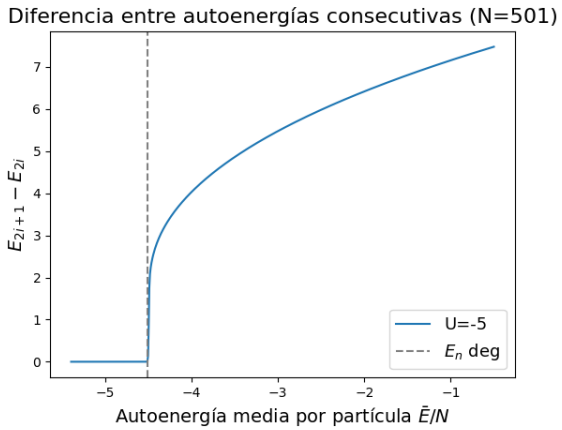
El hecho de que, a partir de un estado inicial concreto, los valores esperados se relajen hacia un cierto valor, no implica que esto suceda para cualquier otro estado. Es más interesante comprobar que el sistema cumpla las condiciones de la ETH generalizada.

Recurrimos entonces a las ecuaciones (2.18) y (2.19). Para tener en cuenta la posible degeneración, consideraremos que cada subespacio está compuesto por dos autoestados de energía, con autoenergías consecutivas, de tal forma que, en la zona de ruptura de simetría, se agruparán los autoestados con cuasi-degeneración. En la zona desordenada, se minimiza la diferencia entre autoenergías de un mismo subespacio, así que $E_{n,1} \approx E_{n,2}$, por lo que no hay problema a la hora

de aplicar estas condiciones. De esta forma, mediante la diagonalización por bloques, podremos comprobar la ETH de forma general.



(a) Autovalores del operador intensivo I/N para cada subespacio de energía media $\bar{E}$



(b) Diferencia entre las autoenergías de los dos autoestados de cada subespacio.

Figura 5: Gráficas de la diagonalización de I/N por subespacios n

En las condiciones de la ETH aparece en el denominador la anchura del espectro del observable η_O. Para simplificar hemos diagonalizado el operador intensivo I/N de tal forma que η_O no crezca al aumentar N. En el eje x de las gráficas se ha representado la energía intensiva E_n/N, para poder comparar las tendencias al aumentar N.

En la figura 5(a) están representados los autovalores de cada bloque 2×2 en función de la media entre las autoenergías $\bar{E} = (E_{n,1} + E_{n,2})/2$. Los $\lambda_{n,i}$ de cada subespacio son completamente simétricos, así que comprobamos que se cumple $\lambda_{n,1} = -\lambda_{n,2}$, tanto en la zona con simetría rota como en la que no. Al ser $T_n = \sum_i \lambda_i = 0$ la primera condición (2.18) se cumplirá en ambas zonas.

La función representada tiene un pico que se corresponde con el límite de la zona de ruptura de simetría, indicada con la línea discontinua gris. También se puede comparar con la gráfica de la degeneración en el espectro de autoenergías. Por debajo de esta línea, los autovalores representados dan cuenta de esos términos que sobreviven al haber degeneración y que influyen en el valor esperado del observable, como vimos en la sección 2.4 (ecuación (2.17)). Por la ruptura de simetría, la ecuación (2.19) no se cumple y no habrá termalización.

Por encima del punto crítico la situación es más compleja. En este caso, los autovalores de I/N tampoco se están anulando. Se cumple la primera condición (2.18), porque la gráfica es simétrica, pero la segunda parece no estar cumpliéndose, incluso aunque no haya degeneración. En este caso, la matriz I debería tener la diagonal nula y los elementos no diagonales, según la ecuación del promedio temporal (2.5), a tiempo infinito no contribuirían al promedio, por la presencia de la integral a tiempos infinitos. Lo que estamos observando es entonces parte de esos elementos no diagonales responsables de las fluctuaciones en torno al promedio. La simetría no se está rompiendo, pero no parece que se cumpla la segunda condición de la ETH.

En realidad hay un factor que no hemos tenido en cuenta todavía. En las condiciones de la ETH está indicado un límite $N \to \infty$, mientras que nuestras simulaciones están hechas para tamaños finitos, que nosotros hemos asumido lo suficientemente grandes como para hacer predicciones sobre el LT. Por este motivo, se ha realizado el mismo cálculo variando el tamaño del sistema para ver cómo reacciona al aumentar N.

En la gráfica 5(a) se observan los autovalores para tres tamaños del sistema distintos y no parece haber una disminución significativa con N en la zona sin ruptura de simetría. Esto parece indicar que en el límite termodinámico los valores no diagonales de la matriz persistirán. En ese caso, la segunda condición de la ETH se incumpliría y no se podría hablar de termalización, porque las fluctuaciones se mantendrían estables incluso para un sistema infinito. Este resultado es esperable si tenemos en consideración que el análogo clásico de este modelo tiene una única dimensión y es por tanto integrable. Son posibles, entonces, fluctuaciones en torno a un cierto valor pero de amplitud constante, que es lo que estaríamos observando aquí.

Para comparar este resultado con la evolución temporal es interesante calcular la desviación típica del operador intensivo I/N en función del tamaño del sistema, una vez que el estado inicial se ha relajado al valor microcanónico, utilizando la siguiente expresión:

$$\sigma_O^2 = \frac{1}{t_0}\int_0^{t_0} dt\ [O(t)]^2\ - (\bar{O})^2. \tag{4.4}$$

Para descartar la fase de relajación se ha hecho el promedio en un intervalo entre $t \in [9000, 10000]$ con un paso de $t_{paso} = 1$. Además se ha graficado la evolución para el sistema de mayor y menor tamaño para comprobar cualitativamente que el estado haya superado el régimen transitorio.

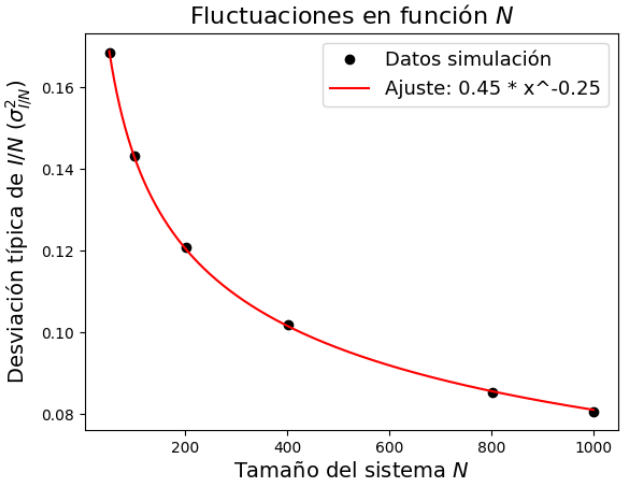


Figura 6: Fluctuaciones en el régimen estacionario en torno a $I = 0$ en función del tamaño N

El resultado, representado en la figura 6, choca ligeramente con lo que cabría esperar a partir de la figura 5(a). Se observa una tendencia a que las fluctuaciones del parámetro intensivo disminuyan con el tamaño del sistema. La disminución se ha ajustado a una ley de potencias general que reproduce correctamente la tendencia, al menos para los N tomados. El exponente del ajuste es bastante pequeño así que la disminución es muy lenta, por lo que no se puede concluir con certeza que en el límite termodinámico las fluctuaciones sean lo suficientemente pequeñas para que haya termalización.

En la figura 5(a), se había visto que ciertos elementos no diagonales parecían no disminuir con el tamaño del sistema, mientras que de forma simulada sí que se observa disminución en las fluctuaciones. En realidad esto no es incompatible, ya que en la ecuación de la evolución temporal (2.4) y en la del promedio (2.5) los términos no diagonales van acompañados de unos factores C_m que dependen del estado inicial y de unas exponenciales que oscilan y son difíciles de predecir. Además, es complicado definir cuál es el tiempo de relajación del sistema y lo que parece ruido a nivel cualitativo podría no corresponderse a un estado relajado. Por lo tanto, este resultado es poco

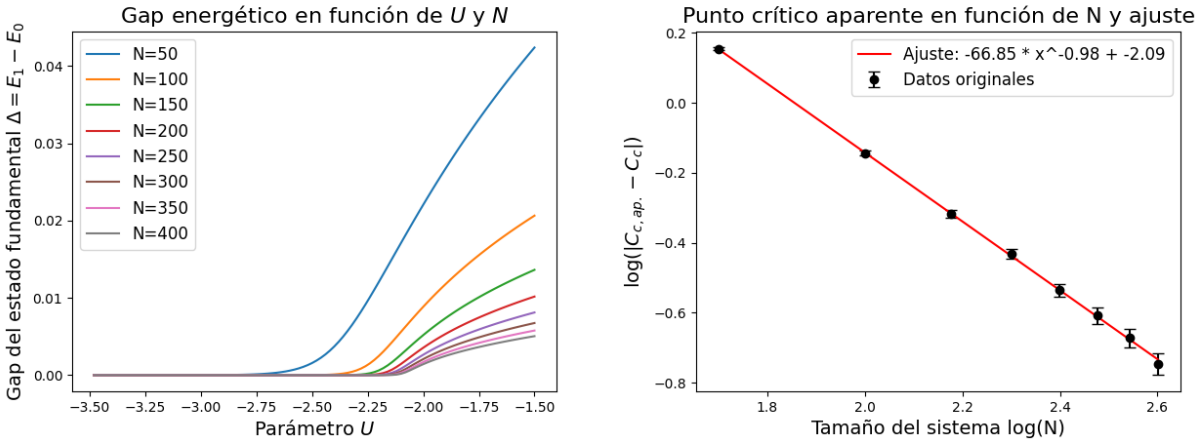
concluyente para afirmar la termalización del sistema en sentido estricto cuando no hay ruptura de simetría y haría falta un estudio más exhaustivo.

4.4. Transición de fase cuántica

En la sección 2.6 se ha definido lo que es una transición cuántica, que es una transición de fase en las propiedades del estado fundamental (es decir, a $T = 0K$). Estas transiciones ocurren al variar uno de los parámetros no térmicos, como puede ser por ejemplo el campo magnético externo en un modelo de Ising. Al alcanzar un cierto valor, denominado punto crítico, cambiarán de forma brusca ciertas magnitudes termodinámicas. Además, se ha mencionado que la ruptura espontánea de simetría es un motivo para que haya transición de fase.

En la sección 4.1, la figura 2(a) mostraba que, al variar el parámetro U, la zona del espectro en la que ocurre ruptura de simetría variaba. Podemos intuir que ocurrirá una transición de fase, que tiene como punto crítico el valor de U donde comienza a haber degeneración en alguna zona del espectro. El primer estado que se degenera es el fundamental, así que para analizar la transición de fase se representa el *gap* Δ en función del parámetro U (figura 7(a)). Para un cierto valor de U el *gap* se hace nulo, lo cual nos indica que hay degeneración y, por tanto, se ha roto la simetría.

Para obtener información sobre la transición de fase cuántica y determinar el punto crítico se trasladarán ciertos conceptos del escalado de tamaño finito como vimos en la sección 2.6. A raíz de la figura 7(a) se puede observar que el valor de U para el cual ocurre la ruptura de simetría tiene dependencia con N, ya que las curvas se separan del cero para valores cada vez más pequeños en valor absoluto, conforme se aumenta el tamaño del sistema. Esto sugiere que hay correcciones de tamaño finito, porque hay desplazamiento del punto crítico aparente, y que el punto crítico en el LT se sitúa alrededor de $U_c \approx -2{,}1$.



(a) (b)

Figura 7: Estudio de la transición de fase. En (a) se muestra el *gap* entre el estado fundamental y el primer excitado en función de U para varios tamaños distintos del sistema. En (b) se muestra en escala logarítmica la diferencia entre el punto crítico aparente y el punto crítico obtenido mediante el ajuste para distintos N, con su error. La línea roja representa el ajuste.

Para determinar el punto crítico aparente se necesita un cota, que sea cercana a 0, pero que esté prudencialmente por encima de la precisión del ordenador y permita un cierto margen de error. El punto en el que el valor del *gap* supera esa cota se identifica como punto crítico. En este caso se ha tomado el valor de 10^{-6}, pero se ha comprobado que el resultado es cualitativamente igual

tomando otras cotas.

Podemos aplicar la teoría de FSS cambiando T por el parámetro que provoca la transición (en este caso U) y poniendo N en vez de L como parámetro de la dimensión del sistema, como se comentó en la sección 2.6, según la ecuación (2.21).

Se han representado los datos del punto crítico aparente $U_{c,aparente}$ en función de N y se ha realizado un ajuste de la forma $A \cdot (x)^B + C$ de forma que C corresponderá a U_c y B a $-1/\tilde{\nu}$. En la figura 7(b), realizada después de haber obtenido U_c, se han graficado directamente $\log|U - U_c|$ frente a $\log(N)$, utilizando el valor de U_c del ajuste, para observar más claramente si los datos se ajustan correctamente a la ley de potencias (que en escala logarítmica corresponde a una recta).

El ajuste muestra que esta tendencia se sigue claramente, con un exponente $B = -0{,}984 \pm 0{,}020$, que corresponde a $\tilde{\nu} = 1,016 \pm 0,020$. Además, nos da un valor crítico de $U_c = -2{,}090 \pm 0{,}011$, coherente con lo que se observa gráficamente. Se puede confirmar que, acorde a la teoría FSS y de forma análoga a las transiciones de fase clásicas, el desplazamiento del punto crítico sigue una ley de potencias, que da un resultado para U_c coherente con las observaciones.

5. Conclusiones

En este trabajo hemos tratado la termalización en sistemas cuánticos aislados, en particular cuando el hamiltoniano tiene una determinada simetría discreta. En la primera parte del trabajo se ha definido el marco teórico y los conceptos necesarios para estudiar estos sistemas de forma estadística. En la segunda se han aplicado las teorías presentadas a un problema concreto, el modelo de Bose-Hubbard de dos pozos con condiciones periódicas.

Hay conceptos en la base de la física estadística cuántica que no han sido fáciles de definir a partir de sus correspondientes clásicos. Se han presentado varias teorías que arrojan luz en este ámbito, como el teorema ergódico cuántico de von Neumann y la RMT de Wigner. A partir de esto, la teoría más sólida y completa es la ETH, formulada por Srednicki.

Sin embargo, la ETH tiene ciertas limitaciones en sistemas con degeneración, siendo la ruptura de simetría un caso especial de degeneración en el LT. Se ha presentado entonces la ETH generalizada, que se puede aplicar cuando tenemos una simetría discreta del hamiltoniano que se rompe. También se ha analizado la ruptura de simetría como motivo de una transición de fase cuántica, que es un fenómeno típico de sistemas cuánticos complejos.

El modelo propuesto, aunque sencillo de definir, es interesante por dos motivos: por un lado, permite analizar y visualizar de forma clara el mecanismo de ruptura de simetría; por el otro, hace que surjan dificultades conceptuales, al tratarse de un caso muy excepcional. Su comportamiento "extraño" puede entenderse gracias a su análogo clásico, que es unidimensional. Los sistemas unidimensionales pueden ser ergódicos sin llegar a termalizar, manteniendo unas oscilaciones constantes en torno a un valor de equilibrio. Esto produce dificultades a la hora de comprobar la ETH, especialmente en la zona donde la simetría no se rompe.

La ruptura de simetría se ha comprobado a través de la evolución temporal de un estado inicial, pero también mediante los autovalores en los subespacios degenerados, que nos permiten verificar el incumplimiento de las condiciones de la ETH generalizada. Además, se ha justificado a nivel teórico que la ruptura de simetría corresponde a una degeneración en las autoenergías así que, mediante el *gap* entre los primeros dos autoestados, se ha estudiado la transición de fase cuántica. Este estudio ha comprobado que esta transición de fase cuántica se comporta de forma análoga a una clásica, en la que se pueden definir exponentes críticos y aplicar el escalado de tamaño finito.

Han quedado algunas puertas abiertas, que podrían dar lugar a un trabajo más extenso. En primer lugar, aunque en un sentido débil se haya observado la termalización, no se ha concluido de forma precisa cuál es la naturaleza de las fluctuaciones en el LT. Sería necesario un análisis más profundo y particularizado de los elementos fuera de la diagonal del parámetro de orden y de la ecuación de evolución temporal para entender su tendencia al aumentar N. En la misma línea, en la zona del espectro de simetría restaurada, se podría seguir profundizando sobre el motivo por el cual los elementos de matriz no diagonales de I/N no tienden a cero, estudiando también la relación con el análogo clásico de este modelo. Puesto que este último es ergódico pero no caótico, la comparación entre ambos podría ayudar a profundizar sobre la sutil diferencia entre estos conceptos en sistemas cuánticos.

Referencias

[1] Ludwig Boltzmann. "Analytischer Beweis des zweiten Hauptsatzes der mechanischen Wärmetheorie aus den Sätzen über das Gleichgewicht der lebendigen Kraft". En: *Wiener Berichte* 63 (1871), págs. 679-711.

[2] Edward N. Lorenz. "Deterministic Nonperiodic Flow". En: *Journal of the Atmospheric Sciences* 20.2 (1963), págs. 130-141.

[3] O. Bohigas, M. J. Giannoni y C. Schmit. "Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws". En: *Physical Review Letters* 52 (1 ene. de 1984), págs. 1-4. DOI: 10.1103/PhysRevLett.52.1. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.52.1.

[4] Luca D'Alessio et al. "From Quantum Chaos and Eigenstate Thermalization to Statistical Mechanics and Thermodynamics". En: *Advances in Physics* 65.3 (2016), págs. 239-362. DOI: 10.1080/00018732.2016.1198134.

[5] John von Neumann. "Proof of the Ergodic Theorem and the H-Theorem in Quantum Mechanics". En: *The European Physical Journal H* 35.2 (2010). Traducción al inglés por R. Tumulka, págs. 201-237. DOI: 10.1140/epjh/e2010-00008-5.

[6] Mark Srednicki. "Chaos and quantum thermalization". En: *Physical Review E* 50.2 (1994), págs. 888-901.

[7] Sebastián Gómez, Ángel L. Corps y Armando Relaño. "Quantum thermalization mechanism and the emergence of symmetry-breaking phases". En: *APS Open Science* 1 (2026), pág. 000018. DOI: 10.1103/APSOpenSci.1.000018. URL: https://doi.org/10.1103/APSOpenSci.1.000018.

[8] Marcos Rigol, Vanja Dunjko y Maxim Olshanii. "Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems". En: *Nature* 452.7189 (2008), págs. 854-858.

[9] Thomas Vojta. "Quantum phase transitions". En: *AIP Conference Proceedings* 684.1 (2003), págs. 83-104.

[10] Daniel J. Amit y Victor Martín-Mayor. *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena*. 3.ª ed. Singapore: World Scientific, 2005. ISBN: 9789812563736.

[11] Subir Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. 2.ª ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2011. ISBN: 9781139064583. DOI: 10.1017/CBO9780511973765.

[12] Joel L. Lebowitz y Oliver Penrose. "Modern ergodic theory". En: *Physics Today* 26.2 (1973), págs. 23-29. DOI: 10.1063/1.3127948. URL: https://doi.org/10.1063/1.3127948.