



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

FAMAF

Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

Ecos de Loschmidt en el estudio de la Dinámica Cuántica y Decoherencia en excitaciones de carga y espín en sistemas complejos observados por Resonancia Magnética Nuclear.

por

Mgtr. Fabricio Simón Lozano Negro

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

Universidad Nacional de Córdoba

Agosto de 2024

Director Dr. Horacio M. Pastawski

Codirector Dr. Gonzalo A. Álvarez

Tribunal Especial

Titulares:

1. Dr. Hernan L. Calvo
FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba
2. Dr. Federico M. Pont
FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba
3. Dr. Diego A. Wisniacki
FCEyN, Universidad Nacional de Buenos Aires

Suplentes:

1. Dr. Gustavo Lozano
FCEyN, Universidad Nacional de Buenos Aires
2. Dr. Raul Bustus Marún
FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba



Este trabajo se distribuye bajo una licencia

Creative Commons Atribución - No Comercial - Sin Obra Derivada 4.0 Internacional.

A mis padres, Raquel y Miguel.

Resumen

Una comprensión profunda de los procesos que gobiernan una dinámica cuántica, ya sea en un sistema aislado o en interacción con un ambiente, es necesaria para el avance de muchas áreas de la ciencia. Esta permitiría la mejora de las propiedades de transporte en sistemas mesoscópicos y nanoscópicos, el procesamiento y transmisión de información cuántica, el desarrollo de sensores que superen las limitaciones clásicas, e incluso, explicar e imitar la eficiencia de muchos procesos biológicos.

En esta tesis estudiamos, numérica y analíticamente, la dinámica cuántica de sistemas complejos: cadenas de espines y excitaciones electrónicas, en presencia de potenciales aleatorios y pseudoaleatorios. Consideramos tanto interacciones de un cuerpo como de muchos cuerpos. En ambos casos estas pueden ser tanto a primeros vecinos como de largo alcance, aislados o abiertos a los efectos de un ambiente. Para estos sistemas buscamos entender cómo la presencia de interacciones de muchos cuerpos o de un ambiente afecta la dinámica. Simultáneamente, desarrollamos técnicas basadas en un procedimiento de reversión temporal (Eco de Loschmidt, LE) que nos permiten extraer información oculta en una dinámica compleja, así como evaluar el impacto de la decoherencia generada por distintos ambientes.

El Eco de Loschmidt resulta de revertir la dinámica de un sistema cuántico, y se observa como un retorno, total o parcial, al estado inicial del sistema. Idealmente, si la reversión es perfecta, la magnitud del eco es la unidad. Si la reversión no es perfecta, el eco de Loschmidt cuantifica la diferencia entre la dinámica original y la perturbada. Esta frustración del sistema en volver a su estado inicial, resulta de perturbaciones que pueden ser tanto naturales como diseñadas a voluntad.

En el primer caso, el LE permite cuantificar los efectos de ruido y perturbaciones en un sistema cuántico, las cuales pueden originarse tanto por la falta de suficiente control sobre el sistema como por la presencia de un ambiente. En el último caso, con una elección astuta de perturbaciones, el LE se convierte en una herramienta potente para estudiar la evolución de un Hamiltoniano. Permitiendo acceder a información previamente codificada en la dinámica. Tal sería el caso del procedimiento denominado Coherencias Cuánticas Múltiples en experimentos de Resonancia Magnética Nuclear.

Particularmente, el LE nos permitirá medir el grado de “desparramo” o “revoltijo” que se genera tanto en el espacio real como en el espacio de Hilbert. Mostramos que este procedimiento permite extraer información global del sistema midiendo solo observables locales. En otras palabras, en experimentos donde solo se tiene acceso a medir algunos observables locales del sistema, el LE permite sortear esta dificultad para obtener información de la distribución espacial de la función de onda o del número de espines correlacionados por la dinámica. A partir del desarrollo de un LE específico [i.e. Funciones de Correlación sin orden temporal (OTOC)] buscamos esclarecer la relación de éstos con algunas magnitu-

des que caracterizan la dinámica de un sistema, como el ancho del paquete de ondas o el inverso de la razón de participación (IPR). Esto nos permite evaluar el efecto de añadir interacciones de muchos cuerpos en la dinámica y determinar cuándo ésta es compatible con el fenómeno de localización introducido por P. W. Anderson (many-body localization, MBL).

Muchos procesos físicos a nivel molecular necesitan de cierta estabilidad frente a un ambiente, i.e. frente a la decoherencia. Esto es especialmente cierto en el transporte de excitaciones de carga o energía en sistemas biológicos. Este problema es abordado en esta tesis al incluir fluctuaciones temporales sobre la dinámica cuántica de una excitación elemental, observando el efecto de este ambiente sobre el coeficiente de difusión, y consecuentemente, en las propiedades de transporte del mismo. Una simultánea evaluación numérica de diferentes modelos, junto a un estudio analítico de colapsos cuánticos locales generados por el ambiente, nos permite reconocer en qué condiciones el coeficiente de difusión es robusto frente los efectos de un ambiente. En este contexto, el LE permite cuantificar los efectos de ruido y perturbaciones (decoherencia) en la dinámica cuántica de un sistema. Por tanto, no solo es una herramienta que permite realizar cálculos numéricos eficientemente, sino que también brinda la posibilidad de entender cómo la decoherencia afecta al sistema y de distinguir el origen de la dinámica (e.g. coherente o inducida por el ambiente).

Finalmente, estudiamos en qué condiciones los ecos de observables globales pueden dar información sobre magnitudes locales. Esto es algo de particular interés en varios experimentos de Resonancia Magnética Nuclear, donde los observables accesibles son, principalmente, globales. Observamos que en sistemas “complejos” con un gran número de espines involucrados en la dinámica, estos ecos globales, y los OTOCs derivados, son equivalentes a un promedio de magnitudes locales.

Abstract

A deep understanding of quantum dynamics is crucial for advancing numerous scientific fields, including improving transport properties in mesoscopic and nanoscopic systems, enhancing quantum information processing, developing sensors surpassing classical limits, and mimicking the efficiency of biological processes.

This thesis explores numerically and analytically the quantum dynamics of complex systems such as spin chains and electronic excitations under random and pseudo-random potentials. We examine both one-body and many-body interactions, which can be either nearest-neighbor or long-range, and consider their effects in isolated systems as well as those influenced by environmental interactions. For these systems, we seek to understand how many-body interactions and environmental factors impact their dynamics.

We introduce time-reversal techniques, specifically Loschmidt Echo (LE), to extract hidden information from complex dynamics and assess the impact of decoherence. The Loschmidt Echo results from reversing the dynamics of a quantum system, and it is observed as a return, total or partial, to its initial state. Ideally, a perfect reversal results in an LE of unity; deviations quantify the difference between original and perturbed dynamics. This frustration of the system in returning to its initial state arises from both natural and engineered perturbations. In the first case, LE allows us to quantify the effects of noise and disturbances in a quantum system, which can originate from a lack of sufficient control over the system or the presence of an environment. In the latter case, with an astute choice of perturbations, the LE becomes a powerful tool for probing the Hamiltonian evolution and accessing information previously encoded in the dynamics. A paradigmatic case would be Multiple Quantum Coherences sequence in Nuclear Magnetic Resonance experiments.

In this thesis, the LE will allow us to measure the degree of “spreading” or “scrambling” generated in both real and Hilbert space. We show that this procedure enables the extraction of global information by measuring only local observables. In other words, in experiments where you only have access to measuring some local observables, the LE circumvents this difficulty and allows you to extract information on the spatial distribution of the wave function or the number of spins correlated by the dynamics. From the development of a specific LE [i.e. Out-of-time ordered commutator (OTOC)], we seek to clarify the relationship between the OTOCs and some magnitudes that characterize the dynamics of a system, such as the width of the wave packet or the inverse of the participation ratio (IPR). This is used to evaluate the effect of adding many-body interactions in the dynamics and determine when this is compatible with the localization phenomenon introduced by P. W. Anderson (many-body localization, MBL).

Many physical processes at the molecular level need a certain degree of stability against environmental effects, i.e. against decoherence. This is especially true in charge or energy

transport for excitations in biological systems. This problem is addressed by including temporal fluctuations in the quantum dynamics of an elemental excitation and observing its effect on the diffusion coefficient and, consequently, on its transport properties. A simultaneous numerical evaluation of different models and analytical study of local quantum collapses generated by the environment, allows us to recognize under which conditions the diffusion coefficient is robust to environmental effects. In this context, LE quantifies the effects of noise and disturbances (decoherence) on the quantum dynamics of a system. Therefore, it is not only a tool for efficient numerical implementation, but it also provides the possibility of understanding how decoherence affects the system and distinguishing the origin of the dynamics (e.g. coherent or induced by the environment).

Finally, we study under what conditions echoes from global observables provide information about local magnitudes. This is particularly significant in various Nuclear Magnetic Resonance experiments, where the primary observable quantities are global. We observe that in “complex” systems with numerous spins involved in the dynamics, these global echoes, and the derived OTOCs, are equivalent to an average of local magnitudes.

Índice general

Índice de figuras	XI
1. Introducción.	3
1.1. Sistemas cuánticos.	4
1.2. Termalización, Ergodicidad y Caos.	6
1.2.1. Hipótesis de termalización de los autoestados (ETH).	6
1.2.2. El caos como un camino a la difusión.	7
1.3. Ausencia de termalización.	8
1.3.1. Localización.	9
1.4. Ecos de Loschmidt y OTOCs.	10
1.4.1. Ecos de Loschmidt en el mundo cuántico.	10
1.4.2. OTOCs: Funciones de Correlación sin orden temporal.	11
1.5. Ruido y Decoherencia: Sistemas abiertos.	12
1.5.1. Landauer→Büttiker →D'Amato-Pastawski.	14
1.5.2. Quantum-Drift, Quantum-Jumps, y Haken-Strobl.	14
1.6. Sistemas biológicos.	15
1.7. Hipótesis central de Irreversibilidad.	16
1.8. Organización de la Tesis.	17
2. Dinámica y OTOCs en la cadena de Harper-Hofstadter-Andrè-Aubry.	19
2.1. El modelo.	20
2.1.1. Generalización, auto-dualidad y transición de fase.	21
2.1.2. Notaciones actuales y realización experimental.	22
2.2. La dinámica de un cuerpo.	23
2.2.1. El IPR dinámico.	23
2.2.2. El segundo momento de la excitación.	24
2.2.3. Densidad Local de estados.	24
2.3. Resultados Numéricos.	25
2.3.1. Condición inicial.	25
2.3.2. Dinámica del desparramo de la excitación.	26
2.4. La secuencia GEA.	30
2.4.1. Definición.	31
2.4.2. Resultados numéricos/analíticos.	32
2.5. Conclusiones.	33

ÍNDICE GENERAL

3. Dinámica cuántica en un ambiente decoherente.	35
3.1. El ambiente.	37
3.1.1. El Quantum-Drift.	37
3.2. La cadena HHAA con decoherencia I.	38
3.3. Un modelo de mediciones cuánticas.	42
3.3.1. Generalización para condiciones iniciales no locales.	43
3.4. La cadena HHAA con decoherencia II.	45
3.4.1. Los regímenes límite.	45
3.4.2. Variando la incommensurabilidad del potencial.	48
3.5. ¿Criticidad o difusión?	50
3.5.1. La cadena de Fibonacci.	51
3.5.2. Power-law banded random matrix (PBRM).	52
3.5.3. Discusión: Caos, fractalidad y difusión.	55
3.6. Estabilidad universal contra la decoherencia.	56
3.7. Loschmidt echo (pureza).	57
3.7.1. Ecos en la cadena de HHAA.	59
3.7.2. Paquetes como condición inicial.	61
3.8. Conclusiones.	62
4. Dinámica y OTOCs en sistemas de espines interactuantes.	65
4.1. Un sistema modelo.	67
4.1.1. Condición inicial.	68
4.2. Generalización de la GEA.	69
4.2.1. Diferencias entre las amplitudes GEA de un cuerpo y MB.	71
4.3. Resultados numéricos.	73
4.3.1. Espectro GEA de una partícula vs. MB.	73
4.3.2. Camino al estudio de la localización.	75
4.4. Conclusiones.	82
5. OTOCs Globales como una caracterización del desparramo en la dinámica de observables Locales.	85
5.1. Ecos y OTOCs.	86
5.1.1. Ecos generalizados en RMN.	88
5.1.2. Observables Locales y Globales.	90
5.2. Resultados Numéricos.	91
5.2.1. Ecos y coherencias.	92
5.2.2. Crecimiento, saturación y fluctuaciones en OTOCs locales y globales.	94
5.3. Conclusiones.	99
6. Conclusiones.	101
A. Segundo momento del espectro GEA.	105
A.1. Un cuerpo.	105
A.2. Sistemas de espines.	106

B. Corriente Estacionaria y Fórmula de Green-Kubo.	107
B.1. Corriente Estacionaria.	107
B.1.1. Corriente en estado estacionario: método de tiempo de transferencia promedio.	108
B.2. Fórmula de Green-Kubo.	109
C. Solución analítica para la difusión.	113
D. Cálculos Auxiliares Capítulo 5.	115
D.1. Coherencias Cuánticas Múltiples.	115
D.2. Mapeo de las contribuciones locales y globales al tamaño del grupo K con OTOC diagonales y no-diagonales.	116
D.3. Crecimiento a tiempos muy cortos.	117
D.4. Comportamiento de magnitudes individuales $K_*^i(t)$ y covarianza.	118
D.5. Anillo ordenado	120
E. Consideraciones numéricas	123
E.1. Algoritmo de Trotter-Suzuki	124
E.1.1. Una partícula	124
E.1.2. Sistemas de espines	125
E.2. Paralelismo cuántico	126

Índice de figuras

1.1.	Esquematización de los efectos de un ambiente en diferentes áreas de la física.	5
1.2.	Representación esquemática de las posibles formas de introducir los efectos de un ambiente decoherente a un sistema cuántico.	13
2.1.	Mariposa de Hofstadter.	21
2.2.	IPR en función de la amplitud del potencial de HHAA. Densidad local de estados é IPR _v .	25
2.3.	Evolución coherente de la varianza de excitación inicialmente localizada en el centro de la cadena para el modelo HHAA.	27
2.4.	Esquema del procedimiento OTOC desarrollado (GEA). Espectro GEA obtenido en la cadena de HHAA.	31
3.1.	Representación del modelo HHAA con un ambiente.	38
3.2.	Evolución del segundo momento de la excitación para el modelo HHAA en función del tiempo: Ecuación maestra vs. Quantum-Drift.	39
3.3.	Difusión de excitación en función del tiempo y coeficiente de difusión en función de la decoherencia para la cadena de HHAA.	41
3.4.	Coeficiente de difusión en función de la decoherencia: Comparación de diferentes técnicas.	45
3.5.	Coeficiente de difusión vs. decoherencia en la cadena de HHAA: Comparación entre resultados numéricos y analíticos.	46
3.6.	Dinámica y coeficiente de difusión vs. decoherencia en la cadena de HHAA variando el vector de onda del potencial.	49
3.7.	Evolución temporal de la varianza coherente y coeficiente de difusión vs. la magnitud de decoherencia en la cadena de Fibonacci.	51
3.8.	Evolución temporal de la varianza coherente y coeficiente de difusión vs. la magnitud de decoherencia en el modelo PBRM.	54
3.9.	Comportamiento universal del coeficiente de difusión en función de la decoherencia.	57
3.10.	Evolución de la probabilidad de retorno total en un proceso de reversión temporal. Eco de Loschmidt en función del tiempo para una cadena HHAA con decoherencia.	58
3.11.	Eco de Loschmidt en función del tiempo para una cadena HHAA con decoherencia. Régimen extendido y localizado.	60
3.12.	Eco de Loschmidt en función de la magnitud de la decoherencia una cadena HHAA en el punto crítico.	61

ÍNDICE DE FIGURAS

3.13. Eco de Loschmidt en función del tiempo para una cadena HHAA con decoherencia para un estado inicial no local.	62
4.1. Esquema del espacio de Hilbert en un sistema de espines. Autovalores del operador gradiente.	69
4.2. Magnetización media, ecos y espectro de la secuencia GEA en tres Hamiltonianos de prueba.	73
4.3. Comparación entre la evolución de la ZOGE y la suma de las magnetizaciones al cuadrado en un sistema MB.	75
4.4. Evolución temporal de la suma de las magnetizaciones al cuadrado (S^2) en las fases extendida y localizada de la cadena de HHAA MB.	77
4.5. Valor de equilibrio de la suma de la suma de las magnetizaciones cuadradas como función de W y U	78
4.6. Mapa de densidad de S^2 en función de la amplitud del potencial W y las interacciones U . Cadena de espines HHAA.	79
4.7. Resultados experimentales tomados de Ref. Schreiber et. al. <i>Science</i> , vol. 349, pp. 842-845, (2015).	80
4.8. Evolución temporal de $S^2(t)$ y $P_{00}(t)$. Exponente característico de estas dinámicas en función de la amplitud del potencial. Cadena de espines HHAA.	81
5.1. Esquema de un experimento de Coherencias cuánticas múltiples y su interpretación local. Esquema de un anillo de espines.	88
5.2. Ecos y coherencias globales y locales en un anillo de espines.	93
5.3. Eco promedio observado a una distancia n del sitio inicial en función del tiempo. Anillo de espines.	93
5.4. Realizaciones individuales por sitio, K_*^i , para un anillo de $N = 12$ espines.	95
5.5. Evolución temporal de la OTOC local $K_L(t)$ y global $K_G(t)$ en un anillo de espines.	96
5.6. Comportamiento a tiempos cortos de la OTOC local $K_L(t)$ y global $K_G(t)$ en un anillo de espines.	97
5.7. Promedio temporal de la contribución cruzada al número de espines correlacionados en función del tamaño del anillo.	98
5.8. Valor de saturación $\langle K_{CT} \rangle / N$ en función del número de espines en el anillo en escala log-log.	99
B.1. Corriente de estado estacionario vs. decoherencia en la cadena de HHAA.	109
B.2. Coeficiente de difusión vs. decoherencia en función de N para la cadena HHAA.	110
D.1. Promedio temporal y desviación estándar de la contribución cruzada al número de espines correlacionados en un anillo de espines. Análisis de la desviación estándar del valor promedio.	119
D.2. Desviación estándar del valor de saturación de K_{CT} en función de N en un anillo de espines.	120
D.3. Anillo de espines en ausencia de campos Zeeman locales.	121

ÍNDICE DE FIGURAS

E.1. Esquema de la “Trotterización” de un Hamiltoniano <i>tight-binding</i> a primeros vecinos	125
--	-----

Índice de tablas

- | | |
|---|----|
| 3.1. Fracción continua de los irracionales utilizados $q = q_g/m$. Los números entre llaves se repiten infinitamente en la fracción. | 50 |
|---|----|

Acrónimos:

- AL: Localización de Anderson (*Anderson Localization*).
- DP: D'Amato-Pastawski.
- ETH: Hipótesis de termalización de los autoestados (*Eigenstate thermalization Hypothesis*).
- GEA: Amplitudes de Entrelazamiento de Gradiente (*Gradient Entanglement Amplitudes*).
- GLBE: Ecuaciones de Landauer-Büttiker generalizadas (*Generalized Landauer-Büttiker Equations*).
- CIH: Hipótesis Central de Irreversibilidad, (*Central Irreversibility Hypothesis*).
- HHAA: Harper-Hofstadter-Andrè-Aubry.
- IPR: Inverso del Ratio de Participación (*Inverse Participation Ratio*).
- LE: Eco de Loschmidt (*Loschmidt Echo*).
- MBL: Localización de muchos cuerpos (*Many-Body Localization*).
- OTOCs: Funciones de correlación sin orden temporal (*Out-of-Time Order Correlator*).
- PBRM: *Power Banded Random Matrix*.
- QD: Quantum-Drift.
- NMR: Resonancia Magnética Nuclear (*Nuclear Magnetic Resonance*).
- ZOGE: Entrelazamiento de Gradiente de Orden Cero (*Zero Order Gradient Entanglement*).

Mientras dure esta música, seremos dignos del amor de Helena de Troya.

Mientras dure esta música, seremos dignos de haber muerto en Arbela.

Mientras dure esta música, creeremos en el libre albedrío, esa ilusión de cada instante.

Mientras dure esta música, sabremos que la nave de Ulises volverá a Itaca.

Mientras dure esta música, seremos la palabra y la espada.

Mientras dure esta música, seremos dignos del cristal y de la caoba, de la nieve y del mármol.

Mientras dure esta música, seremos dignos de las cosas comunes, que ahora no lo son.

Mientras dure esta música, seremos en el aire la flecha.

Mientras dure esta música, creeremos en la misericordia del lobo y en la justicia de los justos.

Mientras dure esta música, mereceremos tu gran voz Walt Whitman.

*Mientras dure esta música, mereceremos haber visto, desde una cumbre,
la tierra prometida.*

J.L. Borges

Capítulo 1

Introducción.

En el cuento “La otra muerte”, Borges, mientras narra la historia de un gaucho entrerriano escribe: “Modificar el pasado no es modificar un solo hecho; es anular sus consecuencias, que tienden a ser infinitas. Dicho sea con otras palabras; es crear dos historias universales.”. En estas dos oraciones, a mi parecer, se representan dos conceptos físicos que configuran el andamiaje en esta tesis: la hipótesis central de irreversibilidad (CIH) y el Eco de Loschmidt (LE). El primero, oculto en la aclaración de que las consecuencias a anular tienden a ser infinitas, y el segundo como una comparación (total o parcial) de las dos historias universales.

Ambos conceptos nacen de preguntarse si las leyes de la física son reversibles, i.e. si se puede anular todas las consecuencias de un hecho. Si bien esta pregunta fue, en mayor o menor medida discutida por varios científicos a lo largo de la historia, fueron algunos de los padres de la termodinámica quienes lidiaron con estas inquietudes. Incluso hasta llegar a fines trágicos. Particularmente, L. Boltzmann, estaba fascinado con lo que él concebía como una paradoja: cómo puede surgir la irreversibilidad, descrita por la segunda ley de la termodinámica, a partir de leyes microscópicamente reversibles [1, 2]. El proceso de evolucionar hacia el equilibrio, descrito en la termodinámica, parece determinar una dirección temporal. Una gota de tinta vertida en un vaso, se diluye en él hasta formar una mezcla homogénea. La taza de café, se enfriá hasta estar a temperatura ambiente. Uno nunca observa que la taza de café espontáneamente se caliente, o que la tinta diluida en un vaso de agua se reagrupa en una gota. Durante gran parte de su vida, Boltzmann pensó varias estrategias para explicar el mecanismo detrás de esta ineludible irreversibilidad, introduciendo su famoso teorema H.

Poco tiempo después de la publicación del teorema H, su amigo J. J. Loschmidt planteó objeciones a estos conceptos, dando origen a lo que hoy se conoce como la Paradoja de Loschmidt [3]. Su argumento se basa en la idea de que si todas las velocidades de las partículas de un gas (sistema que Boltzmann estaba considerando) fueran invertidas, el sistema evolucionaría hacia un estado anterior, lo que implicaría una disminución en la entropía. En aquel momento, Boltzmann desafió a Loschmidt a invertir todas las velocidades de las partículas de un gas, convirtiendo así esta paradoja en meramente un experimento mental (Gedankenexperiment).

El tiempo le dio revancha a Loschmidt y los avances tecnológicos hicieron posible realizar experimentos donde la evolución de distintos sistemas físicos es revertida, al menos parcialmente (siempre existe algo que no vuelve a su estado original). El trabajo pionero

1.1. SISTEMAS CUÁNTICOS.

fue el Eco de Hahn en Resonancia Magnética Nuclear (NMR) [4]. Hahn observó que la dinámica de espines individuales en presencia de un campo externo puede ser revertida, incluso después de que estos se hayan desfasado debido a diferentes campos locales, mediante la aplicación de un pulso de radiofrecuencia, lo que resulta en la inversión de su sentido de precesión. Este tipo de experimento, el primero de una categoría que hoy denominamos Ecos de Loschmidt (LEs), no solo probó ser una manera directa de estudiar algo tan fundamental como la reversibilidad de una dinámica, si no que también logró establecerse como una técnica crucial para obtener información de los sistemas cuánticos y sus ambientes [5]. Se convirtieron así, en una herramienta fundamental tanto de la ciencia básica como de varias aplicaciones tecnológicas, en un rango que va desde el estudio del caos cuántico [6] hasta la generación de imágenes médicas [7,8].

En esta tesis, utilizamos los Ecos de Loschmidt tanto como una herramienta genérica para estudiar la evolución coherente de un Hamiltoniano como para cuantificar los efectos de ruido y perturbaciones en un sistema en contacto con un ambiente.

En el primer caso, el LE nos permitirá medir el nivel de “desparramo” o “revoltijo” que genera tanto en el espacio real como en el espacio de Hilbert. Este procedimiento permite extraer información global del sistema midiendo solo observables locales. En otras palabras, en experimentos donde solo se tiene acceso a medir algunos observables locales del sistema, el LE permite sortear esta dificultad para obtener información de la distribución espacial total de la función de onda que describe las excitaciones o del número de espines correlacionados por la dinámica.

En el segundo, permite cuantificar los efectos de ruido y perturbaciones (decoherencia) en la dinámica cuántica de un sistema. Para estos casos, no solo es una herramienta que permite realizar cálculos numéricos eficientemente, si no que también brinda la posibilidad de entender a un nivel más profundo cómo la decoherencia afecta al sistema.

Usualmente se piensa que las perturbaciones, que pueden ser ruido, interacciones con el ambiente o cualquier efecto que no podemos revertir, como algo negativo. Sin embargo, estas pueden ser utilizadas como una herramienta, por ejemplo, para diferenciar un tejido de otro en una imagen de NMR [8]; puede facilitar la formación ó ruptura de una molécula en un proceso catalítico [9]; ó incluso, puede jugar un papel fundamental en varios procesos biológicos [10, 11], facilitando la transferencia eficiente de carga y energía [12] que hacen sustentable la vida. Estos procesos están ejemplificados en la Fig. 1.1.

En las secciones siguientes de este capítulo introduciré, con mayor detalle, varios conceptos que se utilizan a lo largo de esta tesis, finalizando con una sección donde se describe la organización de los capítulos restantes y su relación con los conceptos discutidos en este capítulo.

1.1. Sistemas cuánticos.

Un sistema cuántico está descrito por un vector de onda $|\psi\rangle$ cuya evolución viene dada por la Ec. de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle, \quad (1.1)$$

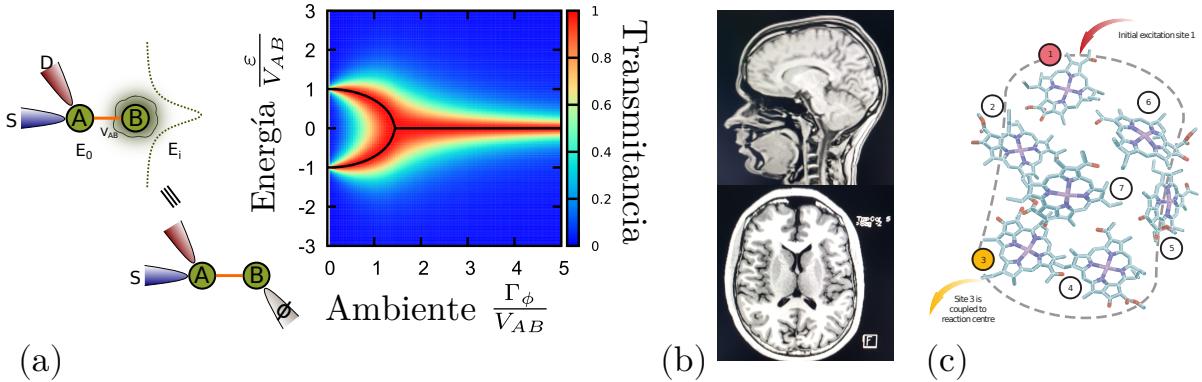


Figura 1.1: (a) Izquierda: Representación del sistema, una molécula AB, sobre la cual actúa un ambiente en B y se realiza un experimento de tunelamiento a través de A. Derecha: Transmitancia (mapa de color) a través en función de la energía y magnitud del ambiente, la magnitud del ambiente genera una transición de fase identificada con la disociación de la molécula. Figura tomada de: *Simulating a catalyst induced quantum dynamical phase transition of a Heyrovsky reaction with different models for the environment* Lozano-Negro et al. [9]. (b) Imagen de NMR del cerebro del autor obtenida utilizando la secuencia de echo planar imaging, donde la alta sensibilidad a la pérdida de coherencia por inhomogeneidades en el campo y relajación espín-espín permite discriminar distintos tejidos e incluso su respuesta hemodinámica. La imagen fue tomada como parte de la tesis doctoral de Milena Capiglioni [13]. (c) Esquema de un complejo fotosintético de antenas clorofílicas donde los fotones dan lugar a excitaciones cuya dinámica podría ser optimizada por el ambiente. Figura tomada de *Quantum Biology* Lambert et al. [14].

consecuentemente, la dinámica de la función de onda estará determinada por los autovectores y autovalores (energías) del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} |\psi(0)\rangle = \sum_{\nu} a_{\nu} e^{-i\varepsilon_{\nu}t/\hbar} |\varphi_{\nu}\rangle, \quad (1.2)$$

donde $|\varphi_{\nu}\rangle$ es un autovector del Hamiltoniano con autoenergía ε_{ν} , y $a_{\nu} = \langle \varphi_{\nu} | \psi(0) \rangle$. Usualmente, se denota $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar}$ al operador evolución.

De una forma más general, podemos tener inicialmente un ensamble de estados cuánticos $|\psi_i\rangle$ con probabilidades p_i ($\sum_i p_i = 1$). La dinámica de este ensamble es descrita por el operador matriz densidad,

$$\hat{\rho}_0 = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (1.3)$$

Su evolución está determinada por la ecuación de *von Neumann* o *Liouville*,

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}(t)] \quad (1.4)$$

siendo el operador matriz densidad evolucionado:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t) \rho_0 \hat{U}^{\dagger}(t) = \sum_i p_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|. \quad (1.5)$$

Un observable se define mediante un operador Hermítico, representado de manera

1.2. TERMALIZACIÓN, ERGODICIDAD Y CAOS.

genérica como \hat{O} . Los posibles valores medibles de un observable están determinados por sus autovalores. En consecuencia, el valor medio de un observable, es decir, la suma de cada posible valor ponderado por su probabilidad en un estado dado, viene dada por $O(t) = \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle$, o bien, utilizando el formalismo de matriz densidad $\text{Tr}\{\hat{O}\hat{\rho}(t)\}$.

1.2. Termalización, Ergodicidad y Caos.

Supongamos un sistema aislado sujeto a algunas restricciones macroscópicas (energía, volumen, magnetización, etc). Para calcular sus propiedades de equilibrio, utilizando la mecánica estadística, se toma un ensamble de estados que evolucionan con el mismo Hamiltoniano sujetos a las mismas restricciones, se asigna alguna probabilidad para cada uno y se calculan las propiedades tomando promedios sobre este ensamble.

Este procedimiento difiere notoriamente de lo que sucede usualmente en un experimento, donde hay un único sistema. Típicamente, el mismo se encuentra inicialmente fuera de equilibrio, observando tanto su respuesta, dinámica, y valores de equilibrio (tiempos largos). La relación, y eventual equivalencia, entre estos experimentos y los cálculos usuales de la mecánica estadística está lejos de ser obvia.

Para unir estas visiones, prácticamente todos los libros de mecánica estadística introducen la Hipótesis Ergódica [15], la cual establece que durante su evolución temporal, un sistema ergódico visita todas las regiones del espacio de fases, y en consecuencia los promedios temporales de la dinámica son equivalentes a los promedios de ensamble. Si bien esta hipótesis fue demostrada para unos cuantos sistemas clásicos (Billar de Sinai, estadio de Bunimovich, etc) [16], son necesarias algunas consideraciones:

Primero, las escalas de tiempo necesarias para explorar todo el espacio de fases crecen exponencialmente con el número de grados de libertad, i.e., inalcanzables en un sistema macroscópico. Segundo, implica la termalización en un sentido *débil*: los observables alcanzan los valores térmicos después de promediar temporalmente. En contraposición, la termalización *fuerte* implica una convergencia directa del observable al valor térmico [17], siendo además mucho más rápida.

Una línea de pensamiento diferente, nota que los observables **macroscópicos** tienen los mismos valores en casi todas las configuraciones del espacio de fases (compatibles con las restricciones macroscópicas). Dentro de este esquema, para lograr la termalización, el sistema solamente debería llegar a estados “típicos”, lo cual puede suceder mucho más rápido que una exploración extensiva del espacio de fases. Una observación en la misma dirección fue hecha por von Neumann en 1929 [18, 19], donde argumentó que para estudiar la termalización de un sistema uno debe enfocarse en observables físicos específicos y no en la función de onda o en la matriz densidad del sistema.

1.2.1. Hipótesis de termalización de los autoestados (ETH).

Analicemos en mayor detalle las ideas propuestas por von Neumann. Para que el sistema termalice es necesario que $O(t)$, después de algún tiempo de relajación, coincida (en media) con el valor medio del observable tomado sobre un ensamble microcanónico, siendo las fluctuaciones temporales pequeñas.

Computando el valor medio $O(t)$ para un estado inicialmente fuera de equilibrio, como $|\psi(0)\rangle$ no es autoestado del Hamiltoniano, tenemos,

$$O(t) = \sum_{\nu\mu} a_\mu^* a_\nu e^{i(\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu)t/\hbar} O_{\nu\mu} = \sum_\nu |a_\nu|^2 O_{\nu\nu} + \sum_{\nu \neq \mu} a_\mu^* a_\nu e^{i(\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu)t/\hbar} O_{\nu\mu} \quad (1.6)$$

siendo $O_{\nu\mu} = \langle \varphi_\nu | \hat{O} | \varphi_\mu \rangle$.

Suponiendo que no existen degeneraciones en el sistema debido a la presencia de desorden, falta de simetrías e interacciones de largo alcance, es directo que al tomar promedio temporal de este observable el segundo término irá a cero. Sin embargo, es posible que necesitemos tiempos extremadamente largos para que esto suceda, ya que $(\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu)$ puede ser exponencialmente chico en el tamaño del sistema. Aun suponiendo que esto no sucede, sigue abierta la pregunta: ¿cómo es posible que, incluso para diferentes condiciones iniciales, $\sum_\nu |a_\nu|^2 O_{\nu\nu}$ coincida con el valor medio tomado sobre el ensamble?

Una posible solución sería que los valores de $O_{\nu\nu}$ fuesen (a menos de alguna fluctuación pequeña), independientes de ν . Este es el caso al suponer que $\hat{\mathcal{H}}$ es una matriz aleatoria [20]. Es más, bajo esta suposición $O_{\nu\mu}$ ($\nu \neq \mu$) es exponencialmente chico con el tamaño del sistema, evitando la necesidad de esperar tiempos extremadamente largos. No obstante, al suponer un Hamiltoniano aleatorio, hay mucha física que se pierde, por ejemplo, la dependencia del tiempo de relajación en el observable considerado. Es decir, existe información en los elementos no diagonales del observable que no debe ser despreciada para una descripción adecuada de los sistemas experimentales.

La hipótesis de termalización de los autoestados (ETH), propuesta por M. Srednicki [21] generalizó las propiedades de Hamiltonianos aleatorios a sistemas físicos específicos [22]. La misma establece que

$$O_{\nu\mu} = O(\bar{E})\delta_{\nu\mu} + e^{-S(\bar{E})}f_O((\bar{E}), \omega)R_{\nu\mu} \quad (1.7)$$

donde $\bar{E} = (\varepsilon_\nu + \varepsilon_\mu)/2$, $\omega = (\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu)$, $S(\bar{E})$ es la entropía termodinámica a energía \bar{E} , $O(\bar{E})$ coincide con el valor de expectación en el ensamble microcanónico, f_O es una función continua, y $R_{\nu\mu}$ elementos aleatorios de media cero y varianza uno.

Esta hipótesis fue confirmada para varios sistemas y observables, aunque no está totalmente claro cuáles deben ser las condiciones a satisfacer tanto por el Hamiltoniano como por el observable. Se espera que sea válida para observables con “significado físico” en situaciones típicas de Hamiltonianos complejos de muchos cuerpos [23]. En cierta forma, la ergodicidad, el caos, y la termalización del sistema están codificados en los autoestados del Hamiltoniano y se reflejan en la dinámica de las excitaciones.

1.2.2. El caos como un camino a la difusión.

¿Qué es lo primero que pensamos al hablar de caos? Personalmente, pienso en el efecto mariposa o el péndulo doble. Lo primero, una representación genérica (o mejor dicho popular) de la “impredictibilidad” o pseudo-aleatoriedad de los sistemas caóticos, lo segundo, un caso particular donde puede ser observado de manera simple. Sin embargo, el caos es también un camino al determinismo, a las leyes simples [24].

Este último concepto es incluso previo al desarrollo del caos como una materia de es-

1.3. AUSENCIA DE TERMALIZACIÓN.

tudio autónoma. Estaba presente en las ideas originales de los padres de la termodinámica y es claramente plasmado en “What is life?” por Schrödinger al discutir lo que él llama “Orden a partir del desorden (*order-from-disorder*)”. Pero pensemos en un ejemplo simple, tomemos un pistón con un resorte, y algunas partículas en la cavidad. Si tenemos una sola partícula, la misma irá rebotando contra las paredes y contra el pistón (generando un movimiento en el mismo) y afectando futuros rebotes. Si el número de partículas aumenta, pero sigue siendo relativamente pequeño, la dinámica se vuelve caótica. Sin embargo, si el número de partículas es extremadamente grande, esta dinámica caótica conduce a un movimiento determinista en el pistón: una oscilación amortiguada. Este es el origen de muchos fenómenos físicos, fricción, viscosidad, presión, propiedades elásticas y eléctricas de los materiales, propagación del sonido, difusión, etc. Todos estos fenómenos predecibles emergen del caos a escalas menores, a costa de perder predictibilidad microscópica.

Particularmente, considerando un sistema difusivo clásico, se puede conectar directamente el coeficiente de difusión con magnitudes microscópicas del sistema expresándolo como una suma de los exponentes de Lyapunov positivos y la entropía de Kolmogorov-Sinai en el límite del tamaño del sistema yendo a infinito [25]. En el dominio cuántico fue Robert Laughlin quien propuso que la conductividad es medida de la inestabilidad “caótica” del movimiento de los electrones, conectando la difusión con el caos, y dando origen a la ley de Ohm [26]. En cierto modo, resolviendo el dilema de que la distribución de impurezas en un metal, termina siendo una distribución única y no aleatoria [27].

En lo que concierne a la evolución y termalización de un observable cuántico, el caos genera un comportamiento de los autoestados y autoenergías que se asemeja al observado en matrices aleatorias. Es decir, autoenergías con una distribución de separación del tipo Wigner-Dyson y autoestados que asemejan vectores aleatorios [23, 28]. Este fenómeno, por lo general, resulta ser suficiente para asegurar el cumplimiento de la Hipótesis de Termalización de los Autoestados (ETH).

1.3. Ausencia de termalización.

Naturalmente, surge la búsqueda de sistemas, generalmente ideales, que no cumplen con la hipótesis de termalización de los autoestados. Es evidente que tales sistemas existen; por ejemplo, en los sistemas integrables, donde la dinámica está determinada por un conjunto de cantidades conservadas. Las cadenas de espines ordenadas, como la cadena de Ising, exhiben grandes fluctuaciones y recurrencias debido al confinamiento de excitaciones cuánticas. Además, hay sistemas que muestran “cicatrices cuánticas” (*quantum scars*), donde los valores medios de los observables tienen oscilaciones periódicas [29]. Incluso hay casos en los que ciertos sistemas evolucionan hacia un estado pre-térmico, permaneciendo en este estado durante largos períodos de tiempo [30, 31]. Otro ejemplo son los materiales aislantes topológicos, inspirados en el efecto Hall cuántico entero. En estos materiales, a pesar de comportarse como aislantes en su interior, presentan en su superficie estados conductores protegidos por simetría [32]. Sin embargo, el caso de ausencia de termalización más destacado sigue siendo la localización de Anderson, el cual será ampliamente discutido en esta tesis y merece una sección en sí misma.

1.3.1. Localización.

P. W. Anderson, inspirado por los experimentos de resonancia magnética de G. Feher [33], exploró la difusión de una excitación de espín a través de las impurezas de un semiconductor. Específicamente, con el propósito de establecer un modelo que, sin simplificaciones excesivas, abordara la ausencia de transporte, investigó la dinámica cuántica en una red en presencia de desorden. Su objetivo era comprender el origen de este fenómeno y sus implicaciones, entre las cuales destacaba la importancia de encontrar un ejemplo de,

“...a real physical system with an infinite number of degrees of freedom, having no obvious oversimplification, in which the approach to equilibrium is simply impossible.”

El modelo desarrollado por Anderson [33] no solo demostró que la presencia de desorden aleatorio en las energías de los sitios conduce a la localización de las funciones de onda en redes unidimensionales y bidimensionales [34, 35], sino que también evidenció que en tres dimensiones existe un valor crítico de desorden que provoca una transición de fase entre estados extendidos y localizados [36]. Esta transición, conocida como la transición de Anderson (AL, *Anderson Localization*), se reveló de, en palabras de Nakamura [27], “una importancia comparable a la transición sólido-líquido en la física” [37].

Los resultados de Anderson, válidos para sistemas de una sola partícula, demostraron que en presencia de la localización, el sistema no puede alcanzar la termalización. Además, sugirió que este efecto persistiría incluso con la introducción de interacciones de muchos cuerpos [38]. Esto no era obvio en absoluto, ya que el número exponencialmente grande de configuraciones de muchas partículas podría generar nuevos caminos a través de los cuales la excitación podría difundirse. La búsqueda de una respuesta acerca de si la localización sobrevive a la presencia de interacciones abrió el (ahora inmenso) campo de Localización de Muchos Cuerpos (MBL, *Many-Body Localization*) [20, 22, 39, 40, 40–44].

MBL: Localización de muchos cuerpos.

Después de varios años desde su proposición inicial, se estableció (teóricamente) la existencia de la Many-Body Localization (MBL) en sistemas finitos (puntos cuánticos) [39] y en sistemas de dimensiones superiores con interacciones locales [45, 46]. Desde el punto de vista experimental, la implementación de sistemas de muchos cuerpos cuidadosamente aislados de un ambiente externo posibilitó el estudio de la dinámica cuántica intrínseca de estos sistemas. Esto incluye la observación directa de la localización de Anderson, tanto en ausencia como en presencia de interacciones [43]. Tales avances han permitido investigar de manera directa, en sistemas relativamente pequeños, la aparición o ausencia del proceso de termalización. Algunos sistemas típicos donde se observa MBL para diferentes magnitudes las de interacciones de muchos cuerpos, son las cadenas de espines desordenadas [47] o en presencia de un potencial cuasi-periódico [44, 48].

Desde el punto de vista fundamental, la localización de muchos cuerpos se diferencia de otros ejemplos de sistemas que no termalizan debido a su estabilidad intrínseca. En general, muchos sistemas integrables termalizan al agregar pequeñas interacciones o al cambiar levemente la forma del Hamiltoniano [23]. Esta robustez abre las puertas a nuevos fenómenos que no pueden ser descritos por la mecánica estadística. Por ejemplo:

1.4. ECOS DE LOSCHMIDT Y OTOCS.

“localization-protected quantum orders” [49], cristales en el tiempo [50, 51] y aislantes de Floquet [52].

Este cambio de paradigma en los experimentos corrió el foco del estudio de magnitudes macroscópicas a magnitudes inherentes a la dinámica cuántica, a saber, la dispersión del observable posición de una excitación local, el inverso de la razón de participación, la probabilidad de supervivencia, o diferentes tipos de entropía. Una manera de extraer esta información en sistemas experimentales es mediante la utilización de técnicas de Eco de Loschmidt o Funciones de correlación sin orden temporal (OTOCs, *out-of-time order correlator*).

1.4. Ecos de Loschmidt y OTOCs.

Los ecos de Loschmidt (LE, Loschmidt Echoes), son observables inherentemente amplios, siendo el común denominador el hecho que surgen de un procedimiento de reversión temporal. Un eco de Loschmidt resulta de observar si, luego de tal reversión, una excitación regresa al mismo estado inicial, o a algún estado con características compartidas (por ejemplo, el mismo valor medio sobre un dado observable) [53]. El concepto base nace, como fue descrito, en una discusión entre Boltzmann y Loschmidt para un gas de partículas.

El primer experimento numérico fue computado por Tuck [54], tratando de ver la influencia de errores numéricos en un sistema de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou [55]. Después de varios ciclos de evolución, la dinámica es invertida, observándose, una reversión total del sistema. Si bien esto pasó desapercibido en aquel momento, era una prueba numérica de la regularidad de la dinámica en el modelo [56]. Una dinámica caótica, clásicamente caracterizada por una sensibilidad exponencial a cambios en las condiciones iniciales, hubiera generado cambios drásticos en la dinámica revertida (debido a errores numéricos) imposibilitando la observación de un eco.

Hoy en día, los ecos de Loschmidt son una de las principales herramientas para estudiar el caos cuántico, la termalización, la dinámica de excitaciones, la codificación de información y la localización de muchos cuerpos. Los mismos han sido implementados tanto en experimentos de NMR, como en sistemas experimentales innovadores, usualmente con técnicas inspiradas en la NMR [50, 57–61]. La implementación de la inversión temporal también juega un papel clave para desenmascarar el ruido ambiental, logrando eventualmente su eliminación con estrategias ampliamente conocidas como “desacoplamiento dinámico” (*dynamical decoupling*) [62–65].

1.4.1. Ecos de Loschmidt en el mundo cuántico.

En un sistema cuántico, la comparación entre dos funciones de onda viene dada por el producto interno $|\langle \psi'_0 | \psi_0 \rangle|^2$. Es fácil notar que al evolucionar cada uno de estos estados el valor de esta magnitud no cambia $|\langle \psi'_0 | e^{i\hat{H}t/\hbar} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi_0 \rangle|^2 = |\langle \psi'_0 | \psi_0 \rangle|^2$, este hecho generó controversias alrededor de la existencia del caos cuántico dinámico, ya que no se observa una sensibilidad al cambio de condiciones iniciales.

Una nueva perspectiva surgió al notar que la perturbación no necesariamente modifica el estado, sino que puede aparecer una como modificación del Hamiltoniano que gobierna

la evolución [53, 66, 67]. Bajo esta perspectiva, en un problema de un cuerpo, el Eco de Loschmidt puede escribirse como:

$$M(t) = |\langle \psi_0 | e^{i\hat{\mathcal{H}}_2 t/\hbar} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_1 t/\hbar} | \psi_0 \rangle|^2, \quad (1.8)$$

donde $\hat{\mathcal{H}}_1$ y $\hat{\mathcal{H}}_2$ corresponden a los Hamiltonianos de la evolución hacia adelante y hacia atrás respectivamente. Generalmente, se considera que $\hat{\mathcal{H}}_1 = \hat{\mathcal{H}}_2 + \hat{\Sigma}$, siendo $\hat{\Sigma}$ una perturbación no controlada.

En muchos casos experimentales, es útil considerar una perturbación que actúa solo durante un breve período Δt entre la evolución hacia delante y hacia atrás, es decir, como un operador unitario $e^{i\hat{\Sigma}\Delta t/\hbar}$, de manera que:

$$M(t) = |\langle \psi_0 | e^{i\hat{\mathcal{H}}_1 t/\hbar} e^{i\hat{\Sigma}\Delta t/\hbar} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_1 t/\hbar} | \psi_0 \rangle|^2. \quad (1.9)$$

Estos conceptos pueden ser generalizados observando, no el retorno a un estado particular, si no el retorno del valor medio de un observable. En este caso el decaimiento es generalmente más lento, ya que el estado puede regresar a un estado diferente compatible con el valor medio de un observable [68], $|\langle \psi_0 | e^{i\hat{\mathcal{H}}_1 t/\hbar} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_2 t/\hbar} \hat{O} e^{i\hat{\mathcal{H}}_2 t/\hbar} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_1 t/\hbar} | \psi_0 \rangle|^2$. En el formalismo de Matriz Densidad, donde el estado inicial no es necesariamente un estado puro, tendríamos:

$$M_O(t) = \text{Tr} \left\{ \hat{O} e^{i\hat{\mathcal{H}}_2 t/\hbar} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_1 t/\hbar} \rho_0 e^{i\hat{\mathcal{H}}_1 t/\hbar} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_2 t/\hbar} \right\}. \quad (1.10)$$

La implementación de ecos de Loschmidt es estándar en Resonancia Magnética Nuclear desde los años 50, convirtiéndolo en el marco pionero en el testeo de la controversia de Loschmidt-Boltzmann [69, 70]. El eco de Loschmidt permite extraer información de diferentes características del sistema observando su decaimiento a distintas escalas de tiempo y cuantificando sus valores de equilibración y fluctuaciones [68, 71–75]. Finalmente, uno podría considerar el Eco de Loschmidt al realizar una evolución no-Hermítica (en un sistema abierto), lo que será discutido en el Capítulo 3.

1.4.2. OTOCs: Funciones de Correlación sin orden temporal.

El concepto de Funciones de Correlación sin orden temporal (OTOC, *out-of-time order correlator*), fue introducido por Larkin y Ovchinnikov, mientras estudiaban del efecto de la dispersión de electrones debido a las impurezas en superconductores desordenados [76]. En estas condiciones predijeron el crecimiento dinámico exponencial del módulo cuadrado del comutador de un par de operadores de Heisenberg que inicialmente comutan, por ej. \hat{x} y \hat{p}_y . Los OTOC permanecieron mayormente inadvertidos, hasta que se reconoció su relevancia en el estudio del caos cuántico en problemas de muchos cuerpos, en particular campos cuánticos en la proximidad de un agujero negro [77, 78].

De manera simplificada, los OTOCs describen una evolución promedio de operadores a tiempos diferentes. Siendo definidos genéricamente como:

$$C_{\hat{V}\hat{W}}(t) = \text{Tr} \left\{ [\hat{W}(t), \hat{V}]^\dagger [\hat{W}(t), \hat{V}] \right\}. \quad (1.11)$$

Si los operadores son Hermíticos resulta,

$$C_{\hat{V}\hat{W}}(t) = -\text{Tr} \left\{ \left[\hat{W}(t), \hat{V} \right]^2 \right\}, \quad (1.12)$$

y si además la dinámica es unitaria podemos reescribirlo como,

$$C_{\hat{V}\hat{W}}(t) = 2 \left(1 - \text{Tr} \left\{ \hat{W}(t)^\dagger \hat{V}^\dagger \hat{W}(t) \hat{V} \right\} \right) \quad (1.13)$$

donde el segundo término puede ser interpretado como un Eco de Loschmidt, donde el estado inicial \hat{V} evoluciona durante un tiempo t , y luego es perturbado por \hat{W} . Posteriormente, sigue una evolución de inversión temporal antes de aplicar una medición (\hat{V}^\dagger) [79, 80]:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left\{ \hat{W}(t)^\dagger \hat{V}^\dagger \hat{W}(t) \hat{V} \right\} &= \text{Tr} \left\{ \hat{V}^\dagger U(t) \hat{W} U^\dagger(t) \hat{V} U(t) \hat{W}^\dagger U^\dagger(t) \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ \hat{V}^\dagger \hat{\Phi}(t) \hat{V} \hat{\Phi}^\dagger(t) \right\} \end{aligned}$$

siendo $\hat{\Phi}_{\hat{W}}(t) = U(t) \hat{W} U^\dagger(t)$ el operador Eco de Loschmidt.

Usualmente, se asume que el soporte de los operadores \hat{V} y \hat{W} es local. Por ejemplo, en un sistema de espines, se suelen asociar a operadores de espín locales \hat{S}_i^z .

Como es de esperar, debido a correspondencia entre los OTOCs y los ecos de Loschmidt, los mismos han sido ampliamente utilizados en Resonancia Magnética Nuclear de forma independientemente y bajo otros nombres. Entre las aplicaciones pioneras se desacata la secuencia de Coherencias Cuánticas Múltiples [81, 82] que permite determinar $K_G(t)$, el número de espines correlacionados en el sistema [57, 83], a partir de un OTOC derivado de múltiples experimentos de eco:

$$K_G(t) = -\frac{1}{\text{Tr}\{(\hat{S}^z)^2\}} \text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}^z, \hat{S}^z(t) \right] \left[\hat{S}^z, \hat{S}^z(t) \right] \right\}, \quad (1.14)$$

siendo \hat{S}^z el operador magnetización total en la muestra.

1.5. Ruido y Decoherencia: Sistemas abiertos.

La decoherencia entró en el mundo del estudio de sistemas cuánticos a través de dos senderos sinuosos pero entrelazados. Por un lado, desde una perspectiva fundamental, en el estudio de la emergencia de la mecánica clásica desde la mecánica cuántica y en el problema de la medición; entre los trabajos pioneros se encuentra el de N. Mott en 1929 [84, 85]. Por otro lado, desde un enfoque más práctico, considerando el transporte electrónico por R. Landauer [86] y M. Büttiker [87]. En esencia, la decoherencia surge como consecuencia de todas las interacciones que, debido a su complejidad, no podemos integrar al modelo que sabemos resolver, pero que influyen en la dinámica cuántica.

Típicamente, tanto para electrones como para espines, los efectos del entorno pueden originarse en interacciones con fotones, fonones, momentos magnéticos, campos eléctricos y otros electrones/espines. Cada uno de estos procesos genera, ya sea de forma individual

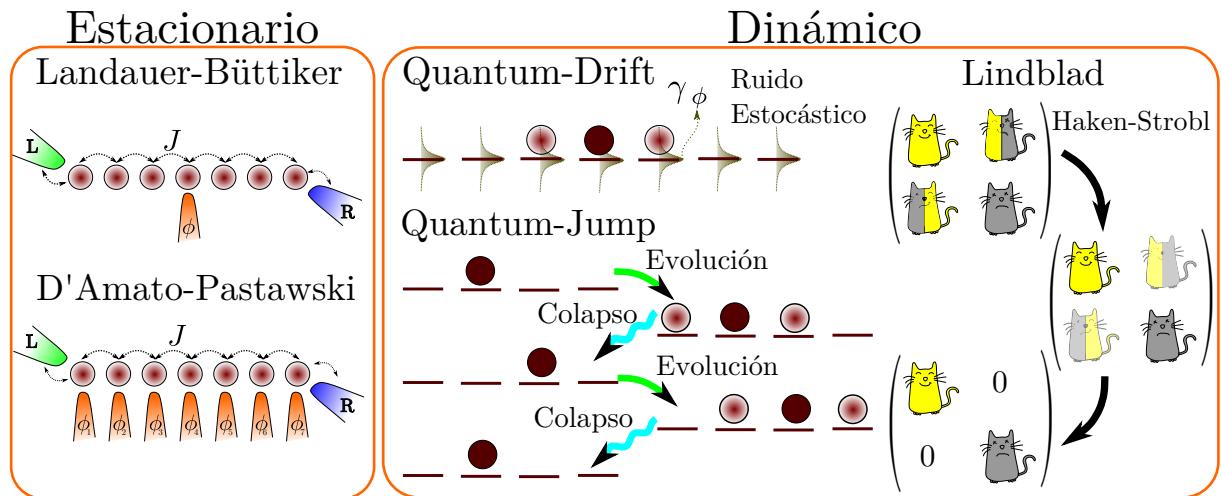


Figura 1.2: Representación esquemática de las posibles formas de introducir los efectos de un ambiente decoherente a un sistema cuántico. Panel izquierdo: Un acercamiento estacionario al problema permite calcular propiedades a energía constante (e.g. transmitancias, long. de localización, camino libre medio, etc). Generalmente, el sistema cuántico está conectado a dos terminales (L y R , representadas en verde y azul) que actúan como fuente y sumidero de excitaciones. Los procesos decoherentes son introducidos por reservorios (ϕ_i , representados en naranja). **Landauer-Büttiker:** Los procesos decoherentes son introducidos por un único voltímetro afectando un sitio particular del sistema. **D'Amato-Pastawski:** Cada sitio es afectado por un reservorio independiente. Panel derecho: Un acercamiento dinámico al problema permite observar los efectos del ambiente en la evolución de excitaciones. El efecto sobre la dinámica puede verse mediante: **Quantum-Drift:** La excitación evoluciona en presencia de fluctuaciones temporales en las energías de sitio (representado como incertidumbres Lorentzianas). **Quantum-Jumps:** El ambiente genera sucesivos procesos de colapso local intercalados por evoluciones coherentes. **Haken-Strobl (Linblad):** Atenua exponencialmente los elementos no-diagonales de la matriz densidad, permitiendo una evaluación directa de valores medios de los observables. En media, todas estas visiones son equivalentes.

1.5. RUIDO Y DECOHERENCIA: SISTEMAS ABIERTOS.

o en un conjunto, una degradación en la dinámica, atenuando las recurrencias e interferencias características de los sistemas cuánticos sencillos. Se denomina decoherencia a esta degradación en las fases específicas que permiten interferencias y recurrencias propias de modelo simplificado. A continuación, introduciremos brevemente algunos de los modelos fundamentales de decoherencia en la dinámica y el transporte cuántico esquematizados en la Figura 1.2.

1.5.1. Landauer→Büttiker →D'Amato-Pastawski.

Landauer considera el transporte estacionario en un sistema cuántico conectado a dos reservorios de electrones. Cada uno de estos reservorios entrega electrones al sistema de manera incoherente e independiente uno del otro [86]. Estos son, en este análisis, la única fuente de decoherencia del sistema. Sin embargo, al igual que los dos reservorios, cualquier elemento de medición conectado al sistema podría actuar de manera similar. En particular, Büttiker incorporó la presencia de un voltímetro en la descripción del sistema, el cual toma electrones y los devuelve de manera incoherente [87]. En cierto modo, la medición implicaría el colapso de la función de onda del electrón, ya que cada electrón es devuelto al sistema (asegurando que el voltímetro no toma corriente) sin memoria de su estado anterior, generando decoherencia. La inclusión de estos procesos implica que la transmitancia efectiva entre los reservorios, no solo esté dada por la transmitancia directa entre ambos reservorios, sino que también está condicionada por la transmitancia entre cada reservorio y el voltímetro, lo que se conoce como transporte incoherente.

D'Amato y Pastawski (DP) notaron que los efectos de grados de libertad ambientales acoplados a cada estado electrónico “local” podrían considerarse como un voltímetro independiente. Visualmente, podemos pensar que el ambiente “mide” los electrones, generando un colapso, o equivalentemente que toma un electrón y lo devuelve de forma totalmente incoherente [88]. Ambos modelos, Landauer-Büttiker y D'Amato-Pastawski, permiten calcular la transmitancia efectiva a una dada energía, por lo cual son considerados modelos estacionarios (Panel izquierdo de la Fig. 1.2).

La extensión de este modelo (*Generalized Landauer-Büttiker Equations*, GLBE) permite incluir una distribución continua de “voltímetros” [89], aportando también una visión dinámica del problema, y brindando una interpretación física exquisita en términos de colapsos cuánticos recurrentes de la función de onda que será explotada en esta tesis.

1.5.2. Quantum-Drift, Quantum-Jumps, y Haken-Strobl.

La principal desventaja del modelo GLBE radica en su elevada demanda de recursos al ser tratado numéricamente. Esta limitación fue superada mediante la aplicación del modelo de Quantum-Drift [90], esquematizado en el panel derecho de la Fig. 1.2. En este enfoque dinámico, una excitación cuántica evoluciona a partir de una dinámica Trotter-Suzuki (dinámica paso a paso, siguiendo la evolución coherente de acuerdo al Hamiltoniano del sistema). A esta se le superpone una dinámica estocástica que implica fluctuaciones en las energías de los sitios [90].

Este modelo mostró estar intrínsecamente ligado a modelos (dinámicos) de colapso de la función de onda (*quantum jumps*). En tales modelos, el sistema evoluciona coherente durante un intervalo de tiempo aleatorio, para luego colapsar en un sitio con una

probabilidad determinada por la evolución coherente. Este tipo de modelos fue utilizado por Ghirardi-Rimini-Webber [91] para justificar un comportamiento clásico en las escalas macroscópicos.

Al considerar un conjunto de realizaciones de los procesos mencionados anteriormente (Quantum-Drift y Quantum-Jumps), ambos conducen a la misma dinámica del operador matriz densidad del sistema. Según el formalismo de Lindblad para sistemas cuánticos abiertos [92], esta evolución está determinada por la ecuación:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \mathcal{L}[\hat{\rho}] = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}] - \frac{\gamma_\phi}{2\hbar} \sum_{n=1}^N [|n\rangle \langle n|, [|n\rangle \langle n|, \hat{\rho}]], \quad (1.15)$$

donde γ_ϕ/\hbar representa una tasa de decoherencia relacionada tanto con la varianza de las fluctuaciones en el modelo Quantum-Drift como con el tiempo medio de colapso en el Quantum-Jump. Nótese que $-\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}]$ determina la evolución coherente del Hamiltoniano, mientras que $-\frac{\gamma_\phi}{2\hbar} \sum_{n=1}^N [|n\rangle \langle n|, [|n\rangle \langle n|, \hat{\rho}]]$ condensa los efectos del ambiente. En este caso, una atenuación exponencial de los términos no diagonales de la matriz densidad (coherencias) en la base de sitio. Este modelo de Lindbladiano, conocido como modelo de Haken-Strobl [93], es ampliamente utilizado para calcular el transporte de excitones en sistemas biológicos.

La equivalencia de estos tres modelos, resumidos en el panel derecho de la Fig. 1.2, radica en varias suposiciones no discutidas en los párrafos anteriores: tanto las fluctuaciones como los colapsos son totalmente independientes de los eventos anteriores (son Markovianos), y los procesos ocurren en la base de sitios. Por lo tanto, las coherencias en esta base son efectivamente las que se ven atenuadas exponencialmente. Estas mismas hipótesis forman parte del modelo D'Amato-Pastawski, lo que permite considerar al QD uno como una realización dinámica del primero o viceversa.

1.6. Sistemas biológicos.

Hasta aquí hemos discutido cómo los avances tecnológicos nos han capacitado para estudiar sistemas cuánticos “simples” y observar los efectos generados por una aleatoriedad controlada, incluso revirtiendo su dinámica. Sin embargo, estos avances también nos permiten investigar con mayor detalle los procesos biológicos, lo que implica adentrarnos en un terreno opuesto: la complejidad de los sistemas y sus entornos se incrementa. Esto ha abierto la posibilidad de que diversas ramas de la física y las matemáticas encuentren su aplicación en la biología, como la biofísica celular y molecular. Eventualmente, uno llega a preguntarse si no existen efectos cuánticos que estén involucrados en la biología. La respuesta obvia es: *Sí, existen. Todo proceso químico depende de la mecánica cuántica.* Sin embargo, uno puede afinar ligeramente la pregunta, volviéndola no trivial: ¿Existen sistemas biológicos que utilicen los efectos cuánticos para realizar una tarea de forma más eficiente, robusta o que de alguna manera no pueda realizarse de manera clásica? ¿Pudo la evolución haberle dado “poderes cuánticos” a ciertos organismos?

El primer lugar donde mirar son los sistemas fotosintéticos, de donde proviene prácticamente toda la energía que permite la vida en la tierra. En estos sistemas los fotones provenientes del sol son absorbidos por las llamadas *light-harvesting antennas*, generando

1.7. HIPÓTESIS CENTRAL DE IRREVERSIBILIDAD.

una excitación electrónica, la cual es transportada hasta un centro de reacción donde una separación de cargas permite el almacenamiento de su energía en una forma más estable, la energía química.

Sorprendentemente, se ha observado que prácticamente el 100 % de los fotones absorbidos son transportados al centro de reacción, incluso cuando la vida media de estas excitaciones es muy corta. En 2007, Engel et al. [94] observaron evidencia de coherencias cuánticas en la estructura Fenna-Matthews-Olson (FMO), que permite la transferencia de excitaciones hacia el centro de reacción en las bacterias verdes del azufre (*green sulfur bacteria*). Si bien esta observación fue a baja temperatura (77 K), experimentos posteriores sugieren que la coherencia sigue sin ser despreciable incluso a temperatura ambiente [14]. Esto nos lleva a plantearnos preguntas significativas: ¿Puede esta dinámica coherente aportar eficiencia a proceso de absorción de energía? ¿El sistema encuentra la forma de escapar a la decoherencia o la utiliza a su favor?

Varios modelos fueron propuestos para representar la física de este problema, principalmente considerando al ambiente como baño térmico descorrelacionado y Markoviano [10, 12, 95]. En estos estudios, teóricos y experimentales, se observó que un entorno puede mejorar el transporte. De hecho, se argumenta que un transporte completamente coherente resulta inconsistente con el nivel de eficiencia observado en estos sistemas biológicos. En tal caso, la naturaleza podría estar explotando al ambiente a través de una “ingeniería” de interacciones con el entorno [96].

Siguiendo estas ideas, S. Kauffman [97] propuso la intrigante hipótesis del *poised realm*, “reino en equilibrio”, la cual afirma que muchos procesos biológicos ocurren *al borde del caos* [98]. Esta hipótesis llevó a Vattay y colab. [99] a proponer que sistemas unidimensionales cerca de una transición metal-aislante (*metal-insulator transition MIT*) son óptimos para el transporte. Para ello, argumentaron que en la vecindad del punto crítico, la decoherencia no debería afectar al sistema con la misma magnitud que en el régimen extendido, y al mismo tiempo garantizaría la deslocalización necesaria para el transporte.

1.7. Hipótesis central de Irreversibilidad.

Supongamos que podemos realizar un experimento de Loschmidt, el cual podemos ir perfeccionando progresivamente, es decir, nuestro Hamiltoniano de reversión es sistemáticamente más cercano al que originó la evolución en primer lugar. Por simplicidad, imaginemos un sistema simple, una dinámica de espines en una molécula pequeña, totalmente aislada del resto del universo. Al ir refinando nuestro experimento, nos acercaríamos cada vez más a un eco perfecto. Si fuéramos capaces de invertir todo en este sistema, desde el Hamiltoniano de espín hasta la vibración más pequeña, encontraríamos un retorno perfecto a la condición inicial.

Ahora supongamos que esta molécula no está aislada del resto del universo, sino que interactúa con algunas moléculas de su entorno (que también interactúan con otras), siente el efecto de vibraciones térmicas, recibe algo de radiación, etc. En este caso, no es obvio que la mejora sucesiva de los experimentos de reversión que incluya todo este colectivo nos lleve a un eco perfecto. Quizás, “*More is different*”, quizás existe un cambio la naturaleza del problema que impediría la reversión perfecta. El límite $N \rightarrow \infty$ nunca es trivial, y el problema primero debería ser resuelto para un sistema infinito, y solo entonces modificados

sus parámetros para describir un problema finito, lo que podría traer inconsistencias con nuestra descripción inicial del primer párrafo. En palabras de Anderson:

The essential idea is that in the so-called $N \rightarrow \infty$ limit of large systems (on our own, macroscopic scale) it is not only convenient but essential to realize that matter will undergo mathematically sharp, singular “phase transitions” to states in which the microscopic symmetries, and the microscopic equations of motion, are in a sense violated.

En este contexto, la idea se traduce en que, en el límite de un sistema infinito, de muchos cuerpos, cualquier perturbación podría verse extremadamente amplificada. Por consiguiente, su efecto no tiende a cero al disminuir la perturbación. Esta es la esencia de la Hipótesis Central de Irreversibilidad.

Experimentalmente, esta hipótesis encuentra su inspiración en observaciones de dinámica de espín en cristales orgánicos estudiados por NMR [100, 101], donde se observó un tiempo de irreversibilidad T_3 , que no podía ser mejorado de ninguna manera. Una conclusión apresurada podría ser que esta irreversibilidad T_3 tiene su origen en los elementos de la dinámica que no se invirtieron, particularmente en NMR, la parte no secular del Hamiltoniano. Sin embargo, experimentos que corrigen términos de mayor orden en la perturbación aún muestran un T_3 siempre más grande y proporcional a la escala de tiempo T_2 que caracteriza al Hamiltoniano revertido [6, 60]. Consecuentemente, el origen de esta irreversibilidad debería ser intrínseco al sistema (macroscópico), siendo postulado como una manifestación de la caoticidad del sistema, asociando T_3 , al menos en casos muy idealizados donde se puede aplicar una aproximación semiclásica, al inverso del coeficiente de Lyapunov que domina la dinámica clásica [60, 67].

1.8. Organización de la Tesis.

Esta tesis estudiamos, principalmente, la dinámica de sistemas cuánticos complejos. En cierto modo, la progresión de esta tesis se desarrolla de la mano al grado de complejidad del sistema cuántico. Comenzamos trabajando con sistemas aislados de una partícula; luego sistemas abiertos, al acoplarlos con un ambiente; y finalmente consideramos una dinámica de muchos cuerpos. Esto nos permite explorar varios de los temas discutidos en este capítulo: la equilibración; la localización, incluyendo su equivalente de muchos cuerpos; los efectos de un ambiente; la reversibilidad; la extensión de efectos cuánticos a sistemas biológicos y el límite termodinámico. Si bien los capítulos no son ortogonales, cada uno de ellos se centra en un problema particular, como se detalla a continuación.

En el Capítulo 2, introducimos y exploramos la potencialidad analítica del modelo Harper-Hofstadter-Andrè-Aubry (HHAA), el cual considera una cadena unidimensional sometida a un potencial cuasi-periódico. Este permite obtener una transición de fase entre estados localizados y extendidos a un valor finito de la amplitud del potencial. Una propiedad notable y muy útil es que esta transición ocurre simultáneamente para todos los autoestados. Nos centramos en la dinámica coherente de una excitación de un cuerpo, determinando su comportamiento y tiempos característicos tanto analítica como numéricamente. Esta caracterización sienta las bases para el estudio de este mismo potencial en sistemas con mayor complejidad en capítulos posteriores. Asimismo, se desarrolla un

1.8. ORGANIZACIÓN DE LA TESIS.

OTOC que permite investigar la localización del sistema cuando solo se tiene acceso a la observación de un único sitio de la red. Evaluando este OTOC en el sistema arquetípico de HHAA, obtenemos una interpretación directa del OTOC y de sus magnitudes derivadas en términos físicos.

En el Capítulo 3, profundizamos en el estudio de la dinámica cuántica en sistemas de una partícula al incluir la presencia de un ambiente. Comenzamos analizando la cadena de HHAA en presencia de un ambiente de Haken-Strobl, lo que nos permite explorar la hipótesis de que los sistemas unidimensionales cerca de una transición metal-aislante son óptimos para el transporte. Observaciones en este modelo nos llevan a introducir un modelo de colapsos cuánticos que nos permite una resolución analítica en varios regímenes extremos. La búsqueda de generalidad nos lleva a estudiar numéricamente otros modelos que también tienen regímenes extendidos y localizados: la cadena de Fibonacci, y el modelo de matriz aleatoria PBRM (*power banded random matrix*). Además, para el modelo HHAA discutimos cómo la decoherencia introducida por el ambiente afecta, no solo la dinámica, sino también la reversibilidad de la misma (Eco de Loschmidt).

En el Capítulo 4, extendemos el OTOC desarrollado en el Capítulo 2 para sistemas de espines interactuantes. Investigamos cómo este OTOC puede ser utilizado para estudiar el nivel de localización en la dinámica de espines (many-body), qué magnitudes aproxima, y cuánto difieren estos observables de los que resultan en el problema de una partícula. Utilizando el observable suma de magnetizaciones locales al cuadrado, cuyo cómputo es más eficiente, estudiamos el nivel de localización cuando interacciones many-body son incluidas en el Hamiltoniano de HHAA, observando la dinámica de equilibración, y sus valores de equilibrio como testigos de la localización.

En el Capítulo 5, exploramos la hipótesis, necesaria para interpretar adecuadamente los experimentos de NMR [79], de que es posible extraer información sobre la OTOCs locales a partir de observables globales. Esta “equivalencia” se pone a prueba numéricamente evaluando la secuencia de reversión denominada coherencias cuánticas múltiples, de relevancia experimental. Para ello se consideran anillos de espines con interacciones de largo alcance que están dentro de los límites computables. La dinámica y valores de saturación de los OTOCs locales y globales derivados de esta secuencia se estudian en función del tamaño del sistema y el rango de las interacciones entre los espines, observando en qué condiciones los OTOCs locales y globales son equivalentes. Una separación de las contribuciones al OTOC en términos de ecos locales y términos cruzados nos permite rastrear esta equivalencia a la interferencia destructiva de los procesos multiespín.

Cada capítulo contiene una introducción y conclusión específica, siendo las conclusiones generales de esta tesis discutidas en el Capítulo 6, donde se exploran posibles generalizaciones y extensiones de los desarrollos presentados a lo largo de este trabajo.

Capítulo 2

Dinámica y OTOCs en la cadena de Harper-Hofstadter-Andrè-Aubry.

Este capítulo explora la cadena de Harper-Hofstadter-Andrè-Aubry, centrándose en la dinámica de una excitación en este sistema. Se examinan diversas condiciones iniciales y magnitudes para caracterizar la naturaleza de la dinámica. Utilizando este Hamiltoniano de una partícula como un sistema de prueba ideal, se desarrolla un OTOC que permite investigar la localización del sistema cuando solo se tiene acceso a un único sitio.

La primera discusión sobre localización o transición metal-aislante (MIT) apareció en el contexto de sistemas de muchos espines [33, 35]. Sin embargo, la complejidad de la situación obligó a P. W. Anderson a considerar una única partícula que se propaga en una red *tight-binding* en presencia de desorden en las energías de sitio. Anderson demostró que el desorden por encima de un valor crítico conduce a la ausencia de difusión de la excitación, es decir, una MIT. Dos décadas más tarde, quedó claro que en los sistemas 1D y 2D, incluso el desorden más pequeño localiza todos los autoestados de una sola partícula [36]. Por lo tanto, para tener toda la riqueza de la transición de fase de localización con un desorden crítico finito, se necesitaría un sistema 3D. Incluso con estas fuertes simplificaciones, manejar la criticidad del fenómeno requiere amplios recursos computacionales [102, 103]. No obstante, es posible encontrar este comportamiento crítico, con toda su riqueza, en sistemas 1D utilizando desorden correlacionado. Un paradigma de esta situación es un potencial periódico incommensurado con la red subyacente.

Harper y Hofstadter [104–106] introdujeron el primer modelo físicamente relevante para describir electrones bajo el efecto de un campo magnético en una red cuadrada dos dimensional. Este modelo, de ahora en adelante HHAA, fue generalizado por Aubry y Andrè [107, 108] quienes encontraron que los autoestados son extendidos si el potencial es débil y se localizan después de un cierto valor crítico en la amplitud potencial. Esta transición puede observarse a través de la convergencia de una expansión perturbativa [108, 109], a través de la caída exponencial de la conductancia de Landauer [110, 111], o evaluando el inverso del ratio de participación (*inverse participation ratio*, IPR) de los autoestados [112–117]. En consecuencia, se han estudiado con frecuencia modelos 1D incommensurados para imitar la transición de Anderson de sistemas desordenados de alta dimensión [107], no solo el modelo HHAA, sino generalizaciones que añaden diferentes características y matices, por ejemplo, bordes de movilidad [118, 119].

2.1. EL MODELO.

Actualmente, la implementación experimental de estos modelos en arreglos (*arrays*) de átomos ultrafríos [48, 120] abre un atajo natural para estudiar experimentalmente la transición entre estados extendidos y localizados, no solo como es planteado en el modelo original, sino también incluyendo interacciones de muchos cuerpos y decoherencia.

Este capítulo gira en torno al modelo HHAA, específicamente su dinámica. En la primera sección, derivamos el modelo siguiendo los desarrollos originales de Harper y Hofstadter, mostrando sus propiedades autoduales en el punto crítico, y finalmente comentamos sobre las notaciones utilizadas en la actualidad en diferentes campos de la física. En las siguientes secciones se estudian dos magnitudes de la dinámica de una excitación, el *inverse participation ratio* y el segundo momento de la excitación. Adicionalmente, se computa la densidad local de estados (LDoS, *local density of states*), ya que nos permite racionalizar por qué algunas condiciones iniciales resultan patológicas.

2.1. El modelo.

“The problem of Bloch electrons in magnetic fields is a very peculiar problem, because it is one of the very few places in physics where the difference between rational numbers and irrational numbers makes itself felt.” - Douglas R. Hofstadter

Tomemos en consideración una red cuadrada 2D con un espaciado entre sitios a y una energía de salto/acoplamiento J (*hopping*), cuya relación de dispersión en ausencia del campo magnético viene dada por $W(\vec{k}) = J(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$. El efecto de un campo magnético B perpendicular es introducido mediante la sustitución de Peierls [121, 122], donde $\hbar\vec{k}$ es reemplazado por $\vec{p} + e\vec{A}$, siendo \vec{p} el operador momento, e la carga elemental, y $\vec{A} = (0, Bx, 0)$ el potencial vector. Dado que $e^{ip_x a}/\hbar$ representa el operador de traslación, $e^{ip_x a/\hbar}\psi(x, y) = \psi(x+a, y)$, podemos expresar el Hamiltoniano efectivo de nuestro sistema como:

$$E\psi(x, y) = \frac{J}{2} \left[\psi(x+a, y) + \psi(x-a, y) + \psi(x, y+a) e^{-\frac{ieBxa}{\hbar}} + \psi(x, y-a) e^{\frac{ieBxa}{\hbar}} \right].$$

En este punto basta considerar que en nuestra modelización las partículas pueden saltar entre distintos puntos de la red ($x = na$ e $y = ma$, siendo n y m enteros) y que $\psi(x = na, y = ma) = g(n)e^{ik_y ma}$ (el comportamiento de la función en la coordenada y no cambió). Reescribiendo la ecuación anterior y definiendo el flujo de campo magnético por “plaqueta” $\Phi = Ba^2$, y el cuánto de flujo magnético, $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e$ tenemos:

$$g(n+1) + g(n-1) + 2 \cos(2\pi nq + \theta)g(n) = 2E/Jg(n) \quad (2.1)$$

siendo $\theta = -k_y a$ y $q = \Phi/\Phi_0$ la relación entre el flujo de campo por placa y el cuánto de flujo magnético. La Ec. (2.1) se conoce como ecuación de Harper. El espectro que se obtiene de esta ecuación $2E/J$ tiene la particularidad que depende de la racionalidad de q . Al imponer periodicidad sobre n , es decir $q = P/Q$ (racional, P y Q números coprimos distintos), existen exactamente Q bandas en el espectro de energía. Si $Q \gg P$, las bandas de energía convergen a bandas de energía delgadas que corresponden a los niveles de Landau [106].

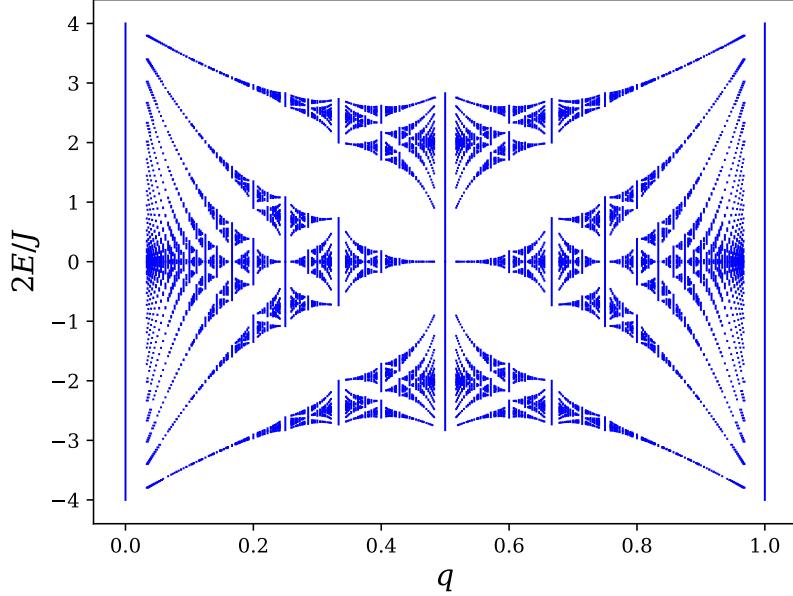


Figura 2.1: Mariposa de Hofstadter: Patrón fractal al observar los niveles de energía en función del flujo del campo magnético. Esta estructura muestra la riqueza y la complejidad de los estados cuánticos en sistemas de redes bidimensionales sujetos a un campo magnético. Esta figura es computada utilizando valores racionales de q con $0 \leq P \leq Q \leq 30$.

Si, en cambio, q es irracional, el espectro tiene una forma fractal autosimilar. El espectro de energías como función de $2\pi q$ (básicamente, el flujo de campo por plaqueta) se conoce célebremente como la mariposa de Hofstadter (Ver Fig. 2.1).

2.1.1. Generalización, auto-dualidad y transición de fase.

Utilizando operadores de sitio $|n\rangle$, podemos expresar el Hamiltoniano unidimensional correspondiente a la dirección x en la forma típica de los Hamiltonianos *tight-binding*:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_n -J(|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) + \sum_n \varepsilon_n |n\rangle \langle n|, \quad (2.2)$$

donde $\varepsilon_n = W \cos(2\pi qna + \theta)$. En este contexto, hemos generalizado el modelo, permitiendo que la amplitud del potencial sea un parámetro libre ($W = 2J$ en el modelo original). Usualmente, en esta forma se lo conoce como modelo de Aubry-Andrè, nosotros lo referimos como Harper-Hofstadter-Aubry-Andrè (HHAA), en reconocimiento a todos los involucrados.

Aunque este modelo tuvo un origen específico, actualmente se aplica en diversos campos [48, 123–126]. Esto lleva a que ciertos parámetros queden desconectados de las magnitudes físicas originales; comúnmente, θ representa una fase aleatoria sobre la cual se promedia en simulaciones o experimentos. Por otro lado, el valor de q suele ser la fracción áurea en simulaciones numéricas, es decir, $q = q_g = (\sqrt{5} - 1)/(2a)$, ya que este número es el más irracional posible [127], lo que facilita la obtención de resultados más claros y

2.1. EL MODELO.

definidos. En realizaciones experimentales, los valores de q están restringidos por el *setup* particular. Por ejemplo, en sistemas de átomos fríos, por la disponibilidad de longitudes de ondas en los láseres, siendo $q = 1032/862 \equiv 170/862 = 85/431$ en Ref. [123] y $q = 532/738$ en Ref. [48], en ambos casos podemos considerar el sistema como incommensurado (o “irracional”) para redes cortas (con un número de sitios menor a 431 y 369 respectivamente).

La ecuación (2.2) tiene varias propiedades interesantes. En primer lugar, es autodual, lo cual se observa al realizar la transformación $|n\rangle = \sum_s e^{i2\pi q k_s n} |k_s\rangle$ obteniendo:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_s -W/2(|k_s\rangle \langle k_{s+1}| + |k_{s+1}\rangle \langle k_s|) + \sum_s \varepsilon_s |k_s\rangle \langle k_s|, \quad (2.3)$$

con $\varepsilon_s = 2J \cos(2\pi qs + \theta)$. Podemos ver que es un Hamiltoniano de la misma forma que (2.2) pero reemplazando $J \rightarrow W/2$ y $W \rightarrow 2J$. Para $W = 2J$ se recupera el modelo de Harper y el Hamiltoniano es el mismo en ambas bases. Para $W \neq 2J$ podemos pensar, utilizando el principio de incertidumbre, que si el sistema está localizado en la base de sitio estará deslocalizado en el espacio de momento y viceversa.

2.1.2. Notaciones actuales y realización experimental.

Es importante destacar que el Hamiltoniano de HHAA puede presentarse en varias notaciones dependiendo del área de la física en la que se esté trabajando, no solamente utilizando la notación de enlace fuerte (*tight binding*).

Por ejemplo, en el contexto de Resonancia Magnética Nuclear, es necesario (y conveniente) expresar el Hamiltoniano en término de operadores de espín:

$$\hat{\mathcal{H}} = J \sum_n \left(\hat{S}_n^x \hat{S}_{n+1}^x + \hat{S}_n^y \hat{S}_{n+1}^y \right) + \sum_n \varepsilon_n \hat{S}_n^z \quad (2.4)$$

$$\equiv \frac{J}{2} \sum_n \left(\hat{S}_n^+ \hat{S}_{n+1}^- + \hat{S}_n^- \hat{S}_{n+1}^+ \right) + \sum_n \varepsilon_n \hat{S}_n^+ \hat{S}_n^-, \quad (2.5)$$

donde para la ultima equivalencia hemos utilizado que $\hat{S}_n^z = \hat{S}_n^+ \hat{S}_n^- - \hat{I}/2$, notando que la identidad solo genera un cambio en la referencia de energías y no afecta la dinámica generada por el Hamiltoniano. Por otro lado, en el estudio de excitaciones en el estado sólido, el Hamiltoniano suele expresarse en término de operadores de creación de destrucción,

$$\hat{\mathcal{H}} = J \sum_n (\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1} + \hat{c}_n \hat{c}_{n+1}^\dagger) + \sum_n \varepsilon_n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n. \quad (2.6)$$

Cada una de estas notaciones ofrece perspectivas útiles para comprender diversos aspectos del sistema y su elección puede depender del enfoque de investigación o de las propiedades específicas que se deseen estudiar. En capítulos posteriores, por ejemplo, las notaciones aquí introducidas serán útiles para añadir interacciones de muchos cuerpos en el Hamiltoniano de HHAA.

2.2. La dinámica de un cuerpo.

Las implementaciones experimentales recientes de sistemas cuánticos han cambiado significativamente el paradigma tradicional de estudio de estos sistemas. Anteriormente, la observación de efectos cuánticos se centraba principalmente en fenómenos macroscópicos como la conductividad y la magneto-resistencia. Sin embargo, ahora es posible observar directamente la dinámica de las excitaciones cuánticas, algo previamente solo reservado para algunos experimentos de RMN [100, 128–130]. Este enfoque experimental abre nuevas vías para explorar y comprender fenómenos fundamentales en la mecánica cuántica, estableciendo conexiones más sólidas entre los resultados teóricos/numéricos y los experimentales. Además, esta capacidad para estudiar la dinámica de las excitaciones cuánticas proporciona una perspectiva única sobre la naturaleza intrínseca de los sistemas cuánticos, su interacción con diferentes ambientes (decoherencia), y el eventual paso a sistemas macroscópicos.

Para comprender y analizar estas dinámicas, se emplean diversas magnitudes, como el desequilibrio (*imbalance*), la probabilidad de supervivencia, las funciones de correlación, la entropía e incluso la densidad de probabilidad de medir un operador específico, típicamente la posición. El enfoque de este capítulo se centra en dos magnitudes particulares: el inverso del ratio de participación (IPR, por sus siglas en inglés) y la varianza de la distribución de probabilidad espacial. Finalmente, vemos, como esta misma información puede obtenerse utilizando Ecos de Loschmidt.

2.2.1. El IPR dinámico.

El inverso del ratio de participación (IPR) es una magnitud usual en la física de la materia condensada. La misma proporciona información sobre la localización de los estados en un sistema, siendo fundamental para comprender fenómenos como la localización de Anderson y la transición metal-aislante (MIT). La definición usual del mismo es a partir de los autoestados ν del Hamiltoniano de sistema:

$$\text{IPR} = \left\langle \sum_{x_n} |\psi_\nu(x_n)|^4 \right\rangle_\nu, \quad (2.7)$$

donde $\langle \dots \rangle_\nu$ indica el promedio sobre todos los autoestados. Consiguientemente, un IPR cercano a 1 indica una mayor localización de los autoestados (IPR = 1 indica una localización total), mientras que un IPR pequeño sugiere una distribución más uniforme de estos estados en el sistema (IPR = $1/N$ indica una distribución equiprobable entre N sitios).

Nuestro enfoque propone trabajar con un IPR dinámico, es decir, calculado sobre un solo estado, el cual evoluciona temporalmente. En este caso, partiendo de un estado inicial $\psi_0(x)$, tenemos,

$$\text{IPR}_t = \sum_{x_n} |\psi_0(x_n, t)|^4. \quad (2.8)$$

2.2. LA DINÁMICA DE UN CUERPO.

2.2.2. El segundo momento de la excitación.

El segundo momento o la varianza de la distribución de probabilidad espacial es una magnitud esencial en el estudio de la dinámica de sistemas cuánticos. Esta medida proporciona información sobre la dispersión o extensión espacial de la función de onda asociada a un estado cuántico. La varianza es el segundo momento centrado de la distribución de probabilidad¹:

$$\sigma_0^2(t) = \langle x - \langle x \rangle \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \quad (2.9)$$

con lo que para una distribución discreta es simplemente:

$$\sigma_0^2(t) = a^2 \left[\sum_n p_n(t) n^2 - \left(\sum_n p_n(t) n \right)^2 \right], \quad (2.10)$$

siendo a la distancia entre sitios y p_n la probabilidad de encontrar a la partícula en el sitio n (usualmente $p_n = |\psi_n|^2$ o $p_n = \rho_{n,n}$, siendo ρ la matriz densidad del sistema). Si bien desde el punto de vista numérico es una magnitud simple, experimentalmente requiere un gran número de realizaciones para obtener $\sigma_0^2(t)$ con un error relativamente chico. Hacia el final del capítulo presentaremos una estrategia diferente para la obtención de la misma.

2.2.3. Densidad Local de estados.

La densidad local de estados (LDoS, *Local Density of States*) nos da una medida de la densidad de estados accesibles localmente en una región del espacio [131]. Es decir, a diferencia de la densidad de estados usual, $D(E) = \sum_\nu \delta(E - \epsilon_\nu)$, la densidad local de estados considera el peso que cada uno de los autoestados ν tienen en una posición dada x_n :

$$\mathcal{N}(\epsilon, x_n) = \sum_\nu |\psi_\nu(x_n)|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_\nu). \quad (2.11)$$

Esta magnitud puede ser evaluada utilizando el formalismo de función de Green,

$$\mathcal{N}(\epsilon, x_n) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} G_{00}^R(\epsilon + i\eta), \quad (2.12)$$

siendo su implementación muy eficiente para sistemas unidimensionales con acoplos a primeros vecinos. Una discusión más profunda y la descripción de los algoritmos puede ser encontrada en la tesis de Elena Rufeil-Fiori [132].

Desde el punto de vista dinámico nos una medida de los posibles sitios a los que puede decaer una excitación inicial local, pudiendo utilizarse de forma directa para calcular la probabilidad de supervivencia:

$$P_{00}(t) = \left| \theta(t) \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(\epsilon, 0) e^{-i\epsilon t/\hbar} d\epsilon \right|^2, \quad (2.13)$$

donde, sin perdida de generalidad, se consideró $x_n = 0$. Alternativamente, se puede ex-

¹El uso del subíndice 0 en $\sigma_0^2(t)$ refiere a que es la varianza tomada sobre la dinámica coherente de un cuerpo. Esta notación se mantendrá en capítulos posteriores, donde los efectos de un ambiente e interacciones de muchos cuerpos son introducidos.

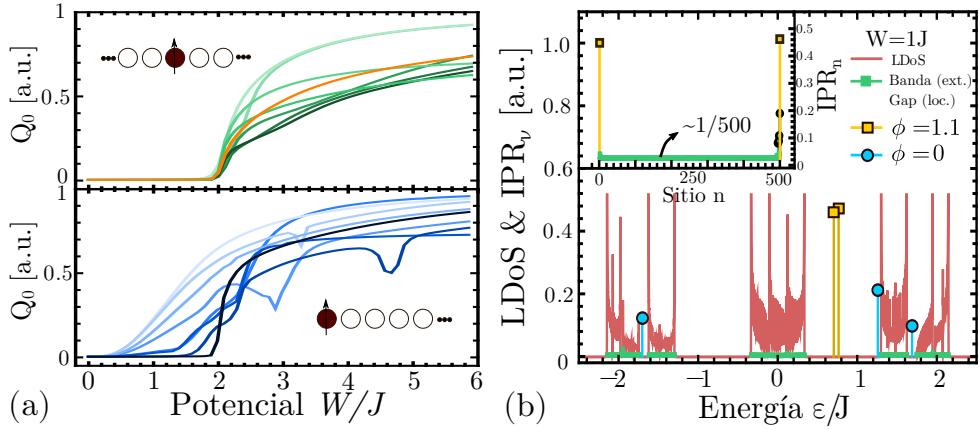


Figura 2.2: (a) Valor de medio del IPR dinámico a tiempos largos (equilibrio) en función de W para diferentes realizaciones de desorden (θ) en una cadena de 500 sitios. Distintos tonos de verde y azul representan diferentes realizaciones del potencial. Arriba: la excitación inicial se coloca en el medio de la cadena. En naranja se muestra el promedio de realizaciones. Abajo: La excitación se coloca en un extremo de la cadena. En negro se muestra la realización correspondiente a $\theta = 0$. (b) Principal: Densidad local de estados del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ con $W = 1J < W_c$ (Rojo). IPR_v de los autovectores de $\hat{\mathcal{H}}$ con $W = 1J < W_c$ y $N = 500$ para dos realizaciones de desorden. Los estados no localizados se muestran en verde (bulk states), mientras que los estados localizados de cada realización se muestran en celeste ($\theta = 0$) y naranja ($\theta = 7\pi/20$). Recuadro: Relación de participación de los estados del sitio sobre los estados propios IPR_n (mismo esquema de color).

presar esta integral como la transformada de Fourier de la función de autocorrelación $\mathcal{J}_0(\omega)$,

$$P_{00}(t) = \theta(t) \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{J}_0(\omega) e^{-i\omega t/\hbar} d\omega, \quad (2.14)$$

siendo,

$$\mathcal{J}_0(\omega) = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(\epsilon, 0) \mathcal{N}(\epsilon + \hbar\omega, 0) e^{-i\epsilon t/\hbar} d\epsilon. \quad (2.15)$$

Estas magnitudes permiten, bajo ciertas condiciones, factorizar el decaimiento de $P_{00}(t)$ en componentes provenientes de la *regla de oro de Fermi* y retornos propios de la dinámica cuántica [133, 134]. Además, con pequeñas generalizaciones como considerar bases particulares en lugar de la base local (i.e. *strength function*), estos conceptos son de utilidad en el estudio de sistemas de muchos cuerpos y caos [113, 135, 136].

2.3. Resultados Numéricos.

2.3.1. Condición inicial.

Al estudiar la dinámica de una excitación en un sistema cuántico, podemos comenzar de diversos estados iniciales (o combinación incoherente de ellos). En esta sección nos enfocaremos en estados iniciales puros, en particular, totalmente localizados en la base de sitio, esto es $|\psi_0\rangle = |n_0\rangle$. Queda libre, por consiguiente, la posición particular donde colocamos esta condición inicial. Lo natural es pensar en el extremo o en el centro de la cadena, esta elección dependerá del tipo de información al que uno quiera acceder.

2.3. RESULTADOS NUMÉRICOS.

Colocar la excitación en un extremo será conveniente para simular algunos problemas de transporte [137], mientras que colocarla en el centro puede ayudar a evitar problemas de borde/tamaño finito caracterizando mejor las propiedades generales del Hamiltoniano.

En esta sección estudiamos el efecto de colocar la excitación inicial en un extremo $|\psi_0\rangle = |0\rangle$ o en el centro $|\psi_0\rangle = |N/2\rangle$ de la cadena sobre el IPR dinámico. La figura 2.2a muestra el valor de equilibrio del IPR dinámico (promediado en el tiempo) en función de la amplitud de modulación (W) para diferentes realizaciones (θ). Observamos que cuando la condición inicial está en el medio de la cadena, para $W < W_c$ la excitación siempre puede extenderse por toda la cadena, mientras que para $W > W_c$ la excitación permanece cerca del sitio inicial. Esto es consistente con la transición encontrada por Aubry-André en una cadena infinita. Sin embargo, si la excitación se sitúa en un extremo de la cadena, observamos que incluso para modulaciones por debajo de la crítica, existen realizaciones donde la magnetización local no puede extenderse a toda la cadena. Este efecto se muestra en la Fig. 2.2a donde se observa que solo una realización (negro, $\theta = 0$) refleja el comportamiento crítico esperado en $W_c = 2J$. En el resto de realizaciones, la excitación queda parcialmente localizada para $W < W_c$.

Para comprender este efecto hemos estudiado las auto-energías y los autovectores del Hamiltoniano en una cadena de 500 espines. La figura 2.2b muestra la densidad local de estados de una cadena larga ($N > 10000$, calculada usando el método de decimación [109,138]) y el grado de deslocalización de los vectores propios en función de la energía para una cadena de $N = 500$. Este último se evalúa a través de las cantidades: $\text{IPR}_k = \sum_n |a_{kn}|^4$ y $\text{IPR}_n = \sum_k |a_{kn}|^4$.

Cuando la cadena es finita (500 espines), algunos autoestados tienen un IPR_k más alto, lo que significa que hay autoestados localizados. Estos estados aparecen en los extremos (bordes) de la cadena y son un efecto de tamaño finito. Esto puede observarse al calcular la razón de participación de los estados del sitio sobre los estados propios, donde observamos que estos estados localizados están en los extremos de la cadena (inset Fig. 2.2b). Estos estados no deben confundirse con estados solitónicos altamente improbables cuyo peso principal reside en sitios donde el potencial *in-situ* es antisimétrico [109], estos solitones de baja movilidad pueden aparecer en el interior de la cadena, pero no se espera que contribuyan con un efecto apreciable en la dinámica de excitación. Es interesante notar que la fase $\theta = 0$ tiene propiedades especiales. En ese caso, no hay un estado localizado en dicho borde, sino que hay estados localizados en el extremo opuesto. Alternativamente, para fases arbitrarias, digamos $\theta = 7\pi/20$, ambos extremos admiten estados de borde. La ausencia de efectos de tamaño finito para $\theta = 0$ garantiza que este IPR dinámico muestre la localización solo para $W > W_c$. Sin embargo, otras fases iniciales, como $\theta = 7\pi/20$, producen estados de borde para $W < W_c$. Esta variabilidad incontrolada nos motivó a utilizar las condiciones iniciales en el medio de la cadena como un representante confiable de la transición de fase en el límite termodinámico.

2.3.2. Dinámica del desparramo de la excitación.

El análisis previo se centró en valores de equilibrio del IPR, en esta sección estudiamos la dinámica coherente de un paquete de ondas inicialmente localizado en el centro de la cadena HHAA. En particular, nos centramos en la evolución temporal del segundo momento σ_0^2 de la distribución de probabilidad de encontrar la partícula a lo largo de

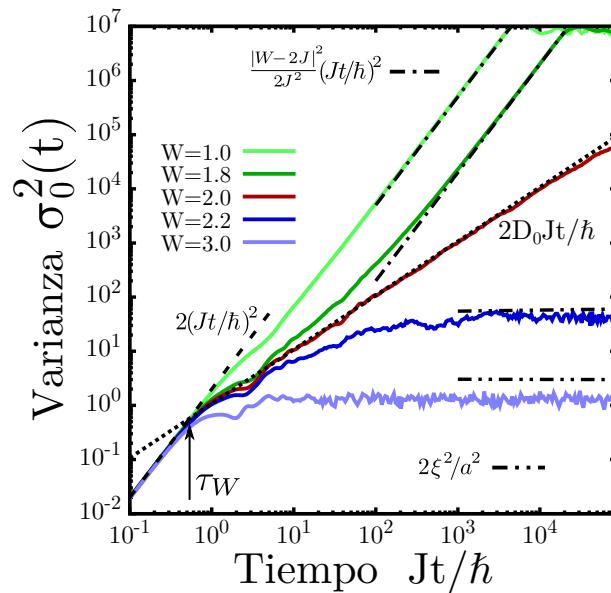


Figura 2.3: Evolución de la varianza de excitación inicialmente localizada en el centro de la cadena para el modelo HHAA con $N = 10000$ para diferentes W (colores). La flecha vertical muestra el tiempo medio de dispersión elástica τ_W , Ec. (2.22). Las líneas negras con diferentes trazos representan los resultados analíticos: la línea a trazos el comportamiento cuadrático a tiempos cortos, la línea punteada sobre la curva roja ($W = 2J$) representa la estimación analítica para el comportamiento de la varianza en el punto crítico, mientras que las líneas a trazos y puntos (simple y doble) representan el comportamiento a tiempos largos para la fase extendida y localizada respectivamente.

2.3. RESULTADOS NUMÉRICOS.

la cadena. En ausencia de decoherencia y para tiempos suficientemente largos, se sabe que el segundo momento crece balística para $W < 2J$, difusivamente para $W = 2J$ y satura para $W > 2J$ [139]. A continuación se detalla, numérica y analíticamente, el comportamiento en cada régimen.

Fase extendida.

En la fase extendida, la dinámica de la varianza a tiempos muy largos se vuelve balística, $\sigma_0^2(t) = u^2 t^2$. En los casos donde el Hamiltoniano, Ec. (2.2), corresponde a $q = 0$ (cadena ordenada) y $q = 1/2$ (cadena dimerizada) hemos demostrado analíticamente (no se muestra) que la velocidad u está directamente relacionada con el soporte B de las bandas espectrales: $u^2 = \frac{a^2 B^2}{8\hbar^2}$. Para $q = 0$ hay una sola banda, $B = 4J$ y para $q = 1/2$ tenemos dos bandas, con $B = 2\sqrt{W^2 + 4J^2} - 2\sqrt{W^2}$.

Aquí conjeturamos que la misma expresión es válida para cualquier valor de q en el modelo HHAA. Para q dado por la media áurea, en Ref. [140] se mostró qué $B = 2|2J - W|$. Tenemos entonces que $u^2 = 4a^2|2J - W|^2$, siendo el comportamiento de la varianza en tiempos largos viene dado por:

$$\sigma_0^2(t) = \frac{a^2|2J - W|^2}{2\hbar^2} t^2.$$

La Figura 2.3 presenta el comportamiento analítico para $W/J = \{1, 1.8\}$ como líneas negras a trazos y puntos, junto con la evolución Hamiltoniana obtenida numéricamente (curvas verdes), corroborando los resultados. La saturación a tiempos largos corresponde a un efecto de tamaño finito (la función de onda alcanza los bordes de la cadena).

Punto Crítico.

La dispersión de una excitación local en la cadena de HHAA en el punto crítico eventualmente se vuelve difusiva [141]. Además, se observa que $W = 2J$ es el único valor de amplitud del potencial donde este crecimiento es difusivo indefinidamente. En esta sección, calculamos de forma analítica el coeficiente de difusión de esta dinámica, algo que, hasta donde sabemos, no ha sido abordado en la literatura.

Al calcular la evolución del paquete de ondas $\psi(t)$ perturbativamente a tiempos cortos (antes de que los efectos de las energías de sitio entren en la dinámica), la probabilidad de estar en el sitio n en el momento t es: $P_n(t) = |\langle n|\psi(t)\rangle|^2 \simeq |\langle n|(1 - i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar)|n_0\rangle|^2$, donde n_0 es el sitio donde la excitación esta inicialmente. Definiendo $\mathcal{H}_{n,n_0} = \langle n|\hat{\mathcal{H}}|n_0\rangle$, y considerando, sin perdida de generalidad, $n_0 = 0$, podemos escribir:

$$\sigma_0^2(t) = a^2 \sum_n P_n(t)n^2 - a^2 (\sum_n P_n(t)n)^2 \quad (2.16)$$

$$\approx (t/\hbar)^2 a^2 \sum_n \mathcal{H}_{n,0}^2 n^2 - a^2 (t/\hbar)^4 \sum_n \mathcal{H}_{n,0}^4 n^2 \quad (2.17)$$

$$\approx (t/\hbar)^2 a^2 \sum_n \mathcal{H}_{n,0}^2 n^2 = v_0^2 t^2 \quad (2.18)$$

siendo,

$$v_0^2 = 2a^2(J/\hbar)^2, \quad (2.19)$$

ya que el modelo de HHAA solo presenta acoplos a primeros vecinos.

Ahora debemos encontrar una escala de tiempo donde la propagación balística inicial termina debido a la presencia de un potencial cuasi-periódico de amplitud W , generando el desparramo difusivo. Para ver esto, la expansión perturbativa debe llevarse a cabo hasta el cuarto orden: $P_n(t) = |\langle n|\psi(t)\rangle|^2 \simeq |\langle n|(1 - i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar - \frac{1}{2}\hat{\mathcal{H}}^2t^2/\hbar - i\frac{1}{6}\hat{\mathcal{H}}^3t^3/\hbar + \frac{1}{24}\hat{\mathcal{H}}^4t^4/\hbar)|n_0\rangle|^2$. A este nivel de aproximación se obtiene:

$$\begin{aligned} \sigma_0^2(t)/a^2 &\approx 2J^2(t/\hbar)^2 - \frac{1}{12}((\mathcal{H}_{0,0} - \mathcal{H}_{1,1})^2 + (\mathcal{H}_{0,0} - \mathcal{H}_{-1,-1})^2)J^2(t/\hbar)^4, \\ \sigma_0^2(t)/a^2 &\approx 2J^2(t/\hbar)^2 - \frac{2}{12}\langle(\mathcal{H}_{n,n} - \mathcal{H}_{n+1,n+1})^2\rangle J^2(t/\hbar)^4. \end{aligned}$$

Donde las diferencias de energía al cuadrado fueron reemplazadas por su valor promedio:

$$(\Delta E)^2 = \langle(\mathcal{H}_{n,n} - \mathcal{H}_{n+1,n+1})^2\rangle = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^{N-1} \frac{(\mathcal{H}_{n,n} - \mathcal{H}_{n+1,n+1})^2}{2}. \quad (2.20)$$

Nótese que esta definición tiene en cuenta la “correlación” entre vecinos y que, para el modelo HHAA, el promedio puede tomarse equivalentemente sobre los sitios n o las realizaciones del potencial (fase θ en la Ec. 2.2). Si se considera el desorden de Anderson, donde las energías de sitio son independientes, se obtiene directamente la varianza del desorden $((\Delta E)^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^{N-1} \mathcal{H}_{n,n}^2)$, que es la magnitud estándar para caracterizar el desorden.

El primer efecto de esta corrección cuártica es cambiar la concavidad de $\sigma_0^2(t)$. Esto sucederá cuando la segunda derivada de $\sigma_0^2(t)/a^2$ se anule a un tiempo τ_W :

$$\tau_W = \sqrt{\left(\frac{\langle(\mathcal{H}_{n,n} - \mathcal{H}_{n+1,n+1})^2\rangle}{2\hbar^2}\right)^{-1}} = \frac{\hbar}{\Delta E}, \quad (2.21)$$

al cual nos referiremos como *tiempo medio de dispersión elástica*. Reemplazando con las energías del sitio HHAA, usando identidades trigonométricas y sumando sobre los sitios, se puede demostrar que $\Delta E = W\sqrt{(1 - \cos(2\pi q))/2}$, resultando:

$$\tau_W = \frac{\sqrt{2}\hbar}{W\sqrt{(1 - \cos(2\pi q))}}. \quad (2.22)$$

Consecuentemente, el coeficiente de difusión, D_0 , se calcula como:

$$D_0 = \frac{v_0^2\tau_W}{2} = \frac{a^2J^2}{\hbar} \frac{\sqrt{2}}{W\sqrt{(1 - \cos(2\pi q))}}. \quad (2.23)$$

Esta estimación se muestra en la Fig. 2.3 para $q = q_g$ como una línea negra punteada sobre la curva roja. Es interesante notar cómo las correlaciones del modelo (dadas por el vector de onda de modulación q) influyen en los tiempos de dispersión y, por tanto, en la

2.4. LA SECUENCIA GEA.

difusión $\sigma_0^2(t) = 2D_0t = v_0^2\tau_{Wt}$. Esta característica será explotada en el siguiente capítulo.

Obsérvese que la magnitud del potencial entra con una ley de potencia diferente que en el tiempo libre medio (*mean-free time*) entre colisiones que resulta de la aplicación de la regla de oro de Fermi a un estado de energía de Bloch ε para el *desorden no correlacionado* del modelo de Anderson [142] $1/\tau_{FGR} = (2\pi/\hbar)(W^2/12)N_1(\varepsilon)$ con $N_1(\varepsilon) \propto 1/4\pi J\sqrt{1 - (\varepsilon/2J)^2}$ la densidad de estados directamente conectados.

Fase localizada.

Se sabe que, en el régimen localizado, la longitud de localización de todas los autoestados es $2\xi = a/\ln[W/2J]$ [107, 139, 141]. De ello se deduce que la distribución de probabilidad del paquete de ondas en el estado estacionario se localiza cerca del sitio inicial n_0 , $P(n) = |\langle n|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{2\xi}(e^{-|n-n_0|/\xi})$. Por lo tanto, el valor de saturación de la varianza será $\lim_{t \rightarrow \infty} \sigma_0^2(t) = l^2 = 2\xi^2 = 2a^2(2\ln(W/2J))^{-2}$.

Numéricamente, observamos que cuando $W \gg 2J$, los valores de saturación obtenidos son ligeramente menores que los valores analíticos, como se muestra en la Figura 2.3, donde las curvas azules corresponden a simulaciones numéricas y las líneas a trazos y doble punteado representan las expresiones analíticas. Una posible explicación de esta discrepancia podría ser la necesidad de incluir correcciones debido a la naturaleza discreta de las distribuciones de probabilidad. Sin embargo, en términos prácticos, aunque estas discrepancias existan, no impactan significativamente en nuestra capacidad para comprender, aplicar y generalizar el modelo.

2.4. La secuencia GEA.

En esta sección proponemos un nuevo método para cuantificar la transición de Aubry-André que permite calcular al IPR y la varianza de la excitación sin necesidad de conocer la probabilidad en cada sitio del sistema. Solo es necesario poder medir en el sitio inicial, aplicar un gradiente de potencial (podemos pensarlo como un campo eléctrico, o en sistemas de espines, un gradiente de campo magnético), e invertir la dinámica Hamiltoniana, algo totalmente razonable en muchos sistemas experimentales.

La metodología se basa en el concepto de Funciones de Correlación sin orden temporal (OTOC), y está inspirado en la secuencia de coherencias cuánticas múltiples de RMN [143]. Sin embargo, dado la naturaleza *one-body* de estos sistemas, su interpretación es más directa. La idea, representada en la figura 2.4a, es mediante la aplicación de un gradiente de potencial, etiquetar diferentes partes una excitación ya desparramada en la cadena, y luego imponer un procedimiento de inversión temporal (LE) que nos permita extraer la información del etiquetado condensada en el retorno al sitio inicial. Nótese, que el uso del LE en esta secuencia, se diferencia de trabajos recientes en el modelo HHAA [118, 144, 145], ya que el mismo no se aplica sobre la evolución perturbada de un autoestado, sino que compara la dinámica perturbada y sin perturbar de la excitación. En cierto modo, volvemos al la idea original del LE.

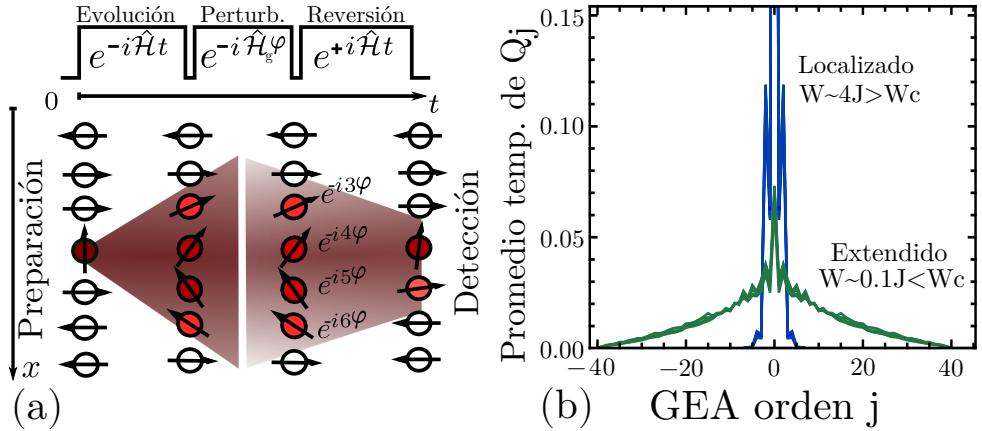


Figura 2.4: (a) Representación esquemática del estado del sistema en diferentes momentos. Describe la secuencia de Hamiltonianos que operan con una excitación inicialmente localizada en el espín central. Las fases φ resultan de pulsos de gradiente de potencial (evolución con \hat{H}_g). Finalmente, se observa cuánto regresó al sitio inicial. Una transformada de Fourier de estos observables proporciona el espectro de amplitudes de entrelazamiento de gradiente (GEA). (b) Valores medios a tiempos largos obtenidos para el espectro GEA en la cadena HHA en la fase localizada (azul) y extendida (verde). Cualitativamente se observa como el espectro representa el nivel de desparramo de la excitación. Cuantitativamente, el término central del espectro, denominado entrelazamiento de gradiente de orden cero Q_0 (ZOGE), que es el inverso del ratio de participación (IPR), mientras que la varianza de esta distribución equivale a la varianza de la función de onda.

2.4.1. Definición.

El procedimiento GEA, Fig. 2.4a, parte de un estado inicialmente localizado $\psi(t = 0) = |n_0\rangle$. Esta excitación local es, en principio, desparramada a lo largo de la cadena al aplicar el operador de evolución temporal:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |n_0\rangle = \sum_n b_n(t) |n\rangle, \quad (2.24)$$

con $b_n(t) = \sum_\nu e^{-i\varepsilon_\nu t/\hbar} a_{\nu n}^* a_{\nu n}$, siendo ε_ν la energía del autoestado ν .

En este punto, se aplica un gradiente de potencial sobre la cadena, de modo que el mismo evoluciona con el Hamiltoniano $\hat{H}_g = \sum_n n |n\rangle \langle n|$ (pulso de gradiente). El efecto de esta evolución dependerá de la magnitud del producto entre la intensidad del gradiente φ y el tiempo aplicado. Por simplicidad, consideraremos que \hat{H}_g como un gradiente unidad, siendo el efecto total directamente contemplado en la magnitud φ . Al ser \hat{H}_g un gradiente de energías de sitio, los cambios sobre el estado $|\psi(t)\rangle$ pueden observarse directamente:

$$e^{-i\varphi\hat{H}_g} |\psi(t)\rangle = e^{-i\varphi\hat{H}_g} e^{-i\hat{H}t/\hbar} |n_0\rangle = \sum_n b_n(t) e^{-i\varphi n} |n\rangle. \quad (2.25)$$

en síntesis, la perturbación asigna a cada componente local de la función de onda con una fase $n\varphi$. Después de esto, el sistema evoluciona hacia atrás en el tiempo (evoluciona bajo $-\hat{H}$ durante un tiempo adicional t). Esta evolución condensa la información, marcada con la perturbación, sobre del nivel de desparramo del estado evolucionado en el sitio inicial.

2.4. LA SECUENCIA GEA.

En consecuencia, el eco de Loschmidt:

$$M(t, \varphi) = \left| \langle n_0 | e^{i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_g\varphi} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} | n_0 \rangle \right|^2, \quad (2.26)$$

tiene codificada esta información como una dependencia en φ . Esta información puede ser decodificada e interpretada mediante una transformada de Fourier en φ .

Al identificar el operador $\hat{\Phi}_\varphi(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} e^{-i\varphi\hat{\mathcal{H}}_g} e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}$ y empleando la notación de matriz densidad, donde el estado inicial es $\hat{\rho}_0 = |n_0\rangle\langle n_0|$, podemos expresar el eco como:

$$M(t, \varphi) = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_0 \hat{\Phi}_\varphi^\dagger(t) \hat{\rho}_0 \hat{\Phi}_\varphi(t) \right\}, \quad (2.27)$$

relacionándolo con la OTOC,

$$\text{Tr} \left\{ [\hat{\Phi}_\varphi(t), \hat{\rho}_0]^\dagger [\hat{\Phi}_\varphi(t), \hat{\rho}_0] \right\} = 2(1 - M(t, \varphi)). \quad (2.28)$$

lo que permitirá una posterior generalización de la secuencia. Es necesario notar que el efecto de aplicar el gradiente de campo entra en la dinámica como una evolución independiente de la evolución natural (con $\hat{\mathcal{H}}$) del sistema, experimentalmente esto puede concebirse de varias maneras: por ejemplo, mediante un pulso intenso de gradiente de una duración menor a las escalas naturales del Hamiltoniano o mediante la supresión (cuando es posible) de la evolución natural.

2.4.2. Resultados numéricos/analíticos.

La simplicidad del espacio de Hilbert de una partícula nos permite, no solo una interpretación clara de esta secuencia y OTOC sino también de las magnitudes que se desprenden del mismo. Utilizando Ec. (2.24) y (2.25) podemos expandir Ec. (2.26)

$$M(t, \varphi) = \left| \sum_n |b_n(t)|^2 e^{-i\varphi n} \right|^2 = \sum_{m,n} |b_n(t)|^2 |b_m(t)|^2 e^{-i\varphi(m-n)} \quad (2.29)$$

$$= \sum_j Q(t, j) e^{-i\varphi j}, \quad (2.30)$$

donde se puede ver directamente que, transformando Fourier en φ , se obtiene un espectro $Q(t, j)$ que contiene información de la función de onda en todo el espacio. El valor medio del espectro a tiempos largos se muestra en Fig. 2.4)b para la cadena HHAA con $W = 1J$ y $W = 4J$ (verde y azul respectivamente), donde se observa que el mismo muestra la localización (o no) de la excitación.

En particular, es evidente que el elemento central de la distribución de Fourier $Q(t, j = 0)$ corresponde al IPR dinámico, ya que simplemente se relaciona con los términos en la Ecuación (2.29) donde $n = m$:

$$Q(t, j = 0) = \sum_n |b_n(t)|^4. \quad (2.31)$$

Con un poco más de álgebra (Ver Apéndice A), se puede demostrar que la varianza de la

distribución es igual a la varianza de la función de onda,

$$\sigma_0^2(t) = 1/2 \sum_j j^2 Q(t, j) = \sum_n n^2 |b_n(t)|. \quad (2.32)$$

Ambas igualdades han sido corroboradas numéricamente. Para $j \neq 0$, $Q(t, j)$ muestra la correlación media entre la probabilidad de ocupación de sitios a una distancia j , consecuentemente, en el régimen localizado, este valor se vuelve exponencialmente pequeño con j .

Esta secuencia puede ser generalizada utilizando distintas dependencias en el potencial, no necesariamente un gradiente (lineal), permitiendo extraer información complementaria, por ejemplo, momentos superiores de la distribución de probabilidad espacial.

2.5. Conclusiones.

En este capítulo, hemos presentamos el modelo de Harper-Hofstadter-Andrè-Aubry, el cual será extensamente utilizado en los capítulos posteriores de esta tesis. Este modelo se destaca por la claridad y limpieza de la física que proporciona: una transición entre estados deslocalizados a localizados en todo el espectro a un valor finito del potencial. Al mismo tiempo, la dinámica se distingue claramente en cada régimen: balística, difusiva y localizada.

En el punto crítico, donde la dinámica se vuelve difusiva, el Hamiltoniano es autodual, y las auto-energías y autoestados del Hamiltoniano exhiben un carácter fractal. Estos dos fenómenos, estrechamente relacionados entre sí [146], podrían conferir cierta estabilidad al sistema, especialmente frente a influencias externas, i.e. la decoherencia generada por un ambiente.

Centrándonos en la dinámica de excitaciones en este modelo, concluimos que es conveniente utilizar excitaciones inicialmente en el centro de la cadena, a modo de minimizar (prácticamente evitar) los efectos de estados de borde.

Entre las contribuciones originales de este capítulo se incluyen la caracterización del tiempo medio de dispersión elástica τ_W y su relación con el coeficiente de difusión en el punto crítico, la velocidad de crecimiento del segundo momento a tiempos largos u para el régimen extendido y la introducción del IPR dinámico.

Por último, desarrollamos un procedimiento que nos permite extraer de manera exacta el IPR dinámico y la varianza de la excitación, midiendo solamente la probabilidad de que la excitación se encuentre en el sitio inicial y manipulando globalmente el sistema. Este procedimiento, basado en la perturbación de la excitación y la inversión de su evolución (Eco de Losdchmidt/OTOC), fue testeado exitosamente en el modelo de Harper-Hofstadter-Andrè-Aubry.

Las contribuciones originales de este capítulo fueron publicadas en:

- Lozano-Negro, F. S., Zangara, P. R., & Pastawski, H. M. (2021). *Ergodicity breaking in an incommensurate system observed by OTOCs and Loschmidt echoes: From quantum diffusion to sub-diffusion*. Chaos, Solitons & Fractals, 150, 111175.
- Lozano-Negro, F. S., Navarro, E. A., Chávez, N. C., Mattiotti, F., Borgonovi, F., Pastawski, H. M., & Celardo, G. L. (2023). *Universal stability towards decoherence*

2.5. CONCLUSIONES.

in quantum diffusive 1D chains. Physical Review A 109 (4), 042213.

Capítulo 3

Dinámica cuántica en un ambiente decoherente.

En este Capítulo estudiamos la dinámica cuántica en sistemas de una partícula en presencia de un ambiente. En particular, nos enfocamos en estudiar bajo qué condiciones la dinámica no se ve afectada por decoherencia generada por el ambiente. Consideraremos tres modelos paradigmáticos, a saber, las cadenas de Harper-Hofstadter-Aubry-André y Fibonacci, junto con el modelo de matriz aleatoria PBRM (power banded random matrix). Se discutirá cómo la decoherencia afecta el coeficiente de difusión, la corriente estacionaria, y el eco de Loschmidt (pureza). Un modelo de colapso cuántico nos permitirá obtener expresiones analíticas universales para los tres modelos, aclarando en qué condiciones la dinámica es estable frente a un ambiente.

La comprensión y el control del transporte cuántico en presencia de ruido ambiental es crucial en muchas áreas de la física como los átomos fríos [147], los sistemas mesoscópicos [148] y la biología cuántica [149, 150]. Una comprensión más profunda nos permitiría diseñar sistemas de captación de luz solar más eficientes [95, 151, 152], dispositivos que transfieran carga o energía con una mínima disipación [137, 153] y sensores de fotones biomiméticos [154], así como para explicar la funcionalidad de muchos agregados biológicos [155–158].

Como fue mencionado en los capítulos anteriores, fue P. W. Anderson [36] quien entendió que la dispersión elástica de un desorden aleatorio descorrelacionado que excede un valor crítico induce la localización de excitaciones cuánticas y una *transición metal-aislante* (MIT). Mientras que en 3D este desorden crítico es finito, en 1D cualquier cantidad de desorden es suficiente para generar esta localización. Dos décadas más tarde se descubrió que el desorden correlacionado y los acoplamientos (*hopping*) de largo alcance podrían permitir un MIT incluso en 1D [107, 159–161].

Los diferentes efectos del ambiente fueron considerados por R. Landauer [86], N. Mott [162] y H. Haken [163]. Específicamente, Landauer notó que un sistema finito real intercambia partículas con reservorios externos a través de sondas de corriente y voltaje, una noción que M. Büttiker utilizó para describir la decoherencia ambiental y la termalización [87, 88]. Tanto Haken como Mott intentaron abordar el papel de un baño térmico. Un modelo muy simple, pero ampliamente utilizado, para el baño ambiental es el modelo

de Haken-Strobl, que describe fluctuaciones dinámicas no correlacionadas en las energías del sitio.

Más tarde, Mott predijo un régimen de acoplamiento variable (*variable range hopping*) en el que el intercambio de energía entre fonones y los estados localizados de Anderson favorecería la conductividad antes de que la decoherencia congele la dinámica [164]. Así, en el régimen localizado, la conductividad 1D alcanza un máximo [88, 95, 142, 165] cuando la incertidumbre energética asociada con la dispersión elástica y la resultante del acoplamiento con el medio ambiente (es decir, procesos de decoherencia) [166, 167] se vuelven comparables. Por el contrario, la dinámica balística de un cristal perfecto siempre se degrada por los procesos de dispersión decoherentes inducidos térmicamente [168]. *Un tópico mucho menos estudiado es cómo el ruido decoherente afecta al transporte alrededor del MIT y, más generalmente, en presencia de una dinámica de difusión cuántica (coherente).*

Trabajos recientes sobre el transporte excitónico en biomoléculas grandes, como los complejos de antenas fotosintéticas, buscan explicar la desconcertante gran eficiencia de muchos sistemas naturales y biomiméticos [95, 165, 169, 170]. En este contexto, S. Kauffman [97] propuso la intrigante hipótesis del “reino en equilibrio” (“poised realm”) de que, en los sistemas biológicos, el transporte de excitónico ocurre al “borde del caos”. Esto llevó a Vattay y col. [99] a proponer que los sistemas 1D cerca del MIT son óptimos para el transporte porque la decoherencia no afecta al sistema tan fuertemente como lo hace en el régimen extendido, al tiempo que garantiza la deslocalización necesaria para el transporte.

Esta hipótesis parece estar en desacuerdo con un análisis teórico previo [89] que indica que es la dinámica intrínsecamente difusiva de algunos sistemas 1D lo que produce una estabilidad particular del transporte hacia la decoherencia.

Este capítulo apunta a resolver este conflicto. Para ello, estudiamos algunos modelos paradigmáticos que permitan una difusión coherente. Comenzando con el modelo Harper-Hofstadter-Aubry-André (HHAA) [107], ya que, la presencia de un punto crítico y una dinámica difusiva (Capítulo 2), lo vuelven un sistema ideal para poner a prueba estos principios.

En la cadena HHAA encontramos que mientras la magnitud de la decoherencia permanezca por debajo de un valor característico γ_ϕ^c , ver Fig. 3.3b, el coeficiente de difusión D depende muy débilmente del ruido decoherente. Por otro lado, las propiedades del transporte tanto en el régimen extendido como en el localizado se ven fuertemente afectadas por la decoherencia. También vemos que, en tiempos prolongados, D determina la corriente y la reversibilidad del sistema evaluada por la desintegración del *eco de Loschmidt* (LE). Por lo tanto, en la MIT, ambas magnitudes son casi independientes de la intensidad del ruido decoherente. Para entender el origen de esta estabilidad consideramos un modelo de colapso cuántico para la decoherencia que nos permite un acercamiento analítico al coeficiente de difusión en presencia de decoherencia.

Sin embargo, estos hallazgos no son suficientes para responder a la pregunta de si la estabilidad frente a la decoherencia proviene específicamente de la dinámica cuántica difusiva o si, en cambio, esta estabilidad es intrínseca al punto crítico. Por esta razón también estudiamos la cadena de Fibonacci [171] y las *matrices aleatorias* (PBRM, *power banded random matrices*) [161], donde existe un régimen del tipo difusivo para un rango de parámetros independientemente de su criticidad. Nuestros resultados muestran que, siempre que un sistema se encuentra en un régimen difusivo coherente, el transporte es extremadamente estable frente a la decoherencia, incluso fuera del punto crítico. Por

último, pero no menos importante, pudimos encontrar una expresión *universal* para D , válida en el régimen difusivo coherente, que depende únicamente de un único parámetro físico: la relación entre el tiempo medio de dispersión elástica y el tiempo de decoherencia.

3.1. El ambiente.

El ambiente considerado en este capítulo será representado por la presencia de un potencial estocástico (ruido blanco) local $V(t) = \sum_n \tilde{\varepsilon}_n(t) |n\rangle \langle n|$. El mismo se describe mediante el modelo Haken-Strobl (HS) [93], ampliamente utilizado para el transporte excitónico e introducido en el Capítulo 1. Consecuentemente, las fluctuaciones estocás-ticas y no correlacionadas de las energías de sitio cumplen $\langle \tilde{\varepsilon}_i(t) \rangle = 0$ y $\langle \tilde{\varepsilon}_n(t) \tilde{\varepsilon}_m(t') \rangle = \hbar \gamma_\phi \delta_{nm} \delta(t - t')$.

La dinámica puede obtenerse mediante la ecuación maestra (ME) de Lindblad:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \mathcal{L}[\hat{\rho}] = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}] - \frac{\gamma_\phi}{2\hbar} \sum_{n=1}^N [|n\rangle \langle n|, [|n\rangle \langle n|, \hat{\rho}]], \quad (3.1)$$

donde γ_ϕ/\hbar es una tasa de decoherencia relacionada con la temperatura. Esta aproximación es razonable cuando la energía térmica es del mismo orden que el ancho espectral del sistema, como ocurre en muchos sistemas biológicos [95, 172]. La ecuación maestra de HS conduce, en tiempos infinitos, a una población estacionaria igualmente probable en todos los sitios [151]. La dinámica de la excitación hacia los valores equilibrios es, en el límite de tamaño infinito y para tiempos mayores al tiempo de decoherencia, difusiva [166]. El coeficiente de difusión puede ser obtenido directamente de la dinámica, ó de forma alternativa, utilizando la fórmula de Green-Kubo [167]:

$$D(\vec{u}) = \frac{\hbar}{N} \sum_{\mu,\nu=1}^N \frac{\gamma_\phi}{\gamma_\phi^2 + \omega_{\mu,\nu}^2} |\hat{j}_{\mu,\nu}(\vec{u})|^2, \quad (3.2)$$

donde \vec{u} es un vector unitario que indica la dirección del transporte, γ_ϕ es la magnitud de la decoherencia, $\omega_{\mu,\nu} = \varepsilon_\mu - \varepsilon_\nu$ es la diferencia de energía entre los autoestados μ y ν , y $\hat{j}_{\mu,\nu}$ es el operador de flujo en la base de autoestados del Hamiltoniano. Una descripción más detallada puede encontrarse en el Apéndice B.2.

Obtener el coeficiente de difusión a partir de la dinámica, a partir de la resolución numérica de la ecuación maestra, requiere manejar matrices $N^2 \times N^2$. Para superar este límite utilizamos el modelo *Quantum-Drift* (QD) [90], un enfoque estocástico que vuelve mucho más eficiente el cálculo numérico, permitiéndonos manejar cadenas de más de 10^4 sitios.

3.1.1. El Quantum-Drift.

El Quantum-Drift fue concebido como una realización de las sondas de tensión locales de Büttiker [89] en un contexto dinámico. Aquí, la función de onda del sistema sigue una dinámica de Trotter-Suzuki con procesos de colapso locales representados como energías de sitio que fluctúan según un proceso de Poisson. Esto reduce el coste computacional

3.2. LA CADENA HHAA CON DECOHERENCIA I.

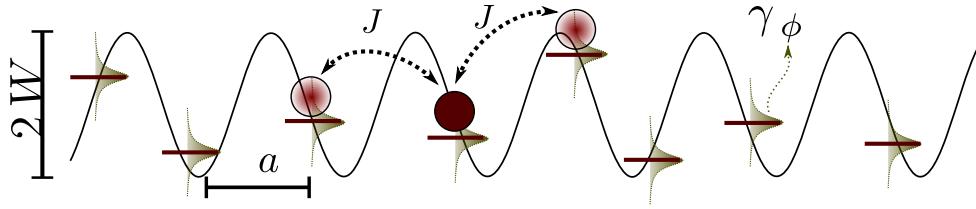


Figura 3.1: Modelo HHAA decoherente: las líneas horizontales son energías del sitio dadas por el potencial sinusoidal de amplitud W , J es la amplitud de hopping, las incertidumbres Lorentzianas indican las fluctuaciones en las energías de sitio generando decoherencia.

del cálculo de la dinámica en presencia de decoherencia, ya que sólo implica la evolución de Trotter-Suzuki del vector de onda (tamaño N) [90, 173]. La implementación eficiente (relación precisión/costo computacional) del algoritmo de Trotter-Suzuki es discutida en detalle en las tesis doctorales de Fernando Cucchietti, Pablo Zangara, y Lucas Fernández [174–176], y es brevemente discutida en el apéndice E.

La dinámica se obtiene mediante la aplicación secuencial de operadores de evolución unitarios a la función de onda en pequeños pasos de tiempo (dt). El ruido/decoherencia (interacción con el medio ambiente), se introduce agregando fluctuaciones de energías estocásticas en cada sitio a cada paso, $\hat{\Gamma}_\phi = \sum_n \beta_n |n\rangle \langle n|$, no correlacionadas temporal o espacialmente. La distribución de probabilidad de estas fluctuaciones es una función de Lorentz,

$$P(\beta_n) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\gamma_\phi}{2}}{\beta_n^2 + (\frac{\gamma_\phi}{2})^2}. \quad (3.3)$$

Consiguentemente, la evolución unitaria dada en un pequeño paso temporal dt es:

$$\hat{U}(dt) \approx e^{i\hat{\Gamma}_\phi dt/\hbar} e^{-i\hat{H}dt/\hbar}, \quad (3.4)$$

donde \hat{H} es el Hamiltoniano del sistema. Finalmente, la función de onda evolucionada a tiempo $t = N_t dt$ viene dada por:

$$|\psi(t)\rangle = \prod_{j=1}^{N_t} e^{i\hat{\Gamma}_\phi(j)dt/\hbar} e^{-i\hat{H}dt/\hbar} |\psi(0)\rangle. \quad (3.5)$$

3.2. La cadena HHAA con decoherencia I.

El modelo de HHAA (Fig. 3.1), discutido en el capítulo anterior, consiste en un Hamiltoniano de enlace fuerte con un potencial de sitio sinusoidal:

$$\hat{H} = \sum_n -J(|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) + \sum_n W \cos(2\pi qna + \theta) |n\rangle \langle n|, \quad (3.6)$$

donde q es un vector de onda incomensurado con la red, a la distancia entre sitios y $0 < \theta < 2\pi$ una fase aleatoria. En principio consideramos $q = q_g = (\sqrt{5} - 1)/2a$, sin embargo, otros valores de q serán discutidos en la sección 3.4.2. En esta sección analizaremos los efectos de incorporar un ambiente decoherente descrito por el modelo de Haken-Strobl

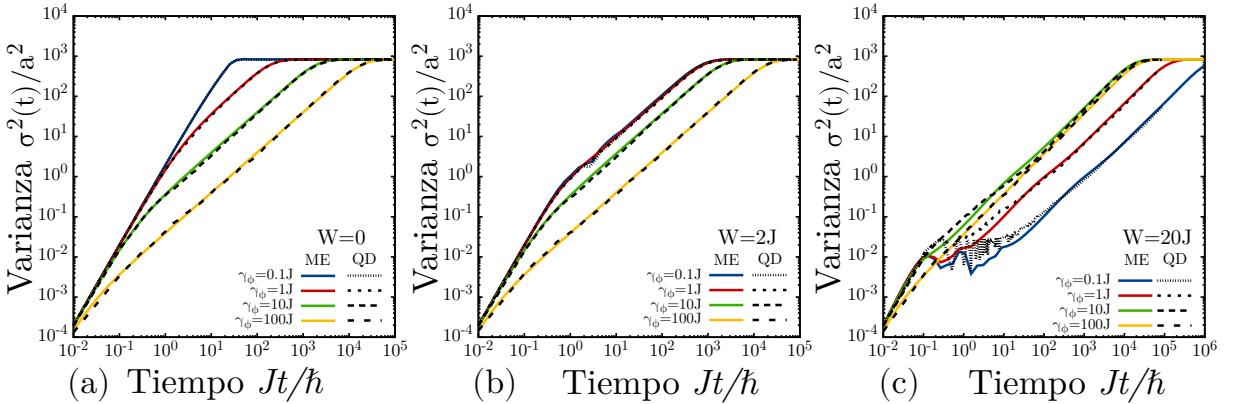


Figura 3.2: Evolución del segundo momento de la excitación para el modelo HHAA. El estado inicial es localizado sobre un sitio en el medio de la cadena. Curvas sólidas: Haken-Strobl calculado a partir de una evolución Lindlandiana (ME). Curvas discontinuas: simulación utilizando el Quantum-Drift (QD). Los parámetros utilizados son $N = 100$, (a) $W = 0$, (b) $W = 2J$ and (c) $W = 20J$.

(Ec. (3.1)).

Los efectos de un ambiente HS en el Hamiltoniano de HHAA han sido estudiados previamente [177–179]. En particular, nuestros colaboradores E. Alvarez Navarro y G. L. Celardo encontraron cierta estabilidad de la corriente estacionaria observada al conectar una fuente y un sumidero a la cadena HHAA en el punto crítico [179]. Estos resultados son detallados en el Apéndice B.1. Sintetizando, la corriente estacionaria siempre decrece al aumentar la magnitud de la decoherencia cuando el sistema está en la fase extendida ($W < 2J$); aumenta hasta llegar a una corriente máxima para luego decrecer en la fase localizada ($W > 2J$) y es estable hasta un dado valor de la decoherencia en el punto crítico ($W = 2J$). Sin embargo, estos cálculos se limitan a un tamaño del sistema relativamente pequeño ($N \leq 100$). Esta dificultad puede ser sorteada al extender la dinámica del Quantum-Drift incluyendo la presencia de una fuente y un sumidero, o notando que la corriente estacionaria está determinada por el coeficiente de difusión de una excitación en la cadena (Apéndice B.1.1) y utilizando la evolución QD para encontrar el mismo.

Consecuentemente, en esta sección nos centramos en el estudio de la evolución de la varianza $\sigma^2(t) = a^2 [\sum_n \rho_{n,n}(t)n^2 - (\sum_n \rho_{n,n}(t)n)^2]$. Como estado inicial se utiliza una excitación local en el medio de la cadena, evitando efectos de borde. De la evolución de esta excitación extraemos el coeficiente de difusión $D = \sigma^2(t)/(2t)$ a tiempos largos. De manera independiente, el coeficiente de difusión también puede ser computado basándonos en los autoestados y autoenergías del Hamiltoniano siguiendo el enfoque de Green-Kubo (Apéndice B.2).

La evolución es generada utilizando el algoritmo de Quantum-Drift para valores de $N > 100$. Para $N \leq 100$, el cálculo fue realizado tanto utilizando el QD como mediante diagonalización exacta del Lindbladiano de Haken-Strobl (Ec. (3.1)). La Fig. 3.2 muestra la varianza en función del tiempo en los tres regímenes y para diferentes valores del ambiente γ_ϕ computada con ambos métodos. Como se puede ver, existe una muy buena concordancia entre la evolución Lindbladiana y del QD para el segundo momento de una excitación tanto para diferentes intensidades de desfase y parámetros del sistema (en este caso, la amplitud del potencial W).

3.2. LA CADENA HHAA CON DECOHERENCIA I.

Cuando el sistema está en contacto con un entorno, las fluctuaciones de las energías de sitio afectan la dinámica, induciendo un comportamiento difusivo. En la Fig. 3.3a mostramos (símbolos), para $W < 2J$ y $W > 2J$, cómo la dinámica se vuelve difusiva después de un tiempo $\tau_\phi \approx \hbar/\gamma_\phi$ (ver línea de puntos vertical). En general, el coeficiente de difusión de esta dinámica, originada en la interacción entre la dinámica coherente y el ruido, depende de la magnitud de la decoherencia. Excepto en el MIT, donde, curiosamente, la dinámica sigue siendo difusiva con un coeficiente de difusión muy cercano a D_0 , el coeficiente de difusión en ausencia de ruido.

A medida que aumenta la magnitud de la decoherencia, D disminuye en el régimen extendido, ya que las interferencias específicas que permiten la dinámica balística son destruidas por el ruido. En el régimen localizado D alcanza un máximo, es decir, para valores pequeños de γ_ϕ la decoherencia contribuye a romper la localización de la excitación y, por lo tanto, a la difusión. Sin embargo, si γ_ϕ es demasiado grande, el propio ruido comienza a entorpecer la dinámica y consiguientemente D disminuye a medida que γ_ϕ aumenta. Ambos comportamientos se muestran claramente en la Fig. 3.3b (símbolos verdes y azules respectivamente). Sorprendentemente, en el MIT, D es casi independiente de la decoherencia hasta $\gamma_\phi^c = 2\hbar/\tau_W$, ver los cuadrados rojos y la línea de puntos vertical en la Fig. 3.3b. En este caso, la decoherencia parece no afectar al sistema hasta entrado en el régimen de decoherencia alta o *Quantum-Zeno* observado en todos los regímenes del Hamiltoniano para $\gamma_\phi > \gamma_\phi^c$. En función de la magnitud del potencial en el sitio W , las curvas del coeficiente de difusión para diferentes valores de decoherencia se cruzan en $W = 2J$, lo que sugiere la independencia de la decoherencia precisamente en el punto crítico (Ver Fig. 3.3c.).

Para comprender la dependencia exacta de D de γ_ϕ aplicamos un modelo de colapso cuántico para los efectos del ambiente. Esto último puede asimilarse a una secuencia de mediciones de la posición de la excitación [90], que induce un colapso local que conduce a una caminata aleatoria [89]. Entonces D se puede determinar fácilmente a partir de $\sigma_0^2(t)$ como:

$$D \simeq \int_0^\infty dt_i p(t_i) \sigma_0^2(t_i) / (2\tau), \quad (3.7)$$

donde $p(t_i)$ es la densidad de probabilidad de la medición en el momento t_i y $\tau = \int_0^\infty dt_i t_i p(t_i)$. Dado que el modelo HS corresponde a un proceso de Poisson para los colapsos de medición [90], $p(t_i) = e^{-t_i/\tau_\phi} / \tau_\phi$. A partir de $\sigma_0^2(t)$, obtenido en ausencia de decoherencia, y luego integrando numéricamente la Ec. (3.7) obtenemos resultados que concuerdan excelentemente con los datos numéricos, curvas negras en la Fig. 3.3b.

A partir de la Ec. (3.7) se obtiene un primer indicio sobre el origen de la estabilidad observada. Suponiendo una dinámica coherente difusiva, $\sigma_0^2(t) = 2D_0t$, inmediatamente se obtiene que $D = D_0$, es decir, independiente de γ_ϕ .

En la siguiente sección se desarrolla el modelo de colapso cuántico de donde se deriva (3.7). El mismo nos permitirá un estudio analítico del coeficiente de difusión en los límites de decoherencia débil y fuerte. Los resultados son comparados con la dinámica simulada mediante el QD y con el coeficiente de difusión obtenido a partir de la expresión de Green-Kubo.

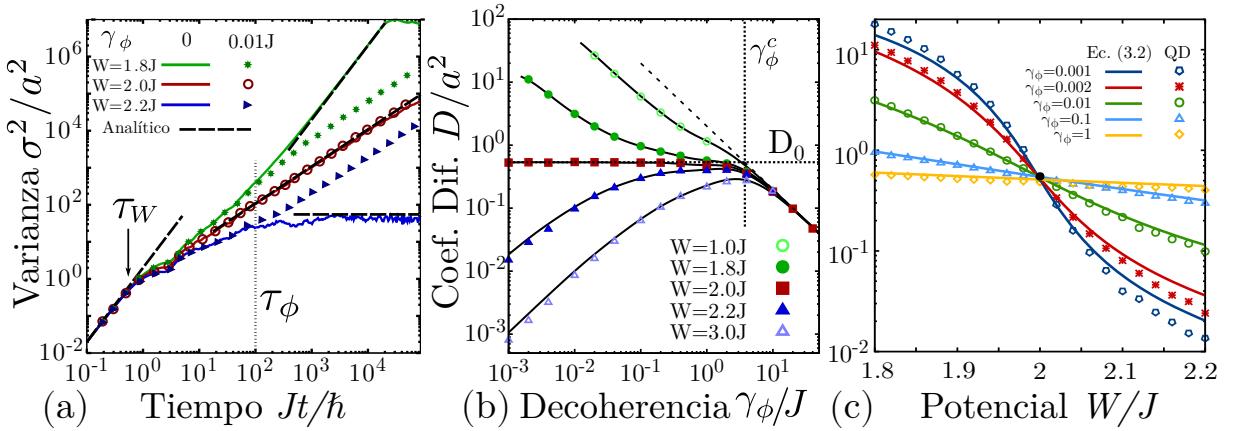


Figura 3.3: (a) Difusión de excitación para el modelo HHAA con $N = 10000$ para diferentes W . Las dinámicas coherentes se muestran con curvas sólidas, mientras que los símbolos muestran curvas decoherentes con un valor fijo de $\gamma_\phi = 0.01J$. Tanto los símbolos como las curvas comparten el mismo color para indicar una W determinada. La flecha vertical muestra el tiempo medio de dispersión elástica τ_W , Ec. (2.22). Las líneas discontinuas negras son las estimaciones analíticas de $\gamma_\phi = 0$, ver texto. La línea de puntos vertical muestra el tiempo de decoherencia $\tau_\phi = \hbar/\gamma_\phi$. (b) Coeficiente de difusión escalado D/a^2 frente a la magnitud de decoherencia γ_ϕ/J para diferentes W . Las curvas negras sólidas resultan de la Ec. (3.7). Los diferentes regímenes son extendidos (círculos verdes), críticos (cuadrados rojos) y localizados (triángulos azules). La línea punteada negra horizontal es la estimación teórica coherente D_0/a^2 ; la línea discontinua negra es la asintótica $D/a^2 \simeq 2J^2/\hbar\gamma_\phi$, y la línea punteada vertical es la decoherencia característica $\gamma_\phi^c = 2\hbar/\tau_W$. Datos numéricos obtenidos por el método QD (símbolos) para $N = 1000$. En todos los paneles: $q = (\sqrt{5} - 1)/2$, $J = 1$ y $\hbar = 1$. (c) Coeficiente de difusión D/a^2 frente a W/J para diferentes γ_ϕ . Las curvas coloreadas se calculan a partir de la ecuación (3.2). Los símbolos se obtienen de Quantum Drift. $N = 1000$.

3.3. Un modelo de mediciones cuánticas.

Cuando un sistema cuántico es afectado por ruido, considerado a partir del modelo de Haken-Strobl, puede pensarse que el mismo es sistemáticamente medido por el entorno [90, 180]. Estas mediciones ocurren en momentos aleatorios, donde los tiempos entre mediciones se distribuyen como $p(t) = e^{-t/\tau_\phi}/\tau_\phi$, con $\tau_\phi = \hbar/\gamma_\phi$. En esta sección, empleamos esta interpretación de la decoherencia para obtener expresiones analíticas para el coeficiente de difusión.

Cuando se produce la medición, el sistema tiene una distribución de probabilidad de estar en la posición r , $P_0(r, t, r_0, t_0)$, determinada por la dinámica Hamiltoniana coherente. La posición inicial, r_0 en t_0 , solo definirá el centro de la densidad de probabilidad, ya que el sistema es isotrópico. Esta suposición es válida en los tres modelos discutidos en este trabajo, a menos que la excitación esté cerca de los bordes. En consecuencia, $P_0(r, t, r_0, t_0) = P_0(r - r_0, t - t_0, 0, 0)$. Por simplicidad consideraremos $r_0 = 0$, $t_0 = 0$.

La densidad de probabilidad de medir el sistema en el sitio r en el tiempo t una vez incluido el proceso de medición ($\tilde{P}(r, t, 0, 0)$) está determinada por la ecuación integral:

$$\tilde{P}(r, t, 0, 0) = \underbrace{P_0(r, t, 0, 0) \left(1 - \int_0^t p(t_i) dt_i\right)}_{\text{Sin medición.}} + \underbrace{\int dr_i \int_0^t dt_i p(t_i) \tilde{P}(r, t, r_i, t_i) P_0(r_i, t_i, 0, 0)}_{\text{Medición en } (t_i, r_i)} \quad (3.8)$$

que consideraba la probabilidad de no ser medido y, recurrentemente, de ser medido varias veces.

Para analizar directamente el segundo momento de la distribución multiplicamos por r^2 e integramos sobre r en ambos lados:

$$\begin{aligned} \sigma^2(t) &= \sigma_0^2(t) \left(1 - \int_0^t p(t_i) dt_i\right) + \int dr_i \int_0^t dt_i p(t_i) \underbrace{\int dr \tilde{P}(r, t, r_i, t_i) r^2 P_0(r_i, t_i, 0, 0)}_{r_i^2 + \sigma^2(t-t_i)}, \\ \sigma^2(t) &= \sigma_0^2(t) \left(1 - \int_0^t p(t_i) dt_i\right) + \int_0^t dt_i p(t_i) \sigma_0^2(t_i) + \int_0^t dt_i p(t_i) \sigma^2(t - t_i), \end{aligned} \quad (3.9)$$

donde hemos utilizado la independencia de las probabilidades del sitio y tiempo inicial.

Puede demostrarse mediante la transformada de Laplace en la ecuación (3.9) (Apéndice C), que para $p(t)$ y $\sigma_0^2(t)$ “bien comportadas” (cumplido trivialmente en los sistemas que consideramos), la dinámica de la varianza $\sigma^2(t)$ se vuelve difusiva a tiempos suficientemente largos. Por lo tanto, en el límite de tiempo largo ($t \rightarrow \infty$) tenemos:

$$\begin{aligned} \sigma^2(t) &\simeq 2Dt, \\ \left(1 - \int_0^t p(t_i) dt_i\right) &\simeq 0, \\ \int_0^t dt_i p(t_i) t_i &\simeq \tau, \end{aligned}$$

y, reemplazando en Ec. (3.9) se obtiene Ec. (3.7):

$$D = \frac{\int_0^\infty dt_i p(t_i) \sigma_0^2(t_i)}{2\tau}.$$

Entonces, si $\sigma_0^2(t) = 2D_0t \forall t$ el proceso de medición no afecta el coeficiente de difusión:

$$D = 2D_0 \frac{\int_0^\infty p(t_i) t_i dt_i}{2\tau} = D_0. \quad (3.10)$$

Una dinámica físicamente más realista puede ser modelada como inicialmente balística hasta algún tiempo τ_W , seguida de una dinámica difusiva:

$$\sigma_0^2(t) = \begin{cases} v_0^2 t^2 & \text{si } t < \tau_W \\ 2D_0 t & \text{si } t > \tau_W \end{cases} \quad \text{con } D_0 = \frac{v_0^2 \tau_W}{2} \quad (3.11)$$

de donde sigue,

$$D = \frac{1}{2\tau} \left(\int_0^{\tau_W} \frac{2D_0}{\tau_W} t^2 p(t) dt + \int_{\tau_W}^\infty 2D_0 t p(t) dt \right), \quad (3.12)$$

esta expresión permite observar que la dependencia de D con el ambiente dependerá de en qué régimen dinámico ocurren la mayoría de las mediciones. Si las mediciones suceden siempre en el régimen difusivo, D es en consecuencia igual a su valor coherente. En caso contrario, si las mediciones caen en el régimen balístico, D decrecerá proporcionalmente a $\langle t^2 \rangle_{p(t)} / \langle t \rangle_{p(t)}$, usualmente $\propto 1/\gamma_\phi$.

Utilizando un proceso de Poisson para las mediciones: $p(t) = \frac{e^{-t/\tau_\phi}}{\tau_\phi}$, tenemos:

$$D(\tau_\phi) = D_0 \left(\frac{2\tau_\phi}{\tau_W} - \left(1 + \frac{2\tau_\phi}{\tau_W} \right) e^{-\tau_W/\tau_\phi} \right), \quad (3.13)$$

esta expresión captura la dependencia de D para valores grandes y pequeños de τ_ϕ frente a τ_W , de modo que $D \approx D_0(1 - \frac{1}{6}(\frac{\tau_W}{\tau_\phi})^2)$ y $D \approx v_0^2 \tau_\phi$ respectivamente. En una primera aproximación, se podría considerar un proceso $p_\delta(t) = \delta(t - 2\tau_\phi)$, que produciría un comportamiento totalmente independiente de la decoherencia para $\tau_\phi < \tau_W/2$ entrando luego en el régimen de Zenón cuántico: $\tilde{D} = v_0^2 \tau_W = D_0$ para $\tau_\phi > \tau_W/2$ y $\tilde{D} = v_0^2 2\tau_\phi = D_0 2\tau_\phi / \tau_W$ para $\tau_\phi < \tau_W/2$.

3.3.1. Generalización para condiciones iniciales no locales.

Las ecuaciones (3.8) y (3.9) son aplicables cuando el estado inicial está localizado en la base de sitios, es decir, un estado similar a una función delta. En esta sección, exploraremos el efecto de comenzar con un paquete de ondas coherente que no sea una delta. En este caso, la evolución de la probabilidad tras las mediciones no es necesariamente la misma que inicialmente, dado que ahora no partimos de un estado local.

A continuación, la siguiente notación será utilizada: $\tilde{P}(r, t)$ será la densidad de probabilidad final, $\tilde{P}_0(r, t, 0, 0)$ la densidad probabilidad en presencia del entorno cuando la condición inicial es una delta, $P_0(r, t, 0, 0)$ la evolución coherente de un estado delta, y $P_{CI}(r, t)$ la evolución coherente con una condición inicial particular. La probabilidad

3.3. UN MODELO DE MEDICIONES CUÁNTICAS.

$\tilde{P}(r, t)$ será consecuencia de una evolución coherente del estado inicial $P_{CI}(r, t)$ y de una evolución que tiene en cuenta el colapso del estado. Este último término describe una evolución coherente hasta un tiempo dado t_i , donde el ambiente colapsa la función de onda a un estado local, este estado evoluciona en presencia del ambiente ($\tilde{P}_0(r, t, r_i, t_i)$):

$$\tilde{P}(r, t) = P_{CI}(r, t) \left(1 - \int_0^t p(t_i) dt_i \right) + \int dr_i \int_0^t dt_i p(t_i) \tilde{P}_0(r, t, r_i, t_i) P_{CI}(r_i, t_i),$$

donde $\tilde{P}_0(r, t, r_i, t_i)$ queda determinado a partir de

$$\tilde{P}_0(r, t, 0, 0) = P_0(r, t, 0, 0) \left(1 - \int_0^t p(t_i) dt_i \right) + \int dr_i \int_0^t dt_i p(t_i) \tilde{P}_0(r, t, r_i, t_i) P_0(r_i, t_i, 0, 0),$$

siendo equivalente a la ecuación (3.8) y resolviéndose de manera independiente de la primera.

Suponiendo simetría de translación en el tiempo y el espacio, podemos escribir:

$$\tilde{\sigma}_{CI}^2(t) = \sigma_{CI}^2(t) \left(1 - \int_0^t p(t_i) dt_i \right) + \int_0^t dt_i p(t_i) \sigma_{CI}^2(t_i) + \int_0^t dt_i p(t_i) \sigma^2(t - t_i), \quad (3.14)$$

donde $\tilde{\sigma}_{CI}$ es la dispersión en presencia de ruido de una excitación particular (no local) con una dispersión coherente $\sigma_{CI}^2(t)$, $\sigma^2(t)$ es la varianza de un estado inicial local (tipo delta) dado por la ecuación (3.9). Puede notarse que el efecto de la condición inicial es transitorio, siendo los valores a tiempos largos gobernados por la dinámica decoherente de excitaciones locales. Esto es consistente con la perdida de memoria durante la evolución debido a la presencia del ambiente.

Estado inicial Gaussiano.

Ahora consideramos un paquete de ondas Gaussianas estacionarias como estado inicial:

$$\psi_n(t=0) = \frac{\sqrt{2} \cos(k_0 n)}{\sqrt{\sqrt{\pi}[1 + e^{-k_0^2 \sigma_x^2}]}} \exp\left[-\frac{n^2}{2\sigma_x^2}\right], \quad (3.15)$$

donde σ_x es el ancho del paquete, y k_0 el módulo medio del momento. La propagación coherente de esta función de onda será:

$$\sigma_G^2(t) = 2J^2 t^2 (1 - f(k_0, \sigma_x)) + \sigma_G^2(t=0)^2. \quad (3.16)$$

con $f(k_0, \sigma_x) = e^{-\frac{1}{\sigma_x^2}} \frac{e^{k_0^2 \sigma_x^2} \cos(2k_0) + 1}{e^{k_0^2 \sigma_x^2} + 1}$. Usando las ecuaciones descritas anteriormente, se deriva:

$$\tilde{\sigma}_G^2(t) = \frac{4J^2}{\Gamma^2} \left[(\Gamma t - 1) + e^{-t\Gamma} - f(k_0, \sigma_x)(1 - (t\Gamma + 1)e^{-t\Gamma}) \right] + \sigma_G^2(t=0)^2, \quad (3.17)$$

lo cual coincide con el resultado obtenido mediante el formalismo de Lindblad [181]. Si bien el comportamiento a tiempos largos queda determinado totalmente por la dinámica de excitaciones locales, el análisis del transitorio generado por paquetes coherentes

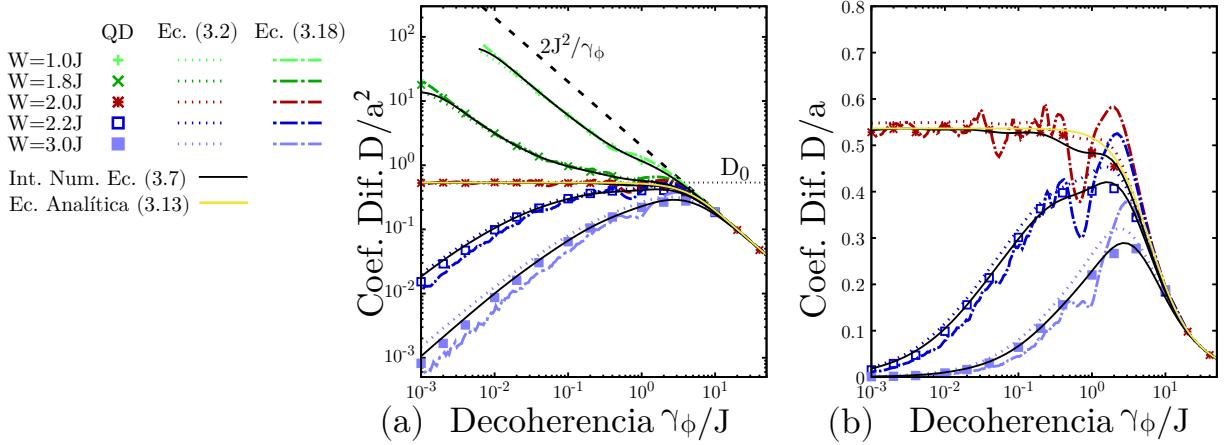


Figura 3.4: (a,b) Coeficiente de difusión versus decoherencia para el modelo HHAA. Los símbolos se han obtenido de la evolución temporal, las curvas punteadas de la Ec. (3.2) [Expresión Green-Kubo], curvas coloreadas con guiones y puntos (en tonos grises) de la ecuación (3.18) [Proceso Delta] y curvas negras sólidas de la ecuación (3.7) [Proceso de Poisson]. También se muestra: el coeficiente de difusión en el régimen de decoherencia fuerte (línea discontinua negra) y el coeficiente de difusión intrínseco en la MIT (D_0) como una línea de puntos horizontal, Ec. (2.23). La curva amarilla corresponde a la ec. (3.13). El panel (b) es el mismo que (a) pero en escala logarítmica lineal y excluyendo los datos del régimen extendido.

determinados es relevante en experimentos en materiales como en varias tecnologías cuánticas [181].

3.4. La cadena HHAA con decoherencia II.

En esta sección, se lleva a cabo un análisis numérico y analítico de la cadena de HHAA con decoherencia, detallando el comportamiento del coeficiente de difusión en cada régimen. Se comparan (y combinan) resultados de simulaciones QD, el método de colapso cuántico y el método de Green-Kubo. Se examina cómo varía el coeficiente de difusión D en los límites de decoherencia débil y fuerte, así como su dependencia con el vector de onda q asociado al potencial de HHAA.

3.4.1. Los regímenes límite.

Combinando los resultados analíticos para la dinámica de $\sigma_0^2(t)$ en el modelo HHAA (Sección 2.3.2) con la Ec. (3.7), es posible obtener el comportamiento de D en el límite de decoherencia fuerte y débil.

La ecuación (3.7) puede interpretarse como el coeficiente de difusión generado por una caminata aleatoria de pasos temporales δt camino libre medio l . El mismo se calcula a partir del valor esperado de la dispersión coherente $l^2 = \int_0^\infty \sigma_0^2(t)p(t)dt$. En esta sección consideraremos una caminata aleatoria correspondiente a un proceso delta [182] donde el sistema es medido por el entorno en tiempos iguales $\delta t = 2\hbar/\gamma_\phi$ (proceso delta) y un proceso de Poisson, $p(t) = e^{-t/\tau_\phi}/\tau_\phi$. En el primer caso, el coeficiente de difusión está

3.4. LA CADENA HHAA CON DECOHERENCIA II.

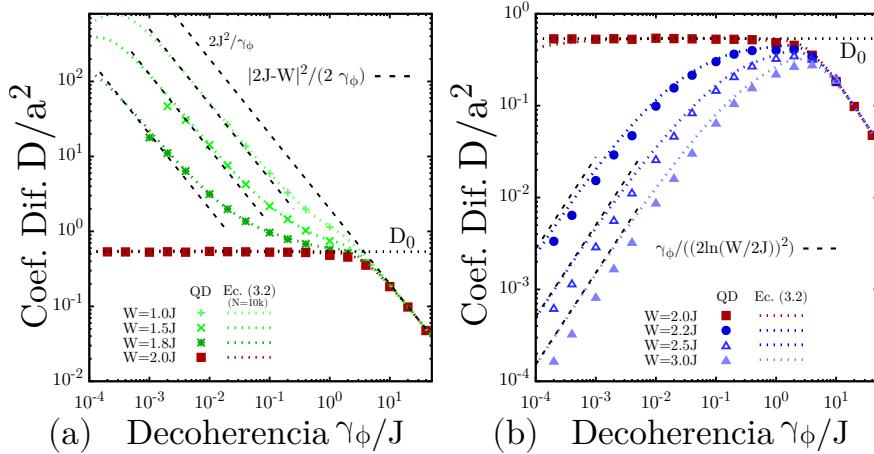


Figura 3.5: Coeficiente de difusión versus decoherencia para el modelo HHAA. Los símbolos se han obtenido de la evolución temporal de QD, las curvas punteadas de la fórmula de Green-Kubo y las líneas discontinuas representan las estimaciones analíticas. **(a)** Fase extendida, los resultados analíticos corresponden a la Ec. (3.20) (líneas discontinuas de color negro). **(b)** Fase localizada, los resultados analíticos corresponden a la Ec. (3.23) (líneas discontinuas de color negro). Los parámetros son $N = 1000$, $Q = (\sqrt{5} - 1)/2$, $J = 1$ y $\hbar = 1$.

directamente determinado por la dispersión coherente en el momento de la medición:

$$D = \frac{l^2}{2\delta t} = \frac{\sigma_0^2(t = \frac{2\hbar}{\gamma_\phi})}{2\frac{2\hbar}{\gamma_\phi}}, \quad (3.18)$$

esta expresión, por inexacta que sea, puede considerarse una primera aproximación al coeficiente de difusión.

Las figuras 3.4 muestran el coeficiente de difusión obtenido de la evolución temporal (símbolos), utilizando la fórmula de Green-Kubo Ec. (3.2) (curvas punteadas), el proceso delta Ec. (3.18) (curvas coloreadas con puntos y guiones) y de la integración numérica de Ec. (3.7) con un proceso de Poisson (curvas negras sólidas). La curva amarilla corresponde a la Ec. (3.13) donde $\sigma_0^2(t)$ es aproximado por una función a trazos. Observamos que usando un proceso de Poisson (Ec. (3.7)) obtenemos resultados más suaves que con un proceso Delta (Ec. (3.18)), ya que las fluctuaciones producidas por interferencias particulares se borronean debido a “mediciones” a distintos tiempos. Ambas curvas pueden obtenerse con un costo computacional casi idéntico, lo que indica que el proceso delta es útil principalmente como una primera aproximación o para obtener una intuición sobre el comportamiento esperado.

Decoherencia Fuerte.

Para una decoherencia lo suficientemente grande, $\gamma_\phi \gg \hbar/\tau_W$, el ruido interrumpe la dinámica antes de que la excitación note la naturaleza del sistema, por ejemplo, una fase extendida, crítica o localizada. Esto se conoce como el régimen de Zenón fuerte o Zenón cuántico directamente. En este caso, la medición (o la mayoría de las mediciones) ocurre durante la dinámica balística inicial, donde la varianza crece como $\sigma_0^2(t) = 2a^2 \frac{J^2}{\hbar^2} t^2$. Por lo tanto, la dinámica corresponde a una caminata aleatoria con un camino libre medio

$l^2 = 2a^2 \frac{J^2}{\hbar^2} \delta t^2$ y un tiempo libre medio $\delta t = \frac{2\hbar}{\gamma_\phi}$. Sigue que el coeficiente de difusión es:

$$D = \frac{1}{2} \frac{2a^2 J^2}{(\gamma_\phi/2)^2} \frac{\gamma_\phi}{2\hbar} = \frac{2a^2 J^2}{\hbar \gamma_\phi}. \quad (3.19)$$

El mismo resultado se obtiene con el proceso de Poisson $p(t) = e^{-t/\tau_\phi}/\tau_\phi$. Este resultado es válido para todo valor de γ_ϕ en una cadena ordenada infinita ($W = 0$) [183], ya que en ese caso $\tau_W \rightarrow \infty$. Observe que la Ec. (3.19) también es válida en presencia de ruido correlacionado (por ejemplo, procesos binarios y gaussianos), donde se ha demostrado que solo implica una renormalización de la intensidad de la decoherencia para tiempos de correlación cortos [90, 184].

Fase extendida ($W < 2J$).

Para una magnitud de decoherencia suficientemente pequeña (mientras más cerca estemos de la MIT, más pequeña), el sistema evoluciona coherentemente hasta alcanzar el régimen balístico de tiempos largos discutido en el capítulo anterior. En este caso, $\sigma_0^2(t) = \frac{a^2|2J-W|^2}{2\hbar^2}t^2$ de donde tenemos:

$$D = \frac{a^2|2J-W|^2}{2\hbar\gamma_\phi}. \quad (3.20)$$

Como fue percibido en el párrafo anterior, es necesario notar que a medida que nos acercamos al MIT, nuestra estimación es válida para un valor de decoherencia cada vez menor, ya que el sistema ingresa al régimen balístico a tiempos más largos. Usando el proceso de Poisson $p(t)$ y la Ec. (3.7) obtenemos los mismos resultados. En la Fig. 3.5a comparamos el coeficiente de difusión obtenido de las simulaciones numéricas (símbolos) con la aproximación analítica Ec. (3.20).

MIT ($W = 2J$).

En el punto crítico, para $t > \tau_W$ la dinámica es difusiva y la varianza depende linealmente del tiempo de medición $\sigma_0^2(\delta t) = 2D_0\delta t$. Dado que tenemos $l^2 = 2D_0\delta t$, siempre que $\gamma_\phi < 2\hbar/\tau_W$, y $D = l^2/(2\delta t)$ obtenemos:

$$D = \frac{2D_0\delta t}{2\delta t} = D_0, \quad (3.21)$$

es decir, un coeficiente de difusión independiente de la decoherencia.

Este resultado se demostró con anterioridad en la Sección 3.3, siendo válido para una dinámica difusiva a todo tiempo. Por otro lado, cuando consideramos una dinámica balística para tiempos cortos y un proceso de medición de Poisson aparecen algunas correcciones.

Fase localizada ($W > 2J$).

Al igual que en la fase deslocalizada, para una decoherencia suficientemente pequeña (dependiendo de qué tan cerca estemos del MIT), el sistema se localiza con una longitud

3.4. LA CADENA HHAA CON DECOHERENCIA II.

de localización $\xi = l/\sqrt{2}$ antes de que el ambiente produzca un efecto notable. Entonces, considerando $\sigma_0^2 = l^2$ en la ecuación (3.7):

$$\sigma^2(t) = \frac{l^2}{\tau_\phi} t = l^2 \frac{\gamma_\phi}{\hbar} t = 2\xi^2 \frac{\gamma_\phi}{\hbar} t. \quad (3.22)$$

Este límite también se encuentra en la Ref. [167] partiendo de la ecuación 3.2. Dado que en el modelo HHAA $2\xi^2 = 2a^2(2\ln(W/2J))^{-2}$, el coeficiente de difusión es:

$$D = \frac{\xi^2 \gamma_\phi}{\hbar} = \frac{a^2 \gamma_\phi}{(2\ln(W/2J))^2 \hbar}. \quad (3.23)$$

El resultado analítico se muestra en la Fig. 3.5b en comparación con los resultados numéricos. Observamos una pequeña discrepancia con la fórmula anterior, basada en el hecho de que el l^2 encontrado numéricamente es ligeramente más pequeño que el teórico. Observe que, a diferencia de los otros regímenes, el proceso delta y el de Poisson no producen la misma expresión (el uso de un proceso delta subestimaría el coeficiente de difusión en un factor de dos).

3.4.2. Variando la incommensurabilidad del potencial.

El tiempo medio de dispersión elástica τ_W y, consecuentemente, el coeficiente de difusión derivado para el punto crítico en ausencia de decoherencia en el Capítulo 2 (Ec. (2.23)) muestra una dependencia de q . Esto vuelve al vector de onda del potencial q un parámetro ideal para testear la validez de nuestra predicción analítica y la generalidad del régimen independiente de decoherencia. En esta sección analizamos la dinámica, coherente y en presencia del ambiente, con otros valores irracionales de q en el punto crítico.

Particularmente estudiamos la dinámica del sistema usando fracciones de la proporción áurea como números irracionales $q = q_g/m$, donde m es una potencia entera de dos. Las fracciones continuas de los irracionales utilizados se presentan en la Tabla I. Las pruebas con números irracionales de la forma $[0, \{m\}]$ arrojan resultados similares.

El desparramo en función del tiempo del paquete de ondas en ausencia y presencia de decoherencia, junto con la estimación analítica para el coeficiente (Ec. (2.23)) de difusión, se muestra en la Fig. 3.6a,b. Como se puede ver, el crecimiento balístico inicial (Ec. (2.18)) dura hasta un tiempo τ_W (Ec. (2.22)), indicado como líneas verticales. A partir de τ_W la dinámica es difusiva con un coeficiente de difusión dado por la Ec. (2.23). Notamos, ver panel (a), la presencia de oscilaciones en el segundo momento cuya amplitud aumenta a medida que q disminuye. Estas oscilaciones se borran parcialmente en presencia de decoherencia a tiempos prolongados, como se muestra en la Fig. 3.6b para $\gamma_\phi = 0.02$.

La Figura 3.6c muestra los valores ajustados de D (símbolos) junto con los valores obtenidos de la ecuación (3.2) (curvas discontinuas) como función de γ_ϕ para diferentes q en la MIT. Como líneas discontinuas verticales trazamos $\gamma_\phi^c = \frac{2\hbar}{\tau_W}$, que coinciden con el inicio del régimen de decoherencia fuerte, donde el coeficiente de difusión disminuye con la decoherencia. Observe que para valores grandes de m , el coeficiente de difusión D exhibe oscilaciones significativas con respecto a γ_ϕ . Este fenómeno surge de las oscilaciones observadas en la dinámica coherente (Ec. (3.7)), probablemente debido a la irrationalidad más débil de q en comparación con q_g , lo que conduciría a períodos de crecimiento “balístico” y

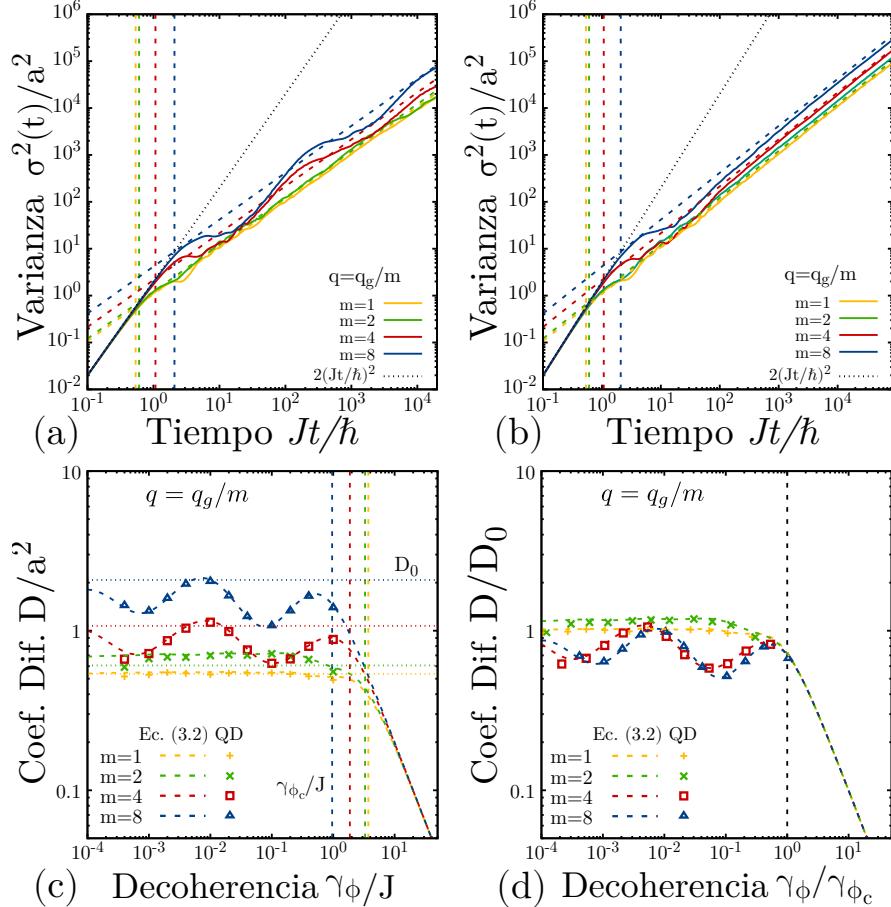


Figura 3.6: Paneles superiores: Evolución temporal de la propagación de una excitación en una cadena HHAA con $q = q_g/m$ en criticidad. Las líneas discontinuas verticales muestran τ_W (Ec. (2.22)), las líneas discontinuas transversales corresponden a $\sigma^2(t) = 2D_0t$ (Ec. (2.23)), mientras que la línea de puntos muestra la evolución balística inicial (Ec. (2.18)). **(a)** $\gamma_\phi = 0$, **(b)** $\gamma_\phi = 0.02$. Paneles inferiores: **(c)**: Coeficiente de difusión en función de la decoherencia γ_ϕ . D se calcula a partir de la dinámica QD (símbolos) y de la ecuación. (3.2) (líneas discontinuas). Las líneas de puntos horizontales muestran D_0 (Ec. (2.23)) y las líneas de puntos verticales $\gamma_{\phi}^c = \frac{2\hbar}{\tau_W}$. **(d)**: El coeficiente de difusión y la magnitud de desfase se vuelven a escalar en D_0 y γ_{ϕ}^c respectivamente. En los cuatro paneles, los colores (tonos de grises) indican diferentes valores de m . Los parámetros son $N = 10000$, $W = 2J$.

3.5. ¿CRITICIDAD O DIFUSIÓN?

Tabla 3.1: Fracción continua de los irracionales utilizados $q = q_g/m$. Los números entre llaves se repiten infinitamente en la fracción.

Fracción continua
$\frac{\sqrt{5}-1}{2} = [0, \{1\}] = \cfrac{1}{1 + \cfrac{1}{1 + \dots}}$
$\frac{1}{2}\frac{\sqrt{5}-1}{2} = [0, 3, \{4\}] = \cfrac{1}{3 + \cfrac{1}{4 + \cfrac{1}{4 + \dots}}}$
$\frac{1}{4}\frac{\sqrt{5}-1}{2} = [0, 6, \{2, 8\}] = \cfrac{1}{6 + \cfrac{1}{2 + \cfrac{1}{8 + \cfrac{1}{2 + \dots}}}}$
$\frac{1}{8}\frac{\sqrt{5}-1}{2} = [0, 12, \{1, 16\}] = \cfrac{1}{12 + \cfrac{1}{1 + \cfrac{1}{16 + \cfrac{1}{1 + \dots}}}}$

periodos de estancamiento. Una investigación más detallada es necesaria para comprender en detalle el origen de estas interesantes oscilaciones. En la Fig. 3.6d se muestra el coeficiente de difusión reescalado por el valor teórico en ausencia de decoherencia (Ec. (2.23)) y γ_ϕ reescalado por la tasa de dispersión elástica $\gamma_\phi^c = \frac{2\hbar}{\tau_W}$. La superposición observada Fig. 3.6d confirma la validez de nuestras expresiones analíticas de D y τ_W en función de q .

3.5. ¿Criticidad o difusión?

En este punto, parece estar claro que es la dinámica coherente del sistema lo que induce la estabilidad (o no) del coeficiente de difusión. Sin embargo, debido a que el modelo de HHAA es difusivo solo en el punto crítico, la separación de ambos casos resulta imposible. Es necesario, por consiguiente, encontrar modelos donde exista una dinámica difusiva independientemente de la presencia o no de un punto crítico.

Por este motivo en las siguientes secciones se estudiarán otros dos modelos: A) la cadena de Fibonacci [141, 171, 185] donde no hay MIT, pero el transporte cambia suavemente de superdifusivo a subdifusivo a medida que varía la amplitud del potencial en el sitio; B) El modelo PBRM [161] que presenta una MIT y un segundo momento difusivo en un rango finito de parámetros alrededor del MIT.

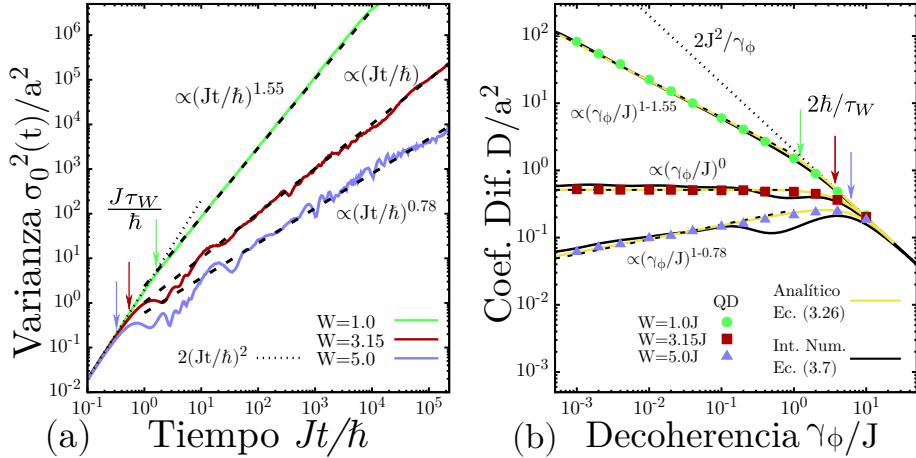


Figura 3.7: (a) Evolución temporal de la varianza de la excitación en ausencia de decoherencia para $W/J = \{1, 3.15, 5\}$ en la cadena de Fibonacci. Las líneas de puntos negros muestran la dispersión balística inicial (Ec. (2.18)), las flechas verticales τ_W (Ec. (2.21)), y las líneas a trazos negras muestran el comportamiento de la ley de potencia después de τ_W . (b) Coeficiente de difusión en función de la magnitud de la decoherencia. Los símbolos se ajustan directamente de la dinámica QD, las curvas negras muestran la Ec. (3.7) integrada numéricamente usando un proceso de Poisson, y las curvas en amarillo la expresión analítica (3.26). Las flechas verticales corresponden a $2\hbar/\tau_W$, donde comienza el régimen de decoherencia fuerte indicado por una línea de puntos negros. Las líneas discontinuas de color negro indican el comportamiento tipo ley de potencias a valores pequeños de γ_ϕ . Las simulaciones se realizaron en una cadena de longitud $N = 10^4$.

3.5.1. La cadena de Fibonacci.

El modelo de Fibonacci es un primo hermano del modelo HHAA, también es un modelo del tipo *tight-binding* a primeros vecinos, descrito por el Hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_n J(|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|) + \varepsilon_n |n\rangle\langle n|, \quad (3.24)$$

con la diferencia que las energías de sitio vienen dadas por $\varepsilon_n = W(\lfloor (n+1)q_g^2 \rfloor - \lfloor nq_g^2 \rfloor)$, siendo $\lfloor x \rfloor$ la parte entera de x y $q_g = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$ la razón áurea. En este potencial, ε_n corresponde al enésimo elemento de la “Palabra de Fibonacci”, que puede ser obtenida concatenando repetidamente las dos palabras anteriores de la secuencia: 0, 0W, 0W0, 0W00W, 0W00W0W0,

La dinámica en la cadena de Fibonacci ha sido estudiada en tanto coherentemente como en presencia de decoherencia [186–188]. En ausencia de decoherencia se sabe que el segundo momento crece, después de la dispersión cuadrática inicial, como una ley de potencias $\sigma_0^2(t) \propto t^\alpha$ con un exponente que depende de la amplitud del potencial en el sitio. Crece subdifusivamente ($\alpha < 1$) para $W > 3.15J$, difusivamente ($\alpha = 1$) para $W = 3.15J$ y superdifusivamente ($\alpha > 1$) para $W < 3.15J$, como puede ser observado en la Fig. 3.7a. Las flechas verticales en la Fig. 3.7a, representan τ_W , calculadas a partir de las ecuaciones Ec. (2.20) y (2.21) dando $1/\tau_W = q_g W/\hbar$. Después de este tiempo, la dinámica balística se transforma en una dinámica algebraica.

Este crecimiento del desparramo se puede escribir analíticamente, en forma approxima-

3.5. ¿CRITICIDAD O DIFUSIÓN?

da y simplificada, de la siguiente manera:

$$\sigma_0^2(t) = \begin{cases} v_0^2 t^2 & \text{si } t < \tau_W \\ 2At^\alpha & \text{si } t > \tau_W \end{cases} \text{ con } A = \frac{v_0^2 \tau_W^{2-\alpha}}{2}. \quad (3.25)$$

En particular, para $W = 3.15J$, cuando la dinámica posterior es difusiva, obtenemos $D_0 = \frac{v_0^2 \tau_W}{2}$. Esta predicción se muestra como una línea discontinua negra encima de la curva roja.

Una vez que se introduce decoherencia, la dinámica se vuelve difusiva para todos los valores de W . El coeficiente de difusión en función de la intensidad de la decoherencia se calculó numéricamente mediante una dinámica utilizando el Quantum-Drift para diferentes valores de W . Estos resultados se muestran como símbolos en la Fig. 3.7b.

A partir de la dinámica aproximada por la Ec. (3.25) y utilizando la Ec. (3.7) con un proceso de Poisson obtenemos una expresión analítica para el coeficiente de difusión en presencia de decoherencia:

$$D = \frac{v_0^2 \left(\tau_W^3 E_{-\alpha} \left(\frac{\tau_W}{\tau_\phi} \right) + \alpha \tau_\phi \tau_W^2 \Gamma(\alpha) \left(\tau_\phi^\alpha \tau_W^{-\alpha} - \left(\frac{\tau_W}{\tau_\phi} \right)^{-\alpha} \right) + 2\tau_\phi^3 - \tau_\phi e^{-\frac{\tau_W}{\tau_\phi}} (2\tau_\phi^2 + 2\tau_\phi \tau_W + \tau_W^2) \right)}{2\tau_\phi^2}, \quad (3.26)$$

donde $\Gamma(\alpha)$ es la función Gamma de Euler, y $E_{-\alpha} \left(\frac{\tau_W}{\tau_\phi} \right) = \int_1^\infty e^{-\frac{\tau_W}{\tau_\phi} t} t^\alpha dt$.

En la Fig. 3.7b se compara el coeficiente de difusión obtenido de la dinámica (símbolos) con la integración numérica de la Ec. (3.7) usando un proceso de Poisson (curvas negras) y la expresión analítica (Ec. (3.7), curvas amarillas). De la superposición de las curvas con los símbolos concluimos que el coeficiente de difusión depende únicamente de la dinámica coherente y de la intensidad (y forma) del ruido. Note que la integración numérica (curva negra) tiene una discrepancia con el coeficiente de difusión para valores de $W \lesssim 3.15J$ cuando $\gamma_\phi \approx J$. Esto se debe a que no existe un promedio sobre “fase” y, como el comportamiento de excitaciones en posiciones distintas a un tiempo del orden de uno sobre la amplitud del acoplamiento depende de las energías particulares de sus vecinos, se observa esta interferencia particular.

De las ecuaciones (3.26) y (3.7), es claro que la dependencia de $\sigma_0^2(t)$ determina el comportamiento de $D(\gamma_\phi)$. Particularmente, si $\sigma_0^2(t) \propto t^\alpha$ entonces $D(\gamma_\phi) \propto \gamma_\phi^{(1-\alpha)}$ para $\gamma_\phi \ll 2\hbar/\tau_W$. Este comportamiento es muestra en la Fig. 3.7b con líneas discontinuas negras superpuestas a los datos numéricos. Estos resultados son consistentes con hallazgos recientes reportados en Ref. [187].

3.5.2. Power-law banded random matrix (PBRM).

El modelo PBRM *power-law banded random matrix* describe cadenas *tight-binding* unidimensionales (1D) de longitud N con acoplos (*hoppings*) de largo alcance y energías de sitio aleatorias. Este modelo está representado por matrices simétricas y reales de tamaño $N \times N$, cuyos elementos son variables aleatorias estadísticamente independientes caracterizadas por una distribución normal con media cero y varianza dada por,

$$\langle |\mathcal{H}_{ii}|^2 \rangle = J^2 \text{ y } \langle |\mathcal{H}_{ij}|^2 \rangle = J^2 \frac{1}{2} \frac{1}{1 + (|i-j|/b)^{2\mu}} \text{ con } i \neq j. \quad (3.27)$$

El modelo PBRM, Ec. (3.27), depende de dos parámetros de control: μ y b representando el rango y longitud característica de los *hoppings* respectivamente, mientras que J es una escala de energía que puede considerarse 1 para todo fin práctico. Para $\mu > 1$ ($\mu < 1$) el modelo está en una fase aislante (metálica), es decir, sus autoestados son localizados (deslocalizados). La transición entre la fase localizada y extendida (MIT), ocurre independiente del valor de b para $\mu = 1$ (punto crítico), donde es sabido que las autofunciones son fractales.

Las propiedades estadísticas de las autofunciones y autovalores de este modelo han sido ampliamente estudiadas [161, 189–192]. Aquí estudiamos la dinámica de propagación de una excitación inicialmente localizada en el medio de la cadena en ausencia y presencia de un entorno decoherente.

Como en los sistemas anteriores, la propagación inicial de la excitación local es balística, donde el segundo momento viene dado por $\sigma_0^2 = v_0^2 t^2$. Generalizando la ecuación (2.18) para tener en cuenta la aleatoriedad del Hamiltoniano, encontramos que la velocidad v_0 es:

$$v_0^2 = 2 \sum_{n=1}^{N/2} \langle \mathcal{H}_{n,0}^2 \rangle n^2 = \sum_{n=1}^{N/2} \frac{J^2}{1 + (n/b)^{2\mu}} n^2, \quad (3.28)$$

donde hemos sumado los sitios a la derecha e izquierda (factor 2) del sitio inicial (denotado como 0). Esta velocidad inicial (Ec. (3.28)) diverge para $\mu < 3/2$ al incrementar N como $N^{3-2\mu}$. Para N grandes, $b \ll 1$ y $\mu < 3/2$, la suma se puede aproximar mediante una integral, lo que lleva a $v_0^2 \approx J^2 b^{2\mu} \frac{N^{3-2\mu}}{(3-2\mu)2^{3-2\mu}}$.

Este desparramo inicial balístico dura hasta $t = \tau_W$, el cual debe ser calculado numéricamente, ya que la ecuación (2.20) solo es válida para cadenas con *hopping* a primeros vecinos y un análisis similar con este modelo no produce una expresión simple. Sin embargo, en una primera aproximación, si usamos la ecuación (2.20), con energías de sitio no correlacionadas y distribuidas Gaussianas con $\langle |\mathcal{H}_{ii}|^2 \rangle = J^2$, obtenemos $\tau_W \sim 1$.

Para $t > \tau_W$, encontramos numéricamente que si $0.5 < \mu < 1.5$ el segundo momento de la excitación crece difusivamente (ver Fig. 3.8a para $\mu = 1$). Notar que el parámetro b modifica la velocidad inicial y el coeficiente de difusión. En consecuencia, elegir un pequeño b ($b = 0.01$, por ejemplo) permite reducir tanto la magnitud de la dispersión inicial como el coeficiente de difusión, generando una dinámica más lenta y teniendo una ventana más grande para la dinámica difusiva antes de que el sistema alcance la saturación (a N finito). En el régimen difusivo, encontramos $\sigma_0^2 \approx v_0^2 (\sqrt{2}\tau_W)t$. El factor $\sqrt{2}$ se introduce en función de los resultados numéricos para corregir la discrepancia en τ_W debido a los *hoppings* de largo alcance.

Es importante señalar que, aunque el sistema está localizado para $1.0 < \mu < 1.5$, sus autofunciones tienen colas que decrecen como una ley de potencias con exponente 2μ , por lo tanto, su segundo momento diverge $N \rightarrow \infty$. La presencia de estas colas gruesas permite un crecimiento ilimitado en el tiempo del segundo momento en el límite de $N \rightarrow \infty$. Para $\mu < 1.5$ el valor de saturación del segundo momento $\sigma_{0,SV}^2$ es $\sigma_{0,SV}^2 = \frac{N^2}{12} f(b, \mu)$, donde $f(b, \mu) \leq 1$. Por consiguiente, para $\mu < 1.5$ y asumiendo un crecimiento del segundo momento de la forma $\sigma_0^2(t > \tau_W) = v_0^2 \tau_W^2 + \sqrt{2}v_0^2 \tau_W(t - \tau_W)$, podemos calcular el tiempo necesario para alcanzar el valor de saturación t_s imponiendo $\sigma_{0,SV}^2 = \sigma_0^2(t_s)$ de donde se

3.5. ¿CRITICIDAD O DIFUSIÓN?

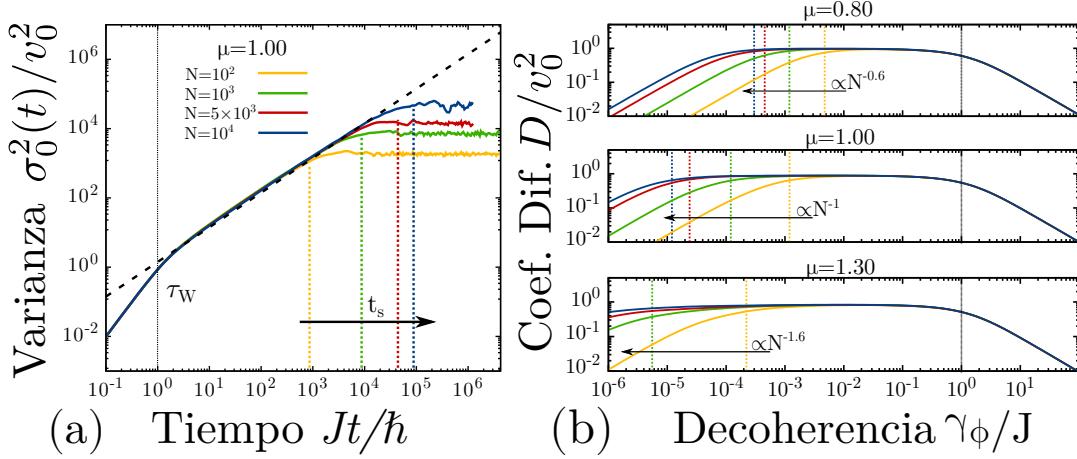


Figura 3.8: (a) Evolución temporal del ancho de una excitación inicialmente localizada en ausencia de decoherencia en el modelo PBRM para $\mu = 1$, $b = 0.01$ y $N = \{100, 1000, 5000, 10000\}$. Las líneas verticales denotan τ_W (negro) y t_s (color), mientras que la línea discontinua transversal representa la dispersión difusiva teórica $\sigma_0^2(t)/v_0^2 \approx \sqrt{2}t$. (b) De arriba a abajo, las figuras muestran el coeficiente de difusión obtenido mediante la Ec. (3.2) para $\mu = \{0.80, 1.00, 1.30\}$. La línea vertical discontinua de color negro marca la decoherencia característica donde la dinámica comienza a estar dominada por el ruido y la dinámica balística inicial (fuerte régimen de Zenón). Las líneas verticales discontinuas de colores muestran los valores de $\gamma_\phi = 2\hbar/t_s$ por debajo de los cuales el efecto de tamaño finito comienza a ser relevante; la dependencia con N de los valores se indica en cada gráfico.

obtiene:

$$t_s = \frac{\sigma_{0,SV}^2}{\sqrt{2}v_0^2\tau_W} + \tau_W \frac{(\sqrt{2} - 1)}{\sqrt{2}} \propto N^{2\mu-1}. \quad (3.29)$$

Nuestra estimación de t_s concuerda con el hallazgo numérico (ver Fig. 3.8a para $\mu = 1$). La ecuación (3.29) implica que a medida que N aumenta, para $\mu < 1/2$ el valor de saturación se alcanzará en tiempos más cortos y eventualmente la dinámica será siempre balística (t_s se vuelve más pequeña que τ_W). En el caso contrario, para $1/2 < \mu < 3/2$, t_s aumenta con N y tenemos un crecimiento difusivo hasta la saturación.

Como en los modelos anteriores, la presencia de difusión cuántica coherente (para $1/2 < \mu < 3/2$), genera un régimen difusivo casi independiente de la decoherencia. La Fig. 3.8b muestra el coeficiente de difusión como función de γ_ϕ para $\mu = \{0.80, 1.00, 1.30\}$ y diferentes valores de N obtenido mediante la Ec. (3.2) junto con los valores de $2\hbar/t_s$ y $2\hbar/\tau_W$, (líneas verticales). Se puede observar que para $2\hbar/t_s \lesssim \gamma_\phi \lesssim 2\hbar/\tau_W$, D es casi constante, ya que la mayoría de las “mediciones” generadas por el ambiente caen en el régimen difusivo (después de τ_W y antes del tiempo de saturación t_s). Cuando $\gamma_\phi \ll 2\hbar/t_s$ el ruido entra en la dinámica después de la saturación, generando efectos de tamaño finito. De la ecuación (3.29) podemos ver que para $1/2 < \mu < 3/2$, t_s aumenta con N , y los efectos de tamaños finitos comienzan en valores más pequeños de la decoherencia, ver Fig. 3.8b. Para $\gamma_\phi > 2\hbar/\tau_W$, la decoherencia afecta la dinámica principalmente durante la dispersión balística inicial, lo que lleva a una disminución del coeficiente de difusión proporcional a v_0^2 .

Para $\mu < 1/2$, la velocidad de la propagación inicial balística, ecuación (3.28), aumenta

con N más rápido que el valor de saturación correspondiente. Por lo tanto, t_s disminuye con N , volviéndose más pequeño que τ_W y no dejando lugar a una dinámica difusiva. Es decir, no se puede encontrar ninguna región independiente de la decoherencia para el coeficiente de difusión.

Para $\mu > 3/2$, t_s converge a un valor constante a medida que N aumenta. Por lo tanto, para $\gamma_\phi < 2\hbar/t_s$ el coeficiente de difusión dependerá linealmente de γ_ϕ y no podemos tener un régimen independiente de desfase. Esta situación es similar al caso localizado de Harper-Hofstadter-Aubry-André.

Al igual que en las cadenas de HHAA y Fibonacci, a pesar de las amplias diferencias entre los modelos, el mismo comportamiento es observado cuando se introduce decoherencia: El coeficiente de difusión está prácticamente determinado por la dinámica coherente, y si la misma es difusiva (aunque sea en una ventana temporal), D heredará de este la estabilidad frente a la decoherencia para un rango de valores de γ_ϕ .

La evolución cuántica de una excitación local comienza con una expansión cuadrática del segundo momento de la función de onda. Esto implica que el coeficiente de difusión en presencia de decoherencia, en el límite de decoherencia fuerte, decrecerá como $1/\gamma_\phi$. Por otro lado, si el comportamiento a tiempos largos es difusivo, la influencia de γ_ϕ de D será insignificante si la amplitud de decoherencia pequeña. La relación observada entre D y v_0 , τ_W , sugiere que para muchos sistemas la transición entre estas dos dinámicas será relativamente rápida, sin un régimen intermedio evidente. Esto nos lleva a plantear la hipótesis de que, después de reescalar las magnitudes características del problema, la relación entre D y γ_ϕ exhibirá un comportamiento universal cuando el sistema presente difusión coherente. Esta suposición será examinada en la sección 3.6.

3.5.3. Discusión: Caos, fractalidad y difusión.

Hasta este punto, queda claro que la difusión coherente contribuye a la estabilidad del coeficiente de difusión al incorporar la decoherencia. Este fenómeno se observa de manera consistente, independientemente de que el sistema esté en el estado crítico, es decir, pronto a tener una transición de fase. Ahora surge la pregunta sobre el origen de esta difusión coherente. En esta sección, se especula sobre la posible relación entre la difusión y el caos, y de estos con la fractalidad del espectro y de las autofunciones.

Una característica compartida por los tres modelos es la presencia de fractalidad tanto en el espectro como en las autofunciones. Para el modelo HHAA la fractalidad emerge solo en el punto crítico, en la cadena de Fibonacci, sin embargo, está presente para cualquier amplitud del potencial de sitio. En el modelo PBRM las autofunciones son fractales hasta una longitud característica que diverge (asimétricamente) en el punto crítico. Este sistema se puede considerar como multifractal débil o fuerte dependiendo de la longitud característica, específicamente, si $b \ll 1$ ó $b \gg 1$. Como hemos descrito en la sección anterior, solamente podemos observar un comportamiento difusivo para $b \ll 1$, es decir, en la región fuertemente multifractal.

La relación entre la fractalidad del espectro, la presencia de caos cuántico, y la forma de dinámica, si bien es discutida (aunque con bastante precaución) en la literatura, está lejos de ser un tópico cerrado. Heurísticamente, uno puede imaginar que una evolución desde un estado local va resolviendo el espectro hasta una escala $\delta\varepsilon \approx \hbar/t$. Por otro lado, el número de modos que contribuyen efectivamente a la dinámica podría identificarse con

3.6. ESTABILIDAD UNIVERSAL CONTRA LA DECOHERENCIA.

el número de sitios, que crece como $t^{\alpha/2}$ (raíz de la varianza). En consecuencia, tenemos una resolución $\delta\varepsilon \approx \hbar/t$ a partir de $\delta\varepsilon^{-\alpha/2}$ sitios, lo que sugiere un espectro fractal de una dimensión menor a $\alpha/2$ [146]. La relación entre autoestados fractales y el caos cuántico no es clara, en algunos sistemas de muchos cuerpos se ha observado un comportamiento multifractal en regiones de parámetros próximas a las asociadas al caos [193].

Por otro lado, conexión entre un comportamiento difusivo y el caos fue propuesta por Robert Laughlin. Las mismas colisiones que producen el camino libre medio, facilitando los procesos de relajación y determinan la resistividad de los metales y la ley de Ohm [26], son las que originan el exponente de Lyapunov. En este caso, es el caos cuántico quien proporciona un mecanismo posible para el movimiento aleatorio de los electrones. Es decir, la conductividad es una medida de la aleatoriedad del potencial, en este caso se vuelve una medida de la inestabilidad “caótica” del movimiento de los electrones. Los detalles de esta visión son corregidos por la teoría de localización débil de Abrahams et al. [36] que establecen los sutiles límites de esta visión. Es decir, la dinámica difusiva cuántica conserva la fase cuántica, lo que puede ser evidenciado en el efecto Aharonov-Bohm y la retrodispersión anómala [194, 195].

Durante el desarrollo de este trabajo, buscando modelos donde sea posible observar una dinámica difusiva, examinamos algunos modelos quasi-1D. Variando en nivel de desorden en cada sitio, la longitud en cada dimensión (número de sitios N y canales M), y el rango de las interacciones en la dimensión ortogonal a la principal, notamos que es posible generar una dinámica difusiva en una ventana temporal. Esto es una consecuencia directa de la separación entre la longitud de localización y el camino libre medio. Un análisis de las características espectrales de estos modelos podrían revelar alguna característica pseudo-fractal, añadiendo soporte a la discusión previa.

3.6. Estabilidad universal contra la decoherencia.

Como analizamos a continuación de la Ec. (3.7), si la dinámica coherente es difusiva en todo momento, entonces $D = D_0$ para todas las intensidades de decoherencia. Por otro lado, en el caso más realista, donde una dinámica balística inicial, $\sigma_0^2(t) = v_0^2 t^2$ para $t < \tau_W$, es seguida por una dispersión difusiva $\sigma_0^2(t) = 2D_0 t$, encontramos (Sección 3.3) que la Ec. (3.7) desprende:

$$D(x)/D_0 = [2/x - (1 + 2/x) e^{-x}], \quad (3.30)$$

donde $x = \tau_W/\tau_\phi$, que captura la dependencia de D con valores grandes y pequeños de τ_W/τ_ϕ . Para $\tau_W/\tau_\phi \ll 1$, el coeficiente de difusión $D \approx D_0(1 - \frac{1}{6}(\frac{\tau_W}{\tau_\phi})^2)$, mientras que para $\tau_W/\tau_\phi \gg 1$, ingresamos al régimen cuántico fuerte de Zenón y $D/D_0 \approx 2\tau_\phi/\tau_W$.

Como se puede ver, depende solo de un único parámetro, la relación entre el tiempo medio de dispersión elástica y el tiempo de decoherencia. Así, describe *universalmente* cualquier modelo cuántico 1D caracterizado por una dinámica difusiva coherente, independientemente de los detalles de su dinámica microscópica. Nuestros resultados analíticos han sido confirmados numéricamente en la Figura 3.9, donde se muestra el coeficiente de difusión normalizado D/D_0 para los modelos HHAA, Fibonacci y PBRM, enfocándose solo en el régimen de dinámica coherente de tipo difusivo, donde D_0 es bien definido. El

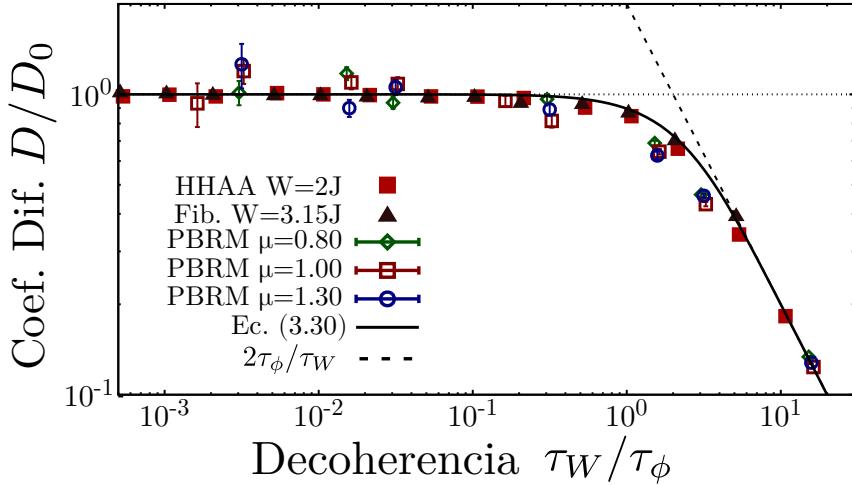


Figura 3.9: Coeficiente de difusión normalizado D/D_0 frente a intensidad de decoherencia renormalizada τ_W/τ_ϕ ($D_0 = D(\gamma_\phi = 0)$). Símbolos obtenidos de la dinámica QD: **i)** la cadena HHAA en el punto crítico (cuadrados rojos), **ii)** la cadena de Fibonacci (triángulos rojo oscuro) y **iii)** el modelo PBRM en el modo extendido fase (rombos huecos verdes), en el punto crítico (cuadrados huecos rojos) y en la fase localizada (círculos huecos azules). La curva sólida es la ecuación universal (3.30) mientras que la línea negra discontinua es el límite de $\tau_W/\tau_\phi > 2$. La línea de puntos horizontal es $D = D_0$. Para las cadenas HHAA y Fibonacci, τ_W y D_0 se calcularon analíticamente, Ec. (2.21). Para el modelo PBRM $b = 0.01$ y D_0 resultan de un τ_W ajustado.

comportamiento universal predicho por la Ec. (3.30) concuerda excelentemente con los resultados numéricos de todos los modelos.

El hecho de que una dinámica cuántica difusiva coherente sea extremadamente robusta al ruido ambiental contrasta notablemente con lo que uno esperaría considerando la dispersión (con una escala de tiempo τ_W) y el ruido ambiental (con una escala de tiempo τ_ϕ) como dos procesos de Poisson independientes. En este caso, los dos procesos pueden considerarse como un único proceso de Poisson con una escala de tiempo $1/\tau = 1/\tau_W + 1/\tau_\phi$. Así, para valores pequeños de $\tau_W/\tau_\phi \ll 1$, tenemos $D \approx D_0(1 - \tau_W/\tau_\phi)$, en contraste con la corrección cuadrática presente en la Ec. (3.30). Nuestros hallazgos también contrastan con los resultados estándar en sistemas clásicos, donde el coeficiente de difusión para la dinámica en presencia de ruido externo es la suma de los coeficientes de difusión dados por los dos procesos [196].

3.7. Loschmidt echo (pureza).

La robustez de la dinámica difusiva ante decoherencia lleva a preguntarse cómo podría diferenciarse una difusión coherente de una inducida por algún proceso, quizás oculto, decoherente. La respuesta aparece naturalmente al estudiar cómo la decoherencia afecta la reversibilidad. Una dinámica difusiva coherente puede revertirse cambiando el signo del Hamiltoniano. Sin embargo, la presencia de un ambiente destruye (valga la redundancia) la coherencia que permite una reversibilidad perfecta. Esto se puede estudiar experimentalmente mediante el decaimiento de la pureza o eco de Loschmidt [67, 71]. La pureza,

3.7. LOSCHMIDT ECHO (PUREZA).

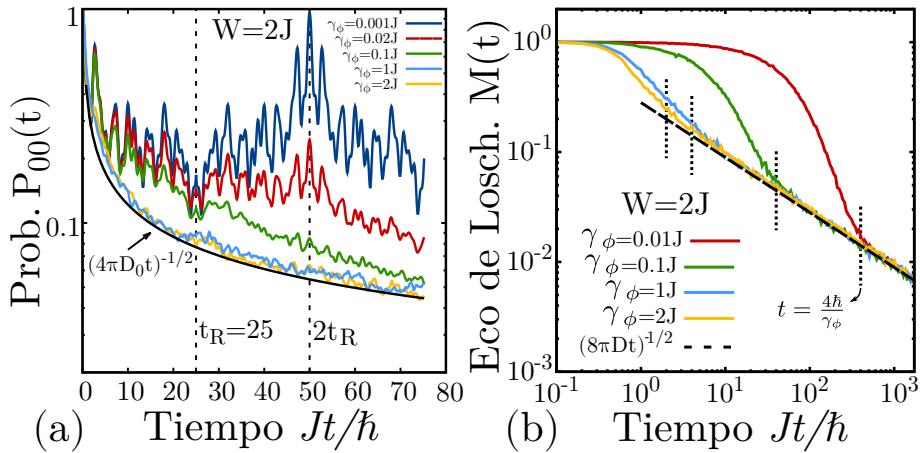


Figura 3.10: (a) Probabilidad de encontrar la excitación en el sitio inicial $P_{00}(t)$ para una cadena HHAA para un sistema que evoluciona con \mathcal{L} hasta $\tau_R = 25$ (primera línea discontinua vertical) cuando el signo del Hamiltoniano se invierte (es decir, continúa evolucionando con \mathcal{L}^\dagger). El eco de Loschmidt ocurre en $P_{00}(t = 2\tau_R) \equiv M(t = \tau_R)$ (segunda línea discontinua vertical) y su magnitud corresponde a la pureza. Los diferentes colores distinguen la tasa de la decoherencia. Para los valores de decoherencia mayores, el eco no es evidente y $P_{00}(t)$ se acerca a una dinámica difusiva (curva negra). (b) Decaimiento del eco de Loschmidt $M(t)$ para diferentes γ_ϕ en el punto crítico calculado con el QD. La línea discontinua es una predicción basada en el coeficiente de difusión coherente resultante de la dinámica Hamiltoniana. Las líneas de puntos verticales muestran $t = \frac{4\hbar}{\gamma_\phi}$. Todos los datos con $q = (\sqrt{5} - 1)/2$, $J = 1$, $\hbar = 1$, $W = 2J$ y $N = 1000$.

$M(t) = \text{Tr}\{\hat{\rho}(t)^2\}$, se ha utilizado ampliamente para medir cómo afecta la decoherencia a un sistema, ya que $M(t) \equiv 1$ para un estado puro, mientras que $M(t) < 1$ para un estado mixto. El eco de Loschmidt (LE), en presencia de un ambiente, resulta de revertir la parte Hamiltoniana de una dinámica en un tiempo t_R mediante el cambio en el signo general del Hamiltoniano mientras el ruido ambiental se mantiene activo. La probabilidad de retorno al estado inicial $P_{00}(t)$ tiende a mostrar un resurgimiento en $2t_R$. Si bien el eco de Loschmidt abarca un gran número efectos, siempre involucrando una reversión temporal, para este sistema resulta ser equivalente a la pureza.

Matemáticamente, esto puede ser mostrado a partir del superoperador \mathcal{L} ,

$$\mathcal{L}[\hat{\rho}] = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{\mathcal{H}}] + \mathcal{L}_\phi[\hat{\rho}] = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_\phi, \quad (3.31)$$

donde $\hat{\mathcal{H}}$ es el Hamiltoniano y \mathcal{L}_ϕ el operador de decoherencia de HS. Podemos ver que $\mathcal{L}^\dagger = \mathcal{L}_0^\dagger + \mathcal{L}_\phi^\dagger = -\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_\phi$, y dado que la matriz de densidad es un operador Hermítico, tenemos, $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}^\dagger(t) \implies e^{\mathcal{L}t}\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_0e^{\mathcal{L}^\dagger t}$. Usando estas propiedades reescribimos la definición de pureza de la siguiente forma,

$$M(t) = \text{Tr}\{\hat{\rho}(t)\hat{\rho}(t)\} = \text{Tr}\{e^{\mathcal{L}t}\hat{\rho}_0e^{\mathcal{L}t}\hat{\rho}_0\} \quad (3.32)$$

$$= \text{Tr}\{\hat{\rho}_0e^{\mathcal{L}^\dagger t}e^{\mathcal{L}t}\hat{\rho}_0\} \equiv \text{Tr}\{\hat{\rho}_0\hat{\rho}_{LE}(2t)\}, \quad (3.33)$$

donde queda claro que la pureza es una comparación entre la matriz de densidad inicial y la matriz de densidad $\hat{\rho}_{LE}(2t)$ que es el resultado de dos evoluciones. En detalle, hay una

evolución inicial hacia adelante $\hat{\rho}(t) = e^{(\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_\phi)t} \hat{\rho}_0$ y una segunda evolución con el signo del Hamiltoniano invertido (evolución hacia atrás) $\hat{\rho}_{LE}(2t) = e^{(-\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_\phi)t} \hat{\rho}(t)$, es decir, la pureza corresponde al eco observado en $\hat{\rho}_0$ después de revertir el tiempo. Si el estado inicial es un estado puro $\hat{\rho}_0 = |0\rangle\langle 0|$, podemos obtener directamente la pureza numéricamente mediante una simulación estocástica de la evolución hacia adelante y hacia atrás, observando la probabilidad de regresar al estado inicial (en nuestro caso, el sitio inicial), lo que permite un cálculo eficiente utilizando el método Quantum-Drift.

3.7.1. Ecos en la cadena de HHAA.

La Figura 3.10a muestra la probabilidad de encontrar la excitación en el sitio inicial $P_{00}(t)$ en función del tiempo total de la evolución para diferentes valores de γ_ϕ , la excitación evoluciona con \mathcal{L} , ver Ec. (3.1), hasta τ_R (primera línea discontinua vertical) cuando se invierte el signo del Hamiltoniano (es decir, para $t > \tau_R$ continúa evolucionando con \mathcal{L}^\dagger). El eco de Loschmidt ocurre en $P_{00}(t = 2\tau_R) \equiv M(t = \tau_R)$ (segunda línea discontinua vertical). Sin embargo, en caso de una decoherencia cuyo tiempo característico es mucho menor que τ_R , el eco se pasa por alto entre las fluctuaciones estadísticas. En este caso, el valor en $t = 2\tau_R$ está determinado principalmente por una “dinámica hacia delante” $P_{00}(t) \sim 1/\sqrt{4\pi D t}$. Esto significa que la memoria del estado inicial se ha perdido casi por completo. Así, la matriz de densidad tiende a la superposición incoherente de todos los estados posibles. En este sentido, para $t > 4\hbar/\gamma_\phi$ la difusión observada en el MIT se diferencia de la difusión cuántica coherente en el hecho de que la dinámica ya no es reversible.

Fig. 3.10b muestra LE/Pureza $M(t)$ en función del tiempo. Para $t \gtrsim 4\hbar/\gamma_\phi$ la caída exponencial inicial LE/Pureza, caracterizada por la tasa de decoherencia $2\gamma_\phi$, se convierte en una ley de potencia determinada solo por el coeficiente de difusión: $M(t) \sim 1/\sqrt{8\pi D t}$. Este régimen es consecuencia de la imposibilidad de revertir la propagación de la excitación más allá de una escala de tiempo $2\hbar/\gamma_\phi$. Por lo tanto, la caída de LE solo detecta la dinámica de expansión, que para $W = 2J$, es difusiva y por ende robusta contra la decoherencia. Para magnitudes de decoherencia mucho más fuertes ($\gamma_\phi \gg \gamma_\phi^c$) D está en el régimen de Zenón cuántico, generando un decaimiento lento en la pureza según $D \propto 1/\gamma_\phi$.

Un comportamiento similar se encuentra para los regímenes extendido y localizado (Figuras 3.11), donde pasado el decaimiento exponencial inicial, el LE decae con una ley de potencias dependiente solo de $D(\gamma_\phi, W)$. De los resultados de las secciones anteriores (para $\gamma_\phi < \gamma_\phi^c$) inferimos que la tasa de decaimiento de la pureza en este régimen de ley de potencia disminuye con γ_ϕ en el régimen extendido, aumenta en el régimen localizado, y permanece constante en el punto crítico. Esto puede interpretarse considerando que los estados localizados están más protegidos de la decoherencia, ya que la decoherencia afecta a menos sitios. En este caso, a medida que aumentamos la fuerza de la decoherencia, la caída de la pureza es más fuerte tanto en el régimen de tiempo corto como en el de largo tiempo como consecuencia de la deslocalización de la función de onda. En segundo lugar, en el régimen extendido, mientras que una decoherencia más fuerte causa una caída más rápida de la pureza en tiempos cortos, en tiempos largos, donde la dinámica directa determina la tasa de caída, se vuelve más lenta para una decoherencia más fuerte. Este resultado contraintuitivo se entiende como consecuencia del crecimiento balístico del paquete de ondas, que con el tiempo lo hace más sensible a las fluctuaciones.

3.7. LOSCHMIDT ECHO (PUREZA).

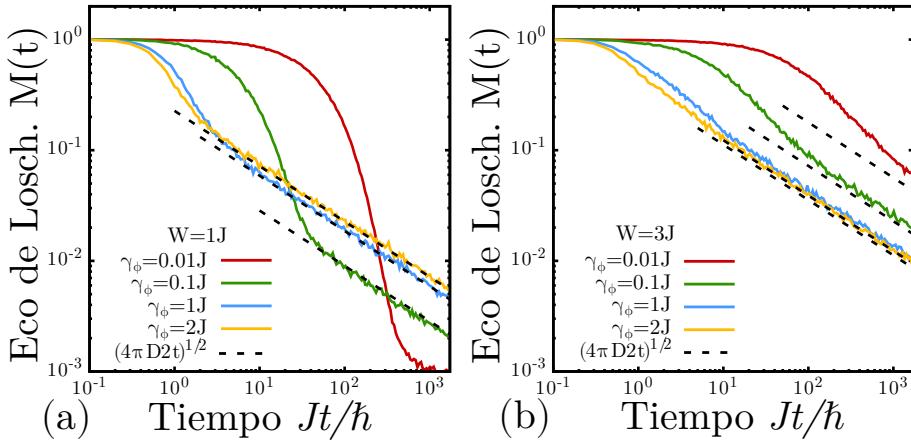


Figura 3.11: Evolución temporal de la pureza (eco de Loschmidt) $M(t)$ con diferentes valores de decoherencia en una cadena HHAA con $N = 1000$. (a) $W = J$, fase extendida. (b) $W = 3J$, fase localizada. Las curvas coloreadas (en tonos grises) representan diferentes γ_ϕ . Las líneas discontinuas de color negro son predicciones teóricas ($M(t) \propto \frac{1}{\sqrt{Dt}}$) donde D se obtuvo de la ecuación (3.2).

La estabilidad del LE en para $W = 2J$ también es reflejada al analizar el valor del eco a tiempos fijos variando γ_ϕ (Fig. 3.12a) o el ancho del paquete luego de invertir el signo del Hamiltoniano. En el primer caso, la información obtenida es idéntica a la dada por la Fig. 3.10b, solo simplificando la visualización de las escalas de tiempo. Al estudiar la evolución de la varianza, vemos que luego del cambio en el signo Hamiltoniano la función de onda comienza a contraerse, sin embargo, esta reducción dura hasta el tiempo de eco ($2\tau_R$) solo si $\tau_\phi > 2\tau_R$. Si $\tau_\phi < 2\tau_R$, el paquete comienza a expandirse nuevamente. Esto se muestra en la Fig. 3.12b, donde el tiempo en el que el segundo momento alcanza su mínimo (contado a partir del tiempo de reversión τ_R), se representa como una función de τ_ϕ . Cuando $\tau_\phi < 2\tau_R$, el ancho del paquete de ondas alcanza su mínimo en aproximadamente $t \approx \tau_\phi/2$ y comienza a ampliarse nuevamente. Es interesante notar que para $2\hbar/\tau_R < \gamma_\phi < 4\hbar/\tau_R$, la función de onda comienza a expandirse nuevamente, aunque de todos modos observamos un eco en la polarización.

En síntesis, observamos que la dependencia del coeficiente de difusión con la amplitud de decoherencia es heredada por la dinámica de pureza (LE), ya que a tiempos largos decae con una ley de potencia que depende únicamente de D . Como consecuencia, el decaimiento de la pureza en el punto crítico entra en un régimen independiente de decoherencia. Sin embargo, este régimen difiere sustancialmente del decaimiento independiente de la perturbación inducida por el caos propuesto por Jalabert & Pastawski [67], como podríamos haber insinuado en la Ref. [99]. De hecho, en nuestro caso, la longitud de correlación de las fluctuaciones del ruido es menor que el camino libre medio, lo que no satisface las condiciones necesarias para una caída del LE independiente de las perturbaciones. Para nuestro ruido local, las colisiones con el ambiente generan una pérdida de memoria en la función de onda, siendo el mismo tipo de irreversibilidad que la generada por un voltímetro de Büttiker. En ese sentido, la caída de LE/pureza independiente del entorno no debe interpretarse en el contexto de decoherencia independiente de la perturbación, sino más bien como una fuerte irreversibilidad.

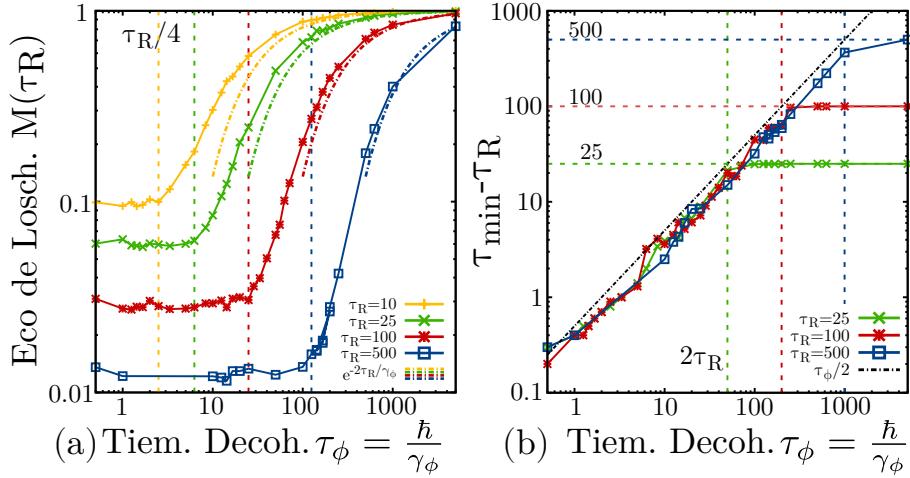


Figura 3.12: (a) Pureza (eco de Loschmidt) en un tiempo fijo $\tau_R = \{10, 25, 100, 500\}$ en función del tiempo de desfase $\tau_\phi = \hbar/\gamma_\phi$ en la cadena HHAA con $W = 2J$. Las líneas discontinuas verticales de color (en tonos grises) marcan $\tau_R/4$, mientras que las líneas de puntos y guiones coloreadas (en tonos grises) muestran el comportamiento analítico de $\tau_\phi \ll \tau_R$. (b) Tiempo en el que la varianza del paquete de ondas alcanza su mínimo después de una inversión del Hamiltoniano en τ_R en una cadena HHAA con $W = 2J$. Las líneas discontinuas de color vertical (en tonos grises) representan $2\tau_R$ mientras que las horizontales representan τ_R .

3.7.2. Paquetes como condición inicial.

En esta sección veremos los efectos en el decaimiento de la pureza (LE) cuando el estado inicial no es un estado local. En particular, consideramos un paquete Gaussiano en el centro de la cadena: $|\psi_{\sigma_x}\rangle = \frac{1}{N} \sum_i a_i |i\rangle = \frac{1}{N} \sum_i e^{-(i-N/2)^2/(2\sigma_x^2)} |i\rangle$, siendo N^2 la constante de normalización. Escrito como una matriz densidad, este estado corresponde a $\hat{\rho}_{\sigma_x}(0) = \sum_{i,j} a_i a_j^* |i\rangle \langle j| \rightarrow |\hat{\rho}_{\sigma_x}\rangle = \sum_{i,j} a_i a_j^* (|i\rangle \otimes |j\rangle)$. En este caso, el decaimiento de la pureza no comienza con una pendiente nula, ya que existen, inicialmente, coherencias entre distintos sitios, las cuales empiezan a ser atenuadas por el término de HS.

Para ver esto, basta con una simple expansión perturbativa para tiempos pequeños:

$$M(t) = \langle \hat{\rho}(0) | e^{t(-\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_\phi)} e^{t(\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_\phi)} | \hat{\rho}(0) \rangle \quad (3.34)$$

$$\approx \langle \hat{\rho}(0) | (\mathcal{I} + 2t\mathcal{L}_\phi + t^2(\mathcal{L}_\phi^2 + [\mathcal{L}_\phi, \mathcal{L}_0])) | \hat{\rho}(0) \rangle. \quad (3.35)$$

Analizando el término lineal de la expansión, $\langle \hat{\rho}_{\sigma_x} | 2t\mathcal{L}_\phi | \hat{\rho}_{\sigma_x} \rangle = -2\gamma_\phi \sum_{i \neq j} |a_i|^2 |a_j|^2 = -2\gamma_\phi (1 - \sum_i |a_i|^4) t$, observamos que cuando el IPR de la condición inicial es 1 (estado totalmente localizado) el decaimiento de la pureza comienza con pendiente nula. Por el contrario, mientras más desparramado está el estado inicial en la cadena (menor IPR), mayor será la pendiente del decaimiento inicial. Siendo el caso límite $2\gamma_\phi$ para una cadena infinita y un estado inicial totalmente extendido. En situaciones intermedias podemos aproximar $\sum_i |a_i|^4 \approx \frac{\sigma_x}{\sqrt{2\pi}}$. Este decaimiento inicial es parte de un decaimiento exponencial de la pureza hasta que las coherencias del estado inicial desaparecen y la pureza se vuelve $\sum_i |a_i|^4$, es decir, el estado se transforma en una superposición totalmente incoherente de excitaciones locales con probabilidades determinadas por el estado inicial. Intrigantemente, en este punto la pureza permanece en un *plateau* hasta que, eventualmente, comienza

3.8. CONCLUSIONES.

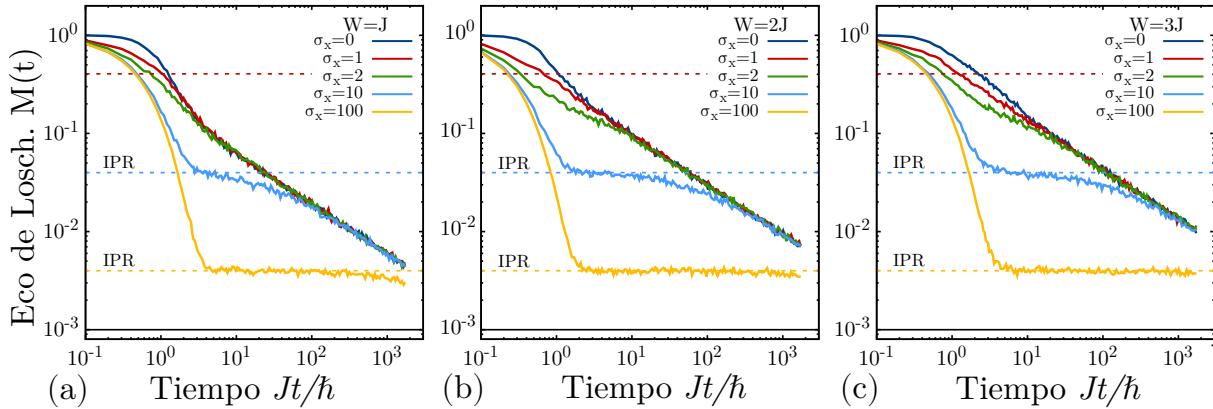


Figura 3.13: Evolución temporal del eco de Loschmidt (pureza) $M(t)$ para una cadena HHAA con $N = 1000$ y una magnitud de decoherencia $\gamma_\phi = J$. Cada panel corresponde a una fase distinta (a) $W = J$, (b) $W = 2J$, (c) $W = 3J$. El estado inicial viene dado por una Gaussiana en la base de sitios $|\psi_{\sigma_x}\rangle$. Los colores de las curvas representan diferentes varianzas σ_x , donde $\sigma_x = 0$ representa una excitación local. Las líneas horizontales a trazos muestran el IPR del estado inicial para algunos valores de σ_x . La línea negra horizontal representa el valor mínimo de la pureza observable para el tamaño del sistema utilizado.

a decaer con ley de potencias. En este punto, el decaimiento de la pureza tiene el mismo comportamiento tanto para un paquete inicial como para una condición inicial local. Es decir, los efectos causados por el estado inicial particular se pierden y el LE decae la misma manera que una excitación local (como una dinámica *forward*). Este comportamiento se muestra en la Fig. 3.13 para los tres regímenes de la cadena HHAA, una decoherencia de magnitud $\gamma_\phi = J$, y estados iniciales Gaussianos de diferente σ_x .

Cuál es origen y la interpretación del *plateau* observado sigue siendo una pregunta abierta. Inicialmente, especulamos sobre un régimen donde la dinámica Hamiltoniana crea coherencias al mismo tiempo que el término de HS las destruye. Sin embargo, esta visión sería inconsistente con el hecho de que una dinámica Hamiltoniana conserva la pureza. Otra posibilidad es que corresponda a un régimen del tipo Zenón cuántico donde el propio ambiente no permite la creación de coherencia y por consiguiente su posterior destrucción. Un análisis más profundo de este régimen es necesario, ya en muchos sistemas la excitación inicial corresponde a una superposición coherente de varios estados.

3.8. Conclusiones.

Al estudiar el transporte cuántico en tres modelos 1D paradigmáticos, todos ellos capaces de soportar un régimen de difusión cuántica, encontramos una sorprendente estabilidad del transporte hacia procesos locales decoherentes que también se muestra en el decaimiento del eco de pureza/Loschmidt. Esta estabilidad se origina en la naturaleza difusiva de la dinámica cuántica coherente y se manifiesta en el hecho de que el coeficiente de difusión es en gran medida independiente de la magnitud de decoherencia (es decir, aproximadamente igual al coeficiente de difusión en ausencia de decoherencia) siempre que el tiempo de decoherencia sea más largo que el tiempo medio de dispersión elástica. Además, mediante un modelo de colapso cuántico para el ambiente desarrollamos una

manera de calcular el coeficiente de difusión a partir de la dinámica coherente. Para el régimen de difusión coherente, derivamos analíticamente una ley universal en la que el coeficiente de difusión depende de un único parámetro: la relación entre estos tiempos característicos. Destacamos que esta estabilidad no se presenta cuando una muestra está en un régimen balístico o localizado, donde el coeficiente de difusión es altamente sensible a la decoherencia.

Estos resultados pueden ser válidos en muchas situaciones realistas, incluso más allá de los sistemas 1D. En muchos sistemas quasi-1D, como ocurre en el modelo PBRM, el camino libre medio elástico puede llegar a ser mucho mayor que la longitud de localización [148] y, por lo tanto, el régimen similar a la difusión ocurriría en un amplio rango de parámetros. Por lo tanto, incluso cuando la difusión coherente solo se produce dentro de una escala de longitud (y tiempo) limitada, podría ser suficiente para garantizar un transporte eficiente y estable bajo ruido ambiental.

Particularmente, nuestros resultados podrían probarse experimentalmente en átomos fríos de Yb en una red óptica 1D donde el modelo HHAA ya está implementado [123, 197]. La decoherencia local podría ser impuesta por fluctuaciones de ruido blanco dependientes del tiempo que explotan patrones de interferencia no correlacionados en el tiempo y el espacio. Otra situación que se ajusta a la condición anterior es la propagación de excitaciones de espín nuclear en cristales quasi 1D [198]. Allí, las interacciones dipolares naturales son de largo alcance y el desorden se pueden activar y desactivar mediante pulsos de radiofrecuencia apropiados, lo que permite un cambio entre regímenes balísticos y de difusión cuántica. En particular, los términos de muchos cuerpos se manifiestan como una escala de tiempo de decoherencia [126, 199]. Otros experimentos podrían probar la estabilidad de la difusión del espín hacia la decoherencia. Además, algunos compuestos poliméricos conductores reales, dispuestos en haces con canales activos degenerados, pueden estar en el régimen de estabilidad que se analiza aquí [200–204].

Nuestras predicciones también pueden inspirar estudios de sistemas biológicos quasi-1D donde un transporte de carga o excitones robusto es funcionalmente relevante. Entre ellas se encuentran la transferencia de energía y la autorreparación de las estructuras helicoidales del ADN [205, 206]. Allí, uno podría insinuar un papel crucial en la propagación de las excitaciones [207] en el desconcertante mecanismo a través del cual el ADN transmite señales alóstéricas a largas distancias [208]. En los sistemas fotosintéticos es esencial un transporte eficiente de energía desde el complejo de antenas al centro de reacción, seguido de una transferencia de electrones independiente de la temperatura desde una clorofila a una quinona distante. Esto suscitó la pregunta de si la transferencia de electrones ocurre como un proceso coherente a través de bandas de conducción, o a través de múltiples saltos de túneles decoherentes entre estados localizados [209, 210]. La difusión decoherente descrita en este capítulo es un mecanismo alternativo que merece más estudio. En el propio complejo de antenas, hay una convergencia de escalas de energía (es decir, los acoplamientos, el desorden y las fluctuaciones térmicas son aproximadamente del mismo orden), que podría garantizar el régimen universalmente robusto que analizamos. Además, el análisis de las estadísticas espectrales de varias moléculas biológicamente relevantes sugiere que normalmente se encuentran en el límite entre un régimen balístico y uno localizado [149]. De hecho, algunas proteínas, microtúbulos y ARN [155, 158, 211, 212], muestran un transporte sorprendentemente robusto contra la decoherencia inducida por la temperatura [213, 214].

3.8. CONCLUSIONES.

En resumen, damos una nueva perspectiva a la hipótesis, promovida para los sistemas biológicos [97, 99], de que estar al borde del caos es favorable al transporte de carga o excitónico. De hecho, el caos puede conducir a la difusión [26] y, por tanto, a una dinámica cuántica extremadamente robusta con respecto al ruido ambiental. En perspectiva, sería interesante analizar la presencia de difusión cuántica intrínseca en sistemas biológicos realistas para establecer la relevancia funcional de nuestros hallazgos. Conjeturamos que la difusión cuántica es una característica relevante del *reino equilibrado* de la Naturaleza.

Las contribuciones originales de este capítulo fueron publicadas en:

- Lozano-Negro, F. S., Navarro, E. A., Chávez, N. C., Mattiotti, F., Borgonovi, F., Pastawski, H. M., & Celardo, G. L. (2023). *Universal stability towards decoherence in quantum diffusive 1D chains*. Physical Review A 109 (4), 042213

Capítulo 4

Dinámica y OTOCs en sistemas de espines interactuantes.

En este capítulo extendemos la secuencia GEA presentada en el Capítulo 2 a sistemas de muchos cuerpos, particularmente sistemas de espines interactuantes. Se estudia cómo la misma puede ser utilizada para evaluar el nivel de localización en la dinámica. Utilizado un aproximante de la ZOGE, debido a su implementación más eficiente, se estudia el nivel de localización cuando interacciones many-body son incluidas en el Hamiltoniano de Harper-Hofstadter-Andrè-Aubry.

En la última década, se han hecho muchos esfuerzos para estudiar los efectos de las excitaciones cuánticas de muchos cuerpos en redes con miras a comprender y controlar su dinámica en sistemas cuánticos aislados [28]. En particular, si bien el desorden puede producir la ausencia de difusión de excitaciones, *i.e.* localización de Anderson [33, 35], las interacciones débiles entre muchos cuerpos generalmente tienden a favorecer su propagación. Por lo tanto, estas interacciones deberían contribuir al equilibrio y la termalización. Sin embargo, interacciones más fuertes conducirían a la localización de muchos cuerpos (MBL) [40, 41]. En una situación límite clara, los Fermiones que interactúan fuertemente en una red producen un aislante de Mott [162]. En estas fases localizadas, la ergodicidad se rompe y los observables locales no se relajan a los valores térmicos [43]. Por lo tanto, se ha invocado a la MBL como un mecanismo que podría evitar el desplazamiento de una excitación [20, 22, 40, 44].

La caracterización experimental y numérica de la transición MBL en 3D ha sido extremadamente difícil de lograr. Un atajo natural es utilizar sistemas 1D cuyo potencial externo es incommensurado con la red subyacente, donde ya existe evidencia numérica y teórica de que esta transición sobrevive a la presencia de interacciones [44]. Se realizaron experimentos particularmente importantes en arreglos de átomos ultrafríos donde se implementaron potenciales periódicos incommensurados con la red [48, 120]. Dichos sistemas se caracterizaron, experimental y teóricamente, calculando la entropía de entrelazamiento [48, 125], los desequilibrios de probabilidad [48, 125] y la dinámica de estados perturbados [118, 144, 145]. Más recientemente, el desorden aleatorio natural en ciertos sistemas de espín 1D se estudió mediante RMN [215]. En este caso, se pueden utilizar implementaciones de las técnicas de Eco de Loschmidt (LE) que implican la medición de

diferentes observables luego de aplicar una perturbación al sistema e invertir temporalmente su dinámica [216]. En la ref. [215] se utilizó una combinación de procedimientos LE en cadenas de espín desordenadas para evaluar diferentes Funciones de Correlación sin orden temporal (OTOC). A partir de estos, estudiaron el desparramo de excitaciones colectivas de espín bajo diferentes Hamiltonianos y obtuvieron una estimación de la entropía de entrelazamiento, que a su vez proporciona una evaluación de la transición de fase MBL.

Dado que la RMN puede medir funciones de correlación local luego de una inversión temporal [100,217], deberíamos poder desarrollar una nueva estrategia experimental para monitorear excitaciones locales a medida que se propagan en una cadena de espín. Esto podría convertirse en una herramienta única para caracterizar la transición MBL en un sistema 1D. La idea es generalizar la secuencia GEA, discutida en el Capítulo 2, a sistemas de espines, etiquetando el grado de desparramo después de que la excitación, en este caso una magnetización, haya evolucionado bajo una dinámica Hamiltoniana. Este etiquetado se logra mediante un pulso de gradiente de campo Zeeman, que da una fase diferente a cada componente local de la polarización. Por tanto, la efectividad de la inversión temporal que sigue a esta perturbación depende de cada una de estas fases locales. Este concepto tiene una analogía con la secuencia utilizada para obtener las Coherencias Cuánticas Múltiples (MQC) [82,143,218] de RMN, donde la fase Zeeman etiqueta el componente de la excitación a lo largo de cada uno de los subespacios de proyección total de espín. Al igual que en un experimento MQC, se puede medir un conjunto de OTOCs aplicando diferentes gradientes de campo antes de la inversión del tiempo. Es posible aplicar la transformada de Fourier sobre esta familia de LE en función de la perturbación, siendo su modo de Fourier fundamental es nuestra magnitud objetivo: el *entrelazamiento de gradiente de orden cero* (ZOGE). En ausencia de interacciones hemos visto que el ZOGE coincide con el *inverso de la razón de participación* de la excitación evolucionada. En presencia de interacciones, el ZOGE aproxima a la suma de los cuadrados de las componentes locales de la magnetización.

En este capítulo, desarrollamos la base conceptual del procedimiento ZOGE y lo probamos numéricamente mediante el estudio de la dinámica de excitación en una cadena de espín con un “desorden” dado por un potencial de Harper-Hofstadter-Aubry-André (HHAA). La dinámica de espín es inducida por el Hamiltoniano XY, cuyos procesos de flip-flop son equivalentes a un hopping para sistemas de un cuerpo. Este Hamiltoniano ha sido utilizado para revelar la naturaleza cuántica de la dinámica de excitación en experimentos de RMN [128,129]. En consecuencia, la evolución de una excitación de polarización a partir de este Hamiltoniano, posee una correspondencia uno a uno con los resultados obtenidos en el Capítulo 2. Sobre esta dinámica incluiremos interacciones de muchos cuerpos considerando los Hamiltonianos XXZ, es decir, las interacciones anisotrópicas espín-espín, rompiendo la correspondencia anterior y generando una dinámica completamente *many-body* (MB). Estudiaremos la diferencias que surgen al introducir interacciones MB en la secuencia diseñada y caracterizaremos la dinámica al incluir estas interacciones en los tres regímenes (extendido, crítico y localizado) existentes en el Hamiltoniano HHAA.

4.1. Un sistema modelo.

El modelo específico evaluado en este capítulo consiste en una cadena de N espines $1/2$ a una distancia a . Las interacciones están determinadas por el Hamiltoniano de espín,

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{xy} + \hat{\mathcal{H}}_W + \hat{\mathcal{H}}_I, \quad (4.1)$$

donde:

$$\hat{\mathcal{H}}_{xy} = J \sum_{n=1}^{N-1} (\hat{S}_n^x \hat{S}_{n+1}^x + \hat{S}_n^y \hat{S}_{n+1}^y) = \frac{J}{2} \sum_{n=1}^{N-1} (\hat{S}_n^+ \hat{S}_{n+1}^- + \hat{S}_n^- \hat{S}_{n+1}^+), \quad (4.2)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_W = W \sum_{n=1}^N \cos(2\pi qna + \phi) \hat{S}_n^z, \quad (4.3)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_I = U \sum_{n=1}^{N-1} \hat{S}_n^z \hat{S}_{n+1}^z = U \sum_{n=1}^{N-1} (\hat{S}_n^+ \hat{S}_n^- \hat{S}_{n+1}^+ \hat{S}_{n+1}^- - \frac{\hat{S}_n^z + \hat{S}_{n+1}^z}{2} + \frac{1}{4}). \quad (4.4)$$

El Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{xy}$ contiene solo interacciones xy (o *in-plane*) entre los espines, lo cual produce procesos de flip-flop (inversión de dos espines contiguos), y por consiguiente es responsable de mover las excitaciones a lo largo de la cadena. Para entender mejor el modelo es útil realizar una transformación a una representación Fermiónica utilizando la prescripción de Jordan y Wigner [219]. En resumen, $\hat{\mathcal{H}}_{xy} + \hat{\mathcal{H}}_W$ solo involucra amplitudes de salto entre diferentes sitios de la red (*single electron hopping amplitudes*) y energías de sitio para una densidad local de Fermiones. En ambos casos, el Hamiltoniano es solo un producto entre un operador de creación y destrucción, directamente mapeable al Hamiltoniano de una partícula (Ec. (2.2)). Consecuentemente, en ausencia de $\hat{\mathcal{H}}_I$, nuestra cadena de espines es totalmente análoga al sistema HHAA discutido en los Capítulos 2 y 3. La única salvedad necesaria es que esta equivalencia introduce un factor $1/2$ en la magnitud del *hopping*, por lo tanto, el valor crítico de la magnitud del potencial que induce la transición de fases entre estados localizados y extendidos será $W_c = J$.

El Hamiltoniano de Ising $\hat{\mathcal{H}}_I$ considera la interacción de muchos cuerpos, ya que en la representación Fermiónica requiere cuatro operadores Fermiónicos. Es evidente que este término, por sí solo, no es capaz de inducir dinámica en la polarización. Así, cuando esta interacción domina, cualquier excitación permanece esencialmente congelada en una especie de fase de vitrosa (*spin-glass*). Sin embargo, cuando las interacciones se suman a las excitaciones localizadas, el término $\hat{\mathcal{H}}_I$ proporciona múltiples vías a través del espacio de Hilbert, lo que le permite continuar su proceso de difusión cuántica [74, 75].

Si solo consideráramos el término xy y el término de Ising, $\hat{\mathcal{H}}_{xy} + \hat{\mathcal{H}}_I$, el Hamiltoniano es conocido como modelo XXZ y puede ser resuelto mediante el Bethe ansatz [220]. En presencia de campos Zeeman locales, como puede ser $\hat{\mathcal{H}}_W$, se observó que el modelo presenta una distribución de niveles del tipo Wigner-Dyson [221], usualmente asociada al caos cuántico.

4.1.1. Condición inicial.

Para fijar ideas, consideramos los ingredientes idealizados de una configuración experimental de RMN [73], ya que otras configuraciones experimentales son a menudo adaptaciones de estos conceptos. Se supone una energía térmica $k_B T = 1/\beta$ que es muy alta en comparación con la frecuencia de Zeeman, ω_o , y los parámetros relevantes en el Hamiltoniano ($k_B T \gg \omega_o \gg J, U$). Al igual que en el experimento del eco de polarización [100], se utiliza una sonda local, por ejemplo un núcleo diferente, que está conectado a un espín individual, digamos el sitio 0, para generar y medir la excitación inicial. Independientemente, puede asegurarse que la polarización de cada uno de los demás espines se anule. Por tanto, el estado inicial está representado por la matriz de densidad:

$$\hat{\rho}_0 = \frac{\hat{\mathcal{I}} + \beta\omega_o\hat{S}_0^z}{\text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{I}} + \beta\omega_o\hat{S}_0^z \right\}}. \quad (4.5)$$

Ya que $\hat{\mathcal{I}}$ no contribuye a la dinámica, $\hat{\rho}_0 \propto \hat{S}_0^z$ describe un estado pseudo-puro [222]. Cabe destacar que el subíndice 0 solamente alude a un sitio inicial, sin implicar la posición del mismo dentro del sistema. En un experimento de RMN real, se utiliza una muestra macroscópica en la que se abordan simultáneamente varios sitios distantes. Sin embargo, esto sólo produce un observable más robusto que promedia las fluctuaciones cuánticas no deseadas que caracterizan las mediciones individuales.

La naturaleza de la excitación se comprende mejor en términos de los operadores de subida y bajada de espín, cuya correspondencia con los operadores Fermiónicos de creación y aniquilación es directa. Estos operan en el estado de equilibrio térmico de N -espines descrito por $|\Psi_{\text{eq}}\rangle$ [73]. Consiguentemente,

$$|\Psi_0\rangle = \frac{\hat{S}_0^+ |\Psi_{\text{eq}}\rangle}{\left| \langle \Psi_{\text{eq}} | \hat{S}_0^- \hat{S}_0^+ | \Psi_{\text{eq}} \rangle \right|^{1/2}} \quad (4.6)$$

$$= \sum_{r=1}^{2^N-1} \frac{e^{i\phi_r}}{2^{(N-1)/2}} |\uparrow_0\rangle \otimes |\beta_r\rangle, \quad (4.7)$$

donde el denominador asegura la correcta normalización del estado, ϕ_r es una fase aleatoria y $|\beta_r\rangle$ describe un estado de la forma:

$$|\beta_r\rangle = |s_1\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes |s_3\rangle \otimes \dots \otimes |s_{N-1}\rangle$$

$$\text{con } |s_k\rangle \in \{|\uparrow_k\rangle, |\downarrow_k\rangle\}.$$

Esta descripción supone que en el equilibrio térmico todas las correlaciones ya han decaído y, por tanto, las fases pueden considerarse números aleatorios. Por supuesto, los valores observados estarán sujetos a fluctuaciones cuánticas, como ocurre en un experimento individual real. Sin embargo, este ruido no sobrevive al promedio del ensamble.

Es particularmente útil pensar en el subespacio de excitaciones con proyección de espín negativa máxima, es decir, una excitación (espín up) y el resto down. Siendo estos estados

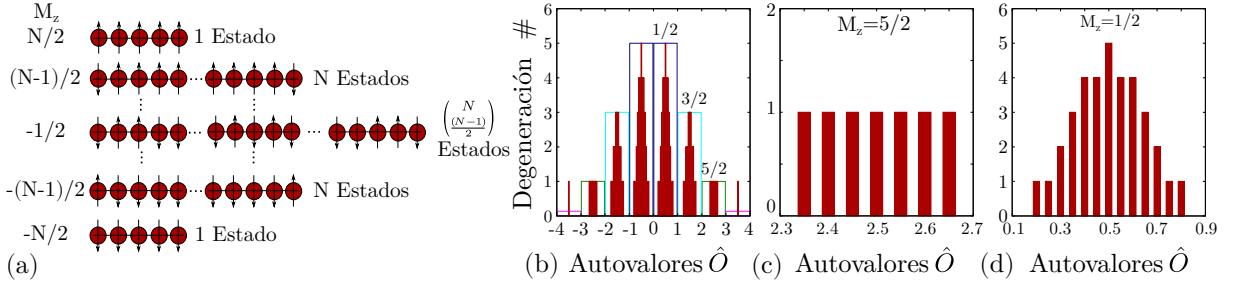


Figura 4.1: (a) Esquematización del espacio de Hilbert en un sistema de espines dividido en subespacios de magnétización total M_z . (b) Autovalores de $\hat{O} = \hat{S}^z + \sum_i (i-4)\varphi \hat{S}_i^z$ para un sistema de $N = 7$ espines para $\varphi = 0.05$. Los rectángulos encierran estados que tendrían la misma magnetización en ausencia del gradiente (subespacios M_z). (c-d) Zoom de la figura (b) en los subespacios de $M_z = 5/2$ y $M_z = 1/2$ respectivamente.

descritos en la base computacional en la forma

$$|\beta_n^1\rangle = |\downarrow_1\rangle \otimes |\downarrow_2\rangle \otimes \dots |\uparrow_n\rangle \dots \otimes |\downarrow_N\rangle, \quad (4.8)$$

$$\hat{\mathcal{H}}|\alpha_\nu\rangle = \varepsilon_\nu|\alpha_\nu\rangle = \varepsilon_\nu \sum_{n=1}^N a_{\nu n} |\beta_n^1\rangle, \quad (4.9)$$

ya que es el único subespacio donde la dinámica de una partícula (denotado con el supríndice 1), controlada por las energías ε_ν , persiste incluso para $U \neq 0$. De este modo, la dinámica de la excitación está descrita por la función de correlación

$$c_{n|0}(t) = \langle \beta_n^1 | \exp[-i\hat{\mathcal{H}}t] | \beta_0^1 \rangle \quad (4.10)$$

$$= \sum_{\nu=1}^N \exp[-i\varepsilon_\nu t] a_{\nu n}^* a_{\nu 0} \quad (4.11)$$

en términos de las auto-energías de una partícula ε_ν y equivalente a un sistema *tight-binding*.

Contrariamente, en los subespacios de excitaciones con proyección de espín mínima, donde la cantidad de espines up y down es la misma o difiere en uno dependiendo de la paridad de N , el sistema es análogo a un sistema de N sitios con $N/2$ partículas y consiguientemente es el subespacio donde los efectos de interacciones de muchos cuerpos son más notables. Al crecer el número de espines del sistema, este subespacio se vuelve dominante, ya que la dimensión del mismo crece exponencialmente como $\binom{N}{(N-1)/2} \approx 4^{N/2}/\sqrt{\pi N/2}$, a diferencia del crecimiento lineal del subespacio de una partícula.

4.2. Generalización de la GEA.

A pesar de las diferencias que aparecen al considerar muchos espines en lugar de excitaciones de un cuerpo, podemos extender de manera natural la secuencia GEA desarrollada en el Capítulo 2 a este sistema. Para ello, el gradiente de potencial debe transformarse en un gradiente de campo magnético, la excitación inicial en un exceso de magnetización

4.2. GENERALIZACIÓN DE LA GEA.

media en un sitio de la cadena y el eco sobre el sitio original en un eco en la magnetización que vuelve al sitio inicial.

Considerando estas equivalencias, el exceso de polarización producto del estado inicial $\propto \hat{S}_0^z$ evoluciona durante un tiempo t . Entonces, cada componente local del estado es perturbada por la acción de un pulso de gradiente de campo $\hat{\mathcal{H}}_g = \sum_n n \hat{S}_n^z$. Nuevamente, la intensidad de esta perturbación y la duración del pulso se ven reflejados conjuntamente en una fase φ . El efecto se entiende fácilmente al considerar el espacio de proyección de espín máximo negativo de la dimensión $\binom{N}{1}$ discutido anteriormente, y el subespacio de proyección de espín mínimo 1/2 de dimensión $\binom{N}{(N-1)/2}$. En el primero de estos subespacios, el exceso de polarización local se identifica con una probabilidad local de una sola partícula [70]. Esto implica que esta perturbación etiqueta cada componente local de la polarización total con una fase $n\varphi$, tal como se vio en el Capítulo 1. Después de esto, el sistema evoluciona hacia atrás en el tiempo (es decir, evoluciona bajo $-\hat{\mathcal{H}}$ durante un tiempo adicional t). Luego se registra la cantidad de magnetización que regresa al espín inicial. Identificando el operador de Heisenberg

$$\hat{\Phi}_\varphi(t) = e^{it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} e^{-i\varphi\hat{\mathcal{H}}_g} e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar}. \quad (4.12)$$

Podemos escribir todo el proceso como,

$$M(t, \varphi) = \frac{\langle \Psi_{\text{eq}} | \hat{S}_0^- \hat{\Phi}_\varphi^\dagger(t) \hat{S}_0^+ \hat{S}_0^- \hat{\Phi}_\varphi(t) \hat{S}_0^+ | \Psi_{\text{eq}} \rangle}{\langle \Psi_{\text{eq}} | \hat{S}_0^- \hat{S}_0^+ \hat{S}_0^- \hat{S}_0^+ | \Psi_{\text{eq}} \rangle} \quad (4.13)$$

$$\equiv \frac{\langle \hat{\Phi}_\varphi^\dagger(t) \hat{S}_0^z \hat{\Phi}_\varphi(t) \hat{S}_0^z \rangle_\beta}{\langle \hat{S}_0^z \hat{S}_0^z \rangle_\beta}. \quad (4.14)$$

donde es claro que el eco de Loschmidt (LE) bajo una perturbación (pulso) súbita tiene la forma de un OTOC (*Out of Time Order Correlator*). En sistemas isotrópicos, por ejemplo cuando la interacción viene dada por el Hamiltoniano de Heisenberg, es posible expresar este eco en término de una creación al tiempo inicial y una destrucción a tiempo t : $M(t, \varphi) = \langle \Psi_{\text{eq}} | \hat{\Phi}_\varphi^\dagger(t) \hat{S}_0^- \hat{\Phi}_\varphi(t) \hat{S}_0^+ | \Psi_{\text{eq}} \rangle / |\langle \Psi_{\text{eq}} | \hat{S}_0^- \hat{S}_0^+ | \Psi_{\text{eq}} \rangle|$.

El uso de dos notaciones alternativas permite enfatizar el significado físico de estos objetos matemáticos, algo oscuro en la literatura. La primera línea tiene una interpretación clara en términos de la dinámica de polarización iniciada por un operador que eleva el espín en un estado térmico dado, $|\Psi_{\text{eq}}\rangle$ sin polarización neta que se convierte en un estado excitado $|\Psi_0\rangle = \hat{S}_0^+ |\Psi_{\text{eq}}\rangle$ en el momento inicial. Luego, *evoluciona hacia adelante* en el tiempo bajo una dinámica Hamiltoniana $e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar}$ que desparrama la excitación. El sistema es *perturbado* por un pulso de gradiente de campo $e^{-i\varphi\hat{\mathcal{H}}_g}$ y luego, después de un cambio repentino en el signo Hamiltoniano, *evoluciona hacia atrás* en el tiempo con $e^{it\hat{\mathcal{H}}/\hbar}$. Como la perturbación impide un retorno perfecto, su efecto es *detectado* como el fracaso en alcanzar la polarización original. La segunda línea sigue la notación más estándar en dinámica de espín donde $\langle \cdot \rangle_\beta$ significa promedio sobre todos los estados de la base Zeeman ($\text{Tr}[\cdot]$) con su correcta normalización. La equivalencia entre estas dos vistas fue analizada en [223].

La representación en términos de la matriz de densidad nos permite especificar la

relación de este LE con un OTOC,

$$\langle [\hat{\Phi}_\varphi(t), \hat{S}_0^z(0)]^\dagger [\hat{\Phi}_\varphi(t), \hat{S}_0^z(0)] \rangle_\beta = 2\langle \hat{S}_0^z(0)^2 \rangle_\beta - 2M(t, \varphi). \quad (4.15)$$

Nótese que el grado de desparramo de $\hat{S}_0^z(t) = e^{it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} \hat{S}_0^z e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar}$, dentro de cada subespacio de proyección de espín total, es etiquetado por una rotación instantánea $\Phi = e^{-i\varphi\hat{\mathcal{H}}_g}$ alrededor de un gradiente de campo Zeeman. Lo que marca una diferencia crucial con la secuencia MQC donde una rotación uniforme no tendría ningún efecto observable al aplicarse después de una dinámica que conserva la proyección de espín total.

Al igual que en el Capítulo 2, usamos la transformada de Fourier de $M(t, \varphi)$ con respecto a la variable φ , obteniendo, para cada tiempo de evolución, las amplitudes \tilde{Q}_n , que llamamos *amplitudes de entrelazamiento de gradiente* (GEA),

$$\tilde{Q}_j(t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} M(t, \varphi) e^{-ij\varphi} d\varphi, \quad (4.16)$$

donde el tilde \tilde{Q}_n lo distingue de su contraparte de un cuerpo Q_n (Ec. (2.30)).

4.2.1. Diferencias entre las amplitudes GEA de un cuerpo y MB.

Al igual que en el caso de un cuerpo, estos coeficientes positivos codifican información sobre el grado de desparramo de la excitación. Sin embargo, una vez que se pierde la equivalencia con el sistema de un solo cuerpo, los posibles valores que pueden tomar los autovalores de $\hat{\mathcal{H}}_g$ aumentan, lo que resulta en un espectro de \tilde{Q}_n con un soporte más amplio. Esta ampliación del espectro puede entenderse fácilmente al analizar los autovalores de $\hat{\mathcal{H}}_g$, los cuales pueden evaluarse directamente al observar que la base computacional es una base de autoestados. En este contexto, podemos visualizar fácilmente el desplazamiento inducido por el gradiente de campo con respecto a la magnetización total del estado M_z .

Para ilustrar este punto, consideremos el caso con $N = 7$. Sin perdida de generalidad podemos pensar en los valores que puede tomar $\hat{O} = \hat{S}^z + \sum_{n=1}^7 (n-4)\varphi \hat{S}_n^z$ en la base computacional (espines up y down). Agregar estos dos términos facilita el análisis de la siguiente manera, $(n-4)$ centra el gradiente en el centro de la cadena donde inicialmente está la excitación, mientras que \hat{S}^z nos permite (siempre que φ sea pequeño) diferenciar el subespacio de origen de los autoestados. Esto no afecta el espectro obtenido siempre que la magnetización total se conserve ($[\hat{\mathcal{H}}, \hat{S}^z] = 0$), en caso contrario es conveniente utilizar el gradiente centrado, ya que de no hacerlo el espectro estaría superpuesto (y mezclado) con el espectro de coherencias cuánticas múltiples. En la figura 4.1b se muestra un histograma de los autovalores de \hat{O} para $\varphi = 0.05$. Se puede observar claramente cómo es para los subespacios de $M_z = \pm 5/2$ (*one-body*) el gradiente de campo nos desdobra todos los estados, lo que no sucede que para $M_z = \pm 1/2$ (figuras 4.1c y d respectivamente).

Es claro que en el subespacio de una partícula tenemos el mismo resultado que en el capítulo 2, ya que la posición de la excitación es lo único que determina el valor del observable $|\uparrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow\rangle$ o $|\downarrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow\rangle$ generan una fase diferente. En cambio, al considerar el subespacio $M_z = 1/2$ es imposible discernir entre $|\uparrow, \uparrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow, \uparrow, \uparrow\rangle$, $|\uparrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow, \uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle$ o $|\uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle$ por ejemplo. En estos tres casos, junto con dos más, el valor del obser-

4.2. GENERALIZACIÓN DE LA GEA.

vable \hat{Q} será 0.5, correspondiendo a la barra central del histograma mostrando en la fig. 4.1d.

En este subespacio, a diferencia del subespacio de una partícula donde el número de fases posibles era 7 (N) en este es de 13 $[1 + (N + 1)(N - 1)/4 = (N^2 + 3)/4$, para N impar]. Una forma simple de calcular este número consiste en tomar los dos valores extremos (todos los espines up a la izquierda y/o a la derecha), y considerar que al mover un espín el cambio en el observable es de una unidad. Note que la dimensión de este subespacio crece exponencialmente, mientras que el número de fases posibles de forma cuadrática. Estos valores extra se generan como consecuencia del entrelazamiento de los diferentes componentes locales de la excitación a una distancia na . Por lo tanto, se espera que en un régimen localizado sólo los índices bajos \hat{Q}_j sean importantes en contraposición a lo esperado para un régimen extendido.

En presencia de interacciones, $U \neq 0$, el valor en el centro de la distribución, \tilde{Q}_0 , no será igual a una relación de participación inversa (IPR) del estado dinámico en el sentido usual de una participación en el espacio de Hilbert, sino que aproximará a la suma de las magnetizaciones locales al cuadrado. Es decir,

$$\tilde{Q}_0 \xrightarrow{U \rightarrow 0} Q_0(t) = \sum_n \langle \hat{S}_n^z(t) \rangle_{\beta}^2 = \sum_n S_n^{z2} = \sum_n |c_{n|0}(t)|^4 = \text{IPR}_t. \quad (4.17)$$

$$\tilde{Q}_0 \approx \sum_n \langle \hat{S}_n^z(t) \rangle_{\beta}^2. \quad (4.18)$$

Donde $c_{n|0}(t)$ son las amplitudes de correlación dependientes del tiempo de la función de onda de una partícula en la base local (computacional). Al igual que en el capítulo 2, no estamos calculando la relación de participación inversa habitual de los estados propios, sino de la excitación de polarización a medida que evoluciona. Mientras que para $U = 0$, \tilde{Q}_0 coincide con el IPR_t , esto no es cierto en presencia de interacciones ($U \neq 0$). En este caso, \tilde{Q}_0 refleja el grado de dispersión de la excitación a lo largo de la cadena, pero no en el espacio de Hilbert. Sin embargo, la aparición de términos más altos en el espectro \tilde{Q}_j es indicativo del crecimiento del espacio de Hilbert que no corresponde a una dinámica de un cuerpo.

En el capítulo 2, observamos que la varianza de la distribución Q_j es idéntica a la varianza de la excitación. Esta correspondencia sigue siendo válida para $U = 0$,

$$\sum_j Q_j(t) j^2 = 2 \sum_n S_n^z(t) n^2 - 2 \left(\sum_n S_n^z(t) n \right)^2, \quad (4.19)$$

donde $S_n^z(t) = \langle \hat{S}_n^z(t) \rangle_{\beta}^2 = \text{Tr}\{\hat{S}_n^z \hat{S}_0^z(t)\} / \text{Tr}\{\hat{S}_0^z \hat{S}_0^z\}$ representa la magnetización media en el sitio n a tiempo t normalizada por la magnetización inicial. Sin embargo, para el sistema de espines *many-body* podemos observar una mayor riqueza en este segundo momento, ya que el mismo es equivalente (ver Apéndice A) al OTOC:

$$\sum_j \tilde{Q}_j(t) j^2 = 2 \text{Tr} \left\{ [\hat{\mathcal{H}}_g, \hat{S}_0^z(t)] [\hat{\mathcal{H}}_g, \hat{S}_0^z(t)] \right\} = 2 \sum_{n,m} nm \text{Tr} \left\{ [\hat{S}_n^z, \hat{S}_0^z(t)] [\hat{S}_m^z, \hat{S}_0^z(t)] \right\}. \quad (4.20)$$

En este caso, que $\text{Tr} \left\{ [\hat{S}_n^z, \hat{S}_0^z(t)] [\hat{S}_m^z, \hat{S}_0^z(t)] \right\}$ sea no nulo, implica el estado $\hat{S}_0^z(t)$ debe

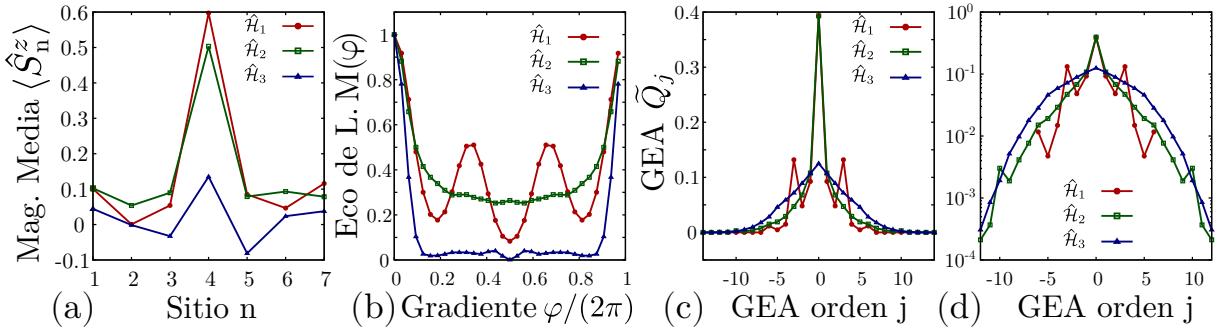


Figura 4.2: (a) Magnetización media por espín. (b) Eco observado en función de la magnitud del gradiente de campo φ . (c-d) Distribuciones GEA. Todas las figuras corresponden a una cadena de $N = 7$ espines interactuando mediante los Hamiltonianos \hat{H}_1 (rojo, Ec. (4.21)), \hat{H}_2 (verde, Ec. (4.22)), \hat{H}_3 (azul, Ec. (4.23)). (c) y (d) solo difieren en la escalada. Los resultados son a tiempo $t = 60J/\hbar$ siendo la condición inicial $\hat{\rho}_0 \propto S_4^z$.

estar compuesto de estados producto con peso en los sitios n y m . Al estar cada uno de estos términos pesado tanto por m y n , la suma total nos da una referencia del nivel de desparramo de los operadores en el espacio real, más allá de la varianza en la excitación de magnetización. Como se mencionó en la introducción, a tiempos cortos el crecimiento de los OTOCs se ha propuesto y utilizado como medida del revoltijo (*scrambling*) y del inicio del caos cuántico. Sin embargo, han sido los detalles del comportamiento a largo plazo de diferentes OTOCs los que captaron gran atención como herramientas para estudiar el caos, la termalización y la localización [224–227]. Estos pueden mostrar la variedad de fenómenos de interferencia notables que caracterizan las funciones de correlación, tales como latidos cuánticos [228], colapso de supervivencia [133] (tiempos intermedios), agujeros de correlación [115] (tiempos largos), y ecos mesoscópicos en el tiempo de Heisenberg [70, 229].

En las siguientes secciones presentamos el estudio numérico de los efectos de los términos MB en el espectro GEA, y de la dinámica de excitaciones en el modelo de espines interactuantes de Harper-Hofstadter-Aubry-André utilizando como cuantificadores principales los observables que resultan de la secuencia ZOGE. Para evaluar la dinámica para cadenas de más de 7 espines, empleamos una dinámica Trotter-Suzuki [173, 230] con el método de paralelismo cuántico [223], reduciendo drásticamente el tiempo de cálculo con respecto a los enfoques tradicionales de matrices de densidad y diagonalización del Hamiltoniano (Ver apéndice E).

4.3. Resultados numéricos.

4.3.1. Espectro GEA de una partícula vs. MB.

En esta sección veremos la diferencia entre los espectros GEA bajo la evolución de Hamiltonianos de una partícula y many-body. A modo ilustrativo se considera un sistema

4.3. RESULTADOS NUMÉRICOS.

de 7 espines resuelto mediante diagonalización exacta considerando tres Hamiltonianos:

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = \hat{\mathcal{H}}_{xy} + \hat{\mathcal{H}}_W \quad (4.21)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = \hat{\mathcal{H}}_{xy} + \hat{\mathcal{H}}_W + \hat{\mathcal{H}}_I \quad (4.22)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_3 = \sum_{n < m} J_{n,m} (\hat{S}_n^x \hat{S}_m^x - \hat{S}_n^y \hat{S}_m^y) + U_{n,m} \hat{S}_n^z \hat{S}_m^z + \hat{\mathcal{H}}_W \quad (4.23)$$

donde para todos los casos se consideró el valor crítico $W = J$. Para $\hat{\mathcal{H}}_2$ $U = J$ y, para $\hat{\mathcal{H}}_3$, $J_{n,m} = J$ Rand(1, -1) y $U_{n,m}$ es elegido aleatoriamente entre $0.9J$ y $1.1J$. La progresión en la elección de estos Hamiltonianos es directa: $\hat{\mathcal{H}}_1$ es equivalente a un sistema de una partícula mediante la transformación de Wigner-Jordan, con lo cual es equivalente al Hamiltoniano HHAA discutido en el Capítulo 2; $\hat{\mathcal{H}}_2$ incorpora interacciones de Ising, volviéndolo un Hamiltoniano MB, pero mantiene las interacciones a primeros vecinos y conserva la magnetización total; finalmente, $\hat{\mathcal{H}}_3$ es una combinación de acoplos dados por el Hamiltoniano de Cuantos Dobles (DQ, primer término), interacciones de Ising, y el potencial de sitio de HHAA. Estos acoplos son de largo alcance, MB, con un grado de aleatoriedad, y, debido al término DQ, no conserva la magnetización total.

La figura 4.2 muestra la distribución de magnetización, los ecos en función de la magnitud del gradiente φ y el espectro GEA para los tres Hamiltonianos a un tiempo fijo (arbitrario) $t = 60J/\hbar$. Se puede observar (Fig. 4.2a), cómo para los Hamiltonianos 1 y 2, la magnetización se mantiene cercana al sitio inicial, consecuencia de la conservación de la magnetización total y el tamaño reducido del sistema. En contraposición, la magnetización inicial sufre un mayor desparramo al evolucionar con el Hamiltoniano 3, observándose valores medios positivos y negativos con una magnitud menor en cada sitio. En función de la perturbación, Fig. 4.2b, es clara la progresión al incrementar la complejidad del Hamiltoniano: la introducción de términos MB borra las oscilaciones presentes en $M(\varphi)$ calculado a partir de una dinámica *one-body*; sin embargo, la curva se mantiene más o menos en los mismos órdenes que la correspondiente a $\hat{\mathcal{H}}_1$. Al romper la conservación de magnetización total, incluir interacciones a largo alcance y aleatoriedad, el efecto es más pronunciado, siendo los ecos $M(\varphi)$ relativamente chicos para casi todo valor del gradiente de campo.

Esto es reflejado en los espectros, Figuras 4.2c y d, donde se observa que el espectro en los casos MB es mucho más rico, extendiéndose hasta valores de $j = 12$, a diferencia del caso *one-body*, donde el valor no nulo máximo corresponde a $j = 7$. A pesar de esta diferencia, los espectros obtenidos evolucionando con $\hat{\mathcal{H}}_1$ y $\hat{\mathcal{H}}_2$ son similares, siendo el último suavizado por las interacciones de muchos espines. El Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_3$, en cambio, produce un espectro GEA mucho más ancho, con mayor peso a valores de n mayores. Esto es razonable, ya que el mismo mezcla estados dentro y fuera de los subespacios de magnetización total. Las interacciones aleatorias y de largo alcance contribuyen a suavizar el espectro, evitando los picos observados en los espectros de $\hat{\mathcal{H}}_1$ y $\hat{\mathcal{H}}_2$ (para $j = 4$ y $j = 10$, por ejemplo). En este caso, al tener $[\hat{\mathcal{H}}_3, S_z] \neq 0$ es conveniente utilizar el gradiente centrado (con valor medio 0), ya que de lo contrario se observaría un espectro superpuesto (y mezclado) entre los términos GEA y las coherencias cuánticas múltiples.

Al computar como función del tiempo el segundo momento de la distribución de magnetización, el segundo momento del espectro GEA y el OTOC asociado, confirmamos que el segundo momento de la GEA y el OTOC coinciden en los tres casos, mientras que este

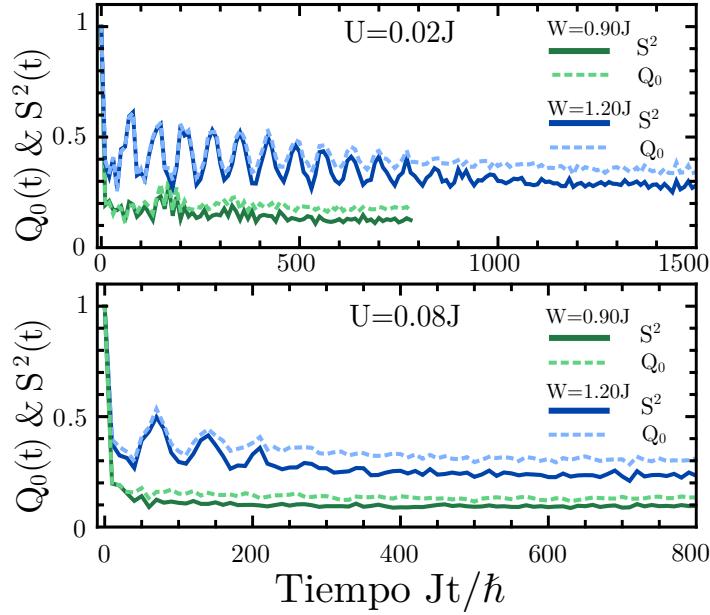


Figura 4.3: Simulación numérica del entrelazamiento de gradiente de orden cero (\tilde{Q}_0 , curvas a trazos) y la suma de las magnetizaciones al cuadrado (S^2 , curvas continuas) para dos amplitudes de interacción $U = 0.02J$ (arriba) y $U = 0.08J$ (abajo). El color de las curvas describe la amplitud del desorden, $W = 0.90J$ (verde) y $W = 1.20J$ (azul), es decir extendido y localizado respectivamente. Las simulaciones corresponden a una cadena de 13 espines con una excitación inicial en el séptimo espín.

valor equivale al segundo momento de la magnetización solo para la evolución de una partícula.

En la siguiente sección estudiamos, con mayor detalle, la dinámica y secuencia GEA en una cadena de espines interactuando mediante el Hamiltoniano dado en la Ec. (4.1). Nótese, que el Hamiltoniano \mathcal{H}_2 , es un caso particular del mismo con $N = 7$, $W = J$, y $U = J$.

4.3.2. Camino al estudio de la localización.

Cuando se “prende” la interacción, en la aproximación de Trotter la excitación inicial $S_0^z(0)$ comienza a propagarse a través del espacio de Liouville como $\hat{S}_0^z(\delta t) = \hat{S}_0^z(0) \cos(\delta t/T_2) - i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{S}_0^z(0)] \sin(\delta t/T_2)$. Aunque $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{S}^z] = 0$, es decir, los subespacios con diferente magnetización total M no se mezclan entre sí, a tiempos mayores los conmutadores de orden mayor $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{S}_n^z(t)]$ producen términos multi-espín dentro de cada subespacio. Estos términos contribuyen positivamente a \tilde{Q}_0 , lo que conduce a una diferencia con el IPR y su equivalente de muchos cuerpos, la suma de las magnetizaciones al cuadrado,

$$S^2(t) = \sum_n \langle \hat{S}_n^z(t) \rangle_\beta^2. \quad (4.24)$$

A través de simulaciones numéricas para varios tamaños de cadena, observamos que esta pequeña diferencia entre $\tilde{Q}_0(t)$ y $S^2(t)$ no afecta el análisis de localización/deslocalización. Aunque aparecen algunas diferencias monótonas, \tilde{Q}_0 sigue el comportamiento dinámico

4.3. RESULTADOS NUMÉRICOS.

del S^2 . La Fig. 4.3 muestra la amplitud del ZOGE (\tilde{Q}_0 , curvas a trazos) y la suma de las magnetizaciones al cuadrado (S^2 , curvas continuas) para dos intensidades de modulación, $W = 0.90J$ y $W = 1.20J$, que corresponden a los regímenes extendido y localizado respectivamente, y fuerzas de interacción suficientes para causar cierta deslocalización $U = 0.02J$ y $U = 0.08J$. Hemos observado que, en los casos más localizados, estas cantidades necesitan tiempo para hacer más evidente su diferencia. Esta escala larga de tiempo permite que la interacción difumine tanto los *breathing modes* de la fase localizada (oscilaciones en las curvas azules) como los ecos mesoscópicos de la fase extendida (interferencias constructivas en las curvas verdes) [70, 128]. En particular, cuando el sistema está en la fase localizada $S^2(t)$ y $\tilde{Q}_0(t)$ coinciden por tiempos más largos.

Estos resultados (Fig. 4.3) se obtuvieron con un estado inicial que pertenece al subespacio de magnetización total $M = 1/2$. Esto es equivalente a un sistema con $(N + 1)/2$ Fermiones, en una cadena con un número impar de sitios N . Por lo tanto, se optimizan los recursos computacionales mientras se trabaja en el subespacio que más interactúa. Este subespacio es representativo de un experimento de RMN [100] y también se usa típicamente en experimentos con átomos fríos, así como en otros estudios numéricos [48, 125, 231–233]. También confirmamos que \tilde{Q}_0 y S^2 siguen una dinámica idéntica para el subespacio con proyección de espín total $M = 1 - N/2$, donde la dinámica de excitación se vuelve de un solo cuerpo. Utilizando estados iniciales en distintos subespacios confirmamos que la diferencia entre ambas magnitudes es mayor a medida que la magnetización total del subespacio disminuye. Esto significa que la discrepancia observada en la Fig. 4.3 es la mayor que se podría observar en este sistema.

La principal utilidad experimental de nuestra secuencia es que nos permite obtener información sobre la codificación de todo el sistema simplemente midiendo algunos espines individuales del conjunto. Esta es una posibilidad casi única, dada por el uso de un núcleo raro como sonda local, junto con el procedimiento Eco de Loschmidt/OTOC. El núcleo raro primero inyecta y, más tarde, detecta la magnetización en un núcleo directamente conectado [100]. A partir de este núcleo inicial, la secuencia LE/OTOC permite la exploración dinámica del resto del sistema. Esta característica evita la necesidad de realizar múltiples mediciones individuales de los componentes locales de la magnetización, un logro bastante excepcional de unos pocos experimentos de RMN [129, 234]. Sin embargo, las simulaciones numéricas se pueden realizar a un costo menor sin implementar la inversión del tiempo, evaluando solo la suma de la magnetización al cuadrado bajo una dinámica directa.

La evolución de S^2 se simuló en una cadena de 19 espines variando los parámetros U y W , con una excitación inicial colocada en el centro de la cadena que, como observamos, nos permite evitar los efectos de borde. Como se señala en la Ref. [125], el modelo HHAA con interacción podría no mantener la propiedad de que la transición localizada/extendida ocurre simultáneamente para todas las energías propias de una sola partícula. Esto se debe a que, en un sentido de campo medio, un potencial renormalizado de una sola partícula no mantendría la autodualidad [108, 235]. Esto significa que para ciertos rangos de parámetros, los estados de partículas individuales localizados y deslocalizados podrían coexistir a diferentes energías. Aun así, nuestros resultados numéricos muestran que la ventaja del modelo HHAA de excluir la necesidad de realizar promedios de conjunto extensos para observar la transición de fase se mantiene. La única excepción encontrada es cuando la excitación comienza en un extremo de la cadena, donde los efectos de los

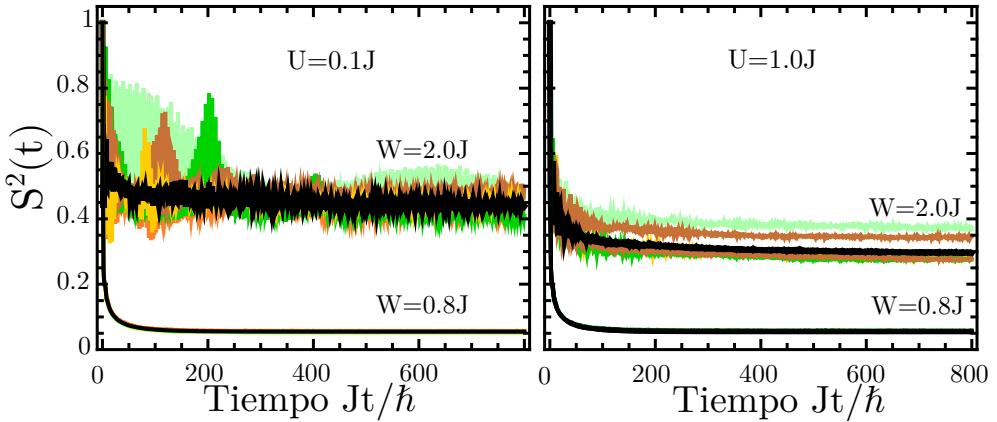


Figura 4.4: Evolución temporal de la suma de las magnetizaciones al cuadrado (S^2) en las fases extendida y localizada para cinco realizaciones de desorden (curvas de colores) y el promedio del conjunto (curva negra). Panel izquierdo: Fuerza de interacción $U = 0.1J$. Panel derecho: Fuerza de interacción $U = 1.0J$.

estados de borde se pueden malinterpretar como una localización de los autoestados. En la fase localizada, sin embargo, incluso con condiciones iniciales en el medio de la cadena, el promedio en realizaciones permite la eliminación de fluctuaciones locales a tiempos prolongados producto de dinámica particular de S^2 en cada realización.

La figura 4.4 muestra la evolución temporal de la suma de las magnetizaciones al cuadrado S^2 en las fases extendida y localizada para dos amplitudes de interacción y varias realizaciones de desorden. Observamos que en la fase extendida ($W = 0.8J$) las diferencias entre las dinámicas individuales y el valor de equilibrio obtenido de diferentes realizaciones del desorden se vuelven insignificantes. En la fase localizada esta diferencia puede ser marcada. En particular, cuando la fuerza de interacción U es pequeña, las recurrencias en $S^2(t)$ hacen necesario obtener el valor de equilibrio realizando promedios de en realizaciones del desorden (curvas negras). Una vez que se han promediado estas oscilaciones, los valores asintóticos y la ley de decaimiento se manifiestan de forma más clara.

La polarización asintótica.

En la Fig. 4.5 mostramos los valores asintóticos (promediados en desorden) S^2 en función de W para varias intensidades de interacción. Para $U = 0$ observamos que esta cantidad aumenta rápidamente cuando W supera $W_c = J$ indicando la transición de fase entre estados extendidos y localizados.

A medida que aumenta la amplitud de las interacciones, aparecen dos efectos. Primero, tanto para el régimen extendido como para el localizado, el valor de S^2 disminuye abruptamente con la interacción. Esto indica que incluso las interacciones pequeñas son muy efectivas para ayudar a la redistribución de la polarización, evitando interferencias y recurrencias en la polarización. Algo similar se observa cuando la propagación balística precisa de paquetes de ondas queda destruida por pequeños valores de W . En segundo lugar, el crecimiento de S^2 , que se identifica como una marca distintiva de localización, se produce cuando la intensidad del potencial es mayor a medida que aumenta la interacción. Esto es indicativo del efecto deslocalizador de las interacciones de muchos cuerpos.

4.3. RESULTADOS NUMÉRICOS.

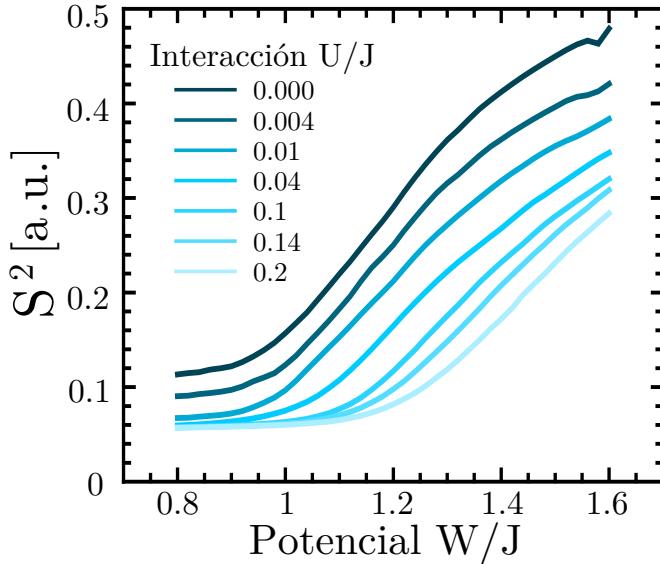


Figura 4.5: Valor de equilibrio de la suma de las magnetizaciones cuadradas promediada del desorden ($S^2 = \langle \sum_j \langle S_j^z \rangle_{\beta}^2 \rangle_{\phi}$) en función de la intensidad del desorden (W) para varias interacciones con fuerza desde $U = 0J$ hasta $U = 0.2J$ en una cadena $N = 19$.

Para tener una primera visión de la influencia de U en el valor crítico de W analizamos la derivada primera y segunda de S^2 en función de W ($d(S^2)/dW$ y $d^2(S^2)/dW^2$), observando para qué valor de W las mismas son máximas. Un análisis para el caso no interactuante nos indica que el máximo de la primera derivada puede interpretarse, incluso para un valor pequeño N , como un límite superior para W_c . Por el contrario, el máximo de la segunda derivada proporciona un límite inferior para W_c . En particular, a medida que se activan las interacciones U , el valor crítico de W aumenta muy poco; sin embargo, cuando $U > 0.04J$ el valor crítico tiende a crecer más rápidamente. Esto está de acuerdo con la observación experimental [48]. Existen resultados numéricos previos que incluyen interacciones a segundos vecinos que deberían representar mejor el sistema experimental. Sin embargo, no tienen la misma precisión al evaluar el rango de interacción débil [231]. Además, en este régimen la diferencia entre modelos se considera menos importante.

Los efectos y límites descritos anteriormente se pueden entender mejor en el mapa de color de S^2 en el espacio de parámetros, (W, U) , alrededor de la transición de Aubry-Andre (Fig. 4.6a). Aquí, las partes azules del diagrama representan valores pequeños de S^2 , que es una fase deslocalizada/ergódica, mientras que las partes amarillas y rojas del gráfico corresponden al régimen localizado/no ergódico. Los límites superior e inferior se muestran como líneas discontinuas negras, mientras que la línea discontinua gris es una línea de contorno que comienza en el valor crítico que no interactúa ($W = 1, U = 0$). Por lo tanto, está claro cómo las interacciones pequeñas mueven la fase localizada a valores más altos de W .

La Fig. 4.6b expande el mapa de color discutido anteriormente a un espacio de parámetros más amplio. A partir de $U \approx 0.1J$ las curvas S^2 vs W se vuelven demasiado suaves analizar la derivada primera y segunda, consecuentemente se muestra solo la curva de nivel (partiendo del valor crítico, $(W = 1, U = 0)$) como una medida de la magnitud crítica del potencial en presencia de interacciones. Es interesante notar como este valor

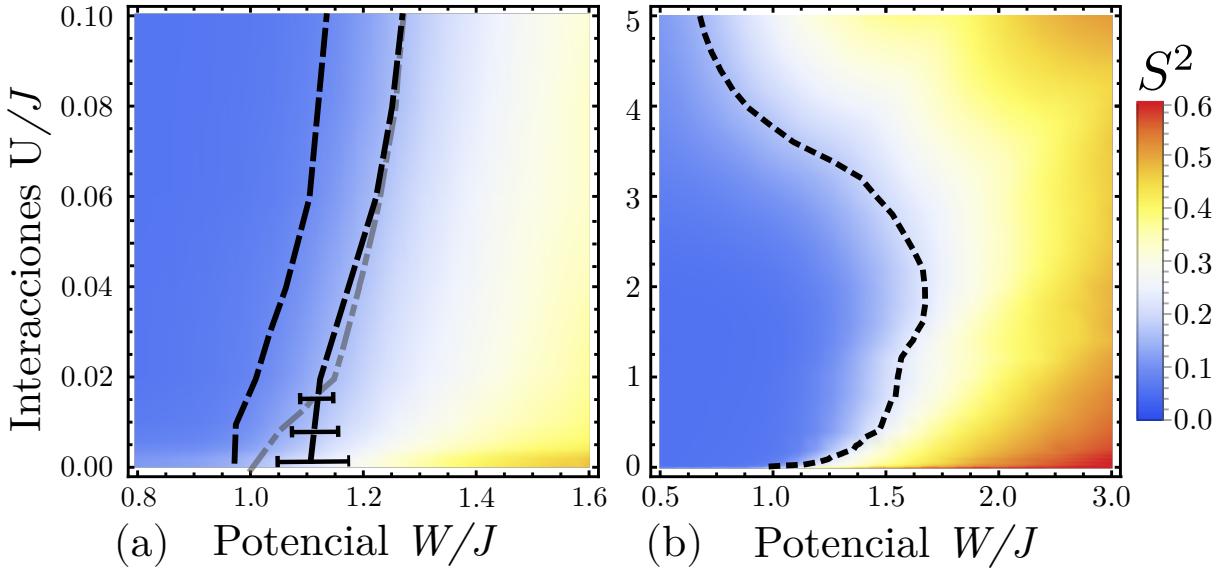


Figura 4.6: Mapa de densidad de $S^2 = \sum_n \langle\langle S_n^z \rangle\rangle_\beta$ versus U y W , esquematizando el diagrama de fase del sistema. En la fase ergódica-deslocalizada (azul), el S^2 inicial decrece rápidamente, mientras que persiste durante largos períodos en la fase localizada no ergódica (amarillo/rojo). (a) Cercanías del punto crítico. Las líneas discontinuas negras muestran los límites encontrados para el valor crítico analizando la primera y segunda derivada de S^2 . La línea gris corresponde a la línea de contorno que comienza en el valor crítico para $U = 0$. (b) Diagrama extendido. La línea a trazos negra corresponde a una curva de nivel comenzando en el valor crítico para $U = 0$.

se desplaza rápidamente a W mayores para $U \leq 0.5J$. Este rápido crecimiento puede ser interpretado como una consecuencia directa del crecimiento del espacio de Hilbert explorable por la excitación al incluir interacciones. Para valores de $0.5J \lesssim U \lesssim 2J$, la curva de nivel continua desplazándose hacia valores mayores del “desorden”, alcanzando su valor máximo aproximadamente en $U \approx 2J$. A partir de este punto, si las interacciones continúan creciendo, las mismas comienzan a contribuir a la localización del sistema, incluso llevando el valor crítico por debajo del valor en ausencia de interacciones para $U \gtrsim 3.5J$. Este límite puede ser entendido una tendencia hacia la fase aislante de Mott, donde las interacciones de Ising generan un comportamiento vítreo [162].

Estos resultados son consistentes con lo encontrado experimentalmente en Ref. [48] en una red de átomos fríos. Si bien el sistema considerado en Ref. [48] es ligeramente diferente, las interacciones MB actúan sobre partículas de distinto espín en un mismo sitio, los resultados representan los mismos comportamientos físicos. El estado inicial corresponde a $N/2$ partículas colocadas en los sitios impares, la magnitud estudiada es el desbalance (*imbalance*) entre sitios pares e impares, cuyos valores asintóticos en función de los parámetros del Hamiltoniano es reproducida en la Fig. 4.7a. Consiguientemente, una desbalance cercano a cero implica una dinámica ergódica/deslocalizada, mientras que valores cercanos a la unidad una dinámica no-ergódica/localizada, como es reflejado en el diagrama de fases esquemático de la Fig. 4.7b (Blanco y amarillo respectivamente). Entre estos dos regímenes límite se encuentra una región de decaimiento lento.

4.3. RESULTADOS NUMÉRICOS.

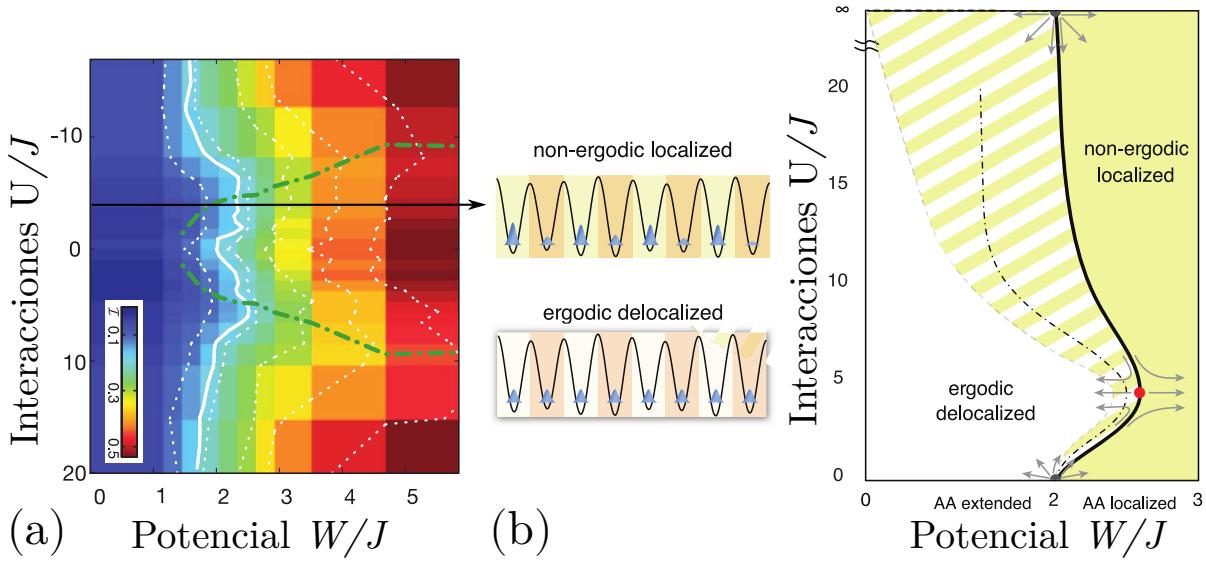


Figura 4.7: (a) Valor estacionario del desbalance (I) en función de las interacciones U y la intensidad del potencial W . Interacciones moderadas reducen el grado de localización en comparación con los casos que no interactúan o que interactúan fuertemente. Las líneas de puntos blancos corresponden a curvas de nivel de I , la línea blanca sólida es la curva de nivel de I que coincide con la transición de Aubry-André ($U = 0$ y $W/J = 2$) extendida al caso de interacción. (b) Esquema del diagrama de fases del sistema. En la región ergódica, fase deslocalizada (blanca), la condición inicial se descompone rápidamente, mientras que en la fase localizada/no-ergódica (amarilla) persiste durante mucho tiempo. La línea negra de puntos y trazos representa la transición observada experimentalmente, extraído de los datos del panel a. Las flechas grises representan el patrón esperado de los flujos del grupo de renormalización que controlan la transición de localización. Para $U = 0$, como así como en el límite de U infinito en ausencia de doblones, la transición está controlada por el punto crítico de Aubry-André sin interacciones. Figuras tomadas de Ref. [48].

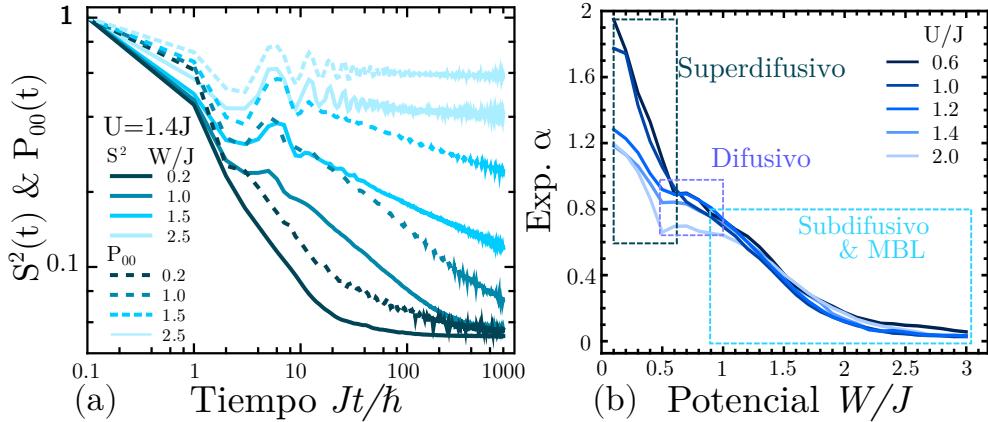


Figura 4.8: (a) Evolución temporal de $S^2(t)$ y $P_{00}(t)$ (curvas continuas y a trazos) para $U = 1.4J$ y varias realizaciones de desorden. La log-log captura la caída de potencia para el régimen de tiempo intermedio, pero omite (debido a falta de precisión) la caída de tiempo muy corto, $\propto 1 - \frac{1}{2}(Jt)^2$, que caracteriza tiempos cortos. (b) Exponente α la ley de potencia ($1/t^{\alpha/2}$) del decaimiento de la probabilidad de supervivencia de una excitación local $P_{00}(t)$ y de la suma de las magnetizaciones al cuadrado $S^2(t)$. Los α se muestran en función del desorden W para diferentes fuerzas de interacción U . Para la dinámica cuántica balística ideal, el exponente es $\alpha = 2$, los procesos de dispersión alrededor del desorden crítico conducen a un régimen de difusión $\alpha = 1$ que es bastante robusto ante interacciones de muchos cuerpos. En nuestro sistema finito, la localización de muchos cuerpos se considera subdifusión, un exponente que tiende a cero para desorden fuerte.

La probabilidad de supervivencia y la dinámica del desparramo de la OTOC.

El comportamiento dinámico de diferentes condiciones iniciales ante la presencia de interacciones y desorden ha sido ampliamente estudiado, mostrando variedad de resultados dependiendo de los parámetros. En particular, se ha observado una dinámica lenta (subdifusiva) antes de la aparición de la fase de localización de muchos cuerpos [232, 233, 236], cuya explicación sigue siendo un tema de debate. En un sistema de una partícula, un decaimiento de ley de potencias en la probabilidad de supervivencia puede ser una consecuencia de procesos de retorno no-markovianos como se describe cuidadosamente en la Ref. [133]. Para el desorden aleatorio en un sistema de muchos cuerpos, estudios teóricos han predicho un régimen de Griffiths en el lado térmico de la transición [237], donde la dinámica está dominada por regiones espaciales “raras” con tiempos de escape anormalmente grandes. Sin embargo, esta imagen no puede ser aplicada cuando existen correlaciones de largo alcance en el potencial del sitio (desorden) subyacente [238, 239], como puede ser el caso del desorden de HHAA.

El régimen de dinámica lenta (subdifusiva) también se observa en nuestras simulaciones de $S^2(t)$. En la Fig. 4.8a, mostramos este decaimiento subdifusivo para una interacción $U = 1.4J$ y varias amplitudes de desorden. Las curvas continuas representan $S^2(t)$, mientras que las curvas punteadas muestran la probabilidad de supervivencia $P_{00}(t)$. Observamos que si bien el decaimiento inicial de $S^2(t)$ es más rápido que el correspondiente a $P_{00}(t)$, una vez que se alcanza el régimen subdifusivo, ambas desintegraciones pueden describirse aproximadamente con el mismo exponente. Esto se puede entender dentro del modelo simplificado: Supongamos una evolución idealizada de la distribución de magneti-

4.4. CONCLUSIONES.

zación dada por $P_{x0}(t) = 1/(2\pi\sigma^2)^{1/2}e^{-(x/\sqrt{2}\sigma)^2}$, donde $\sigma \propto [\sqrt{2}Dt]^{\alpha/2}$. Un caso de $\alpha = 2$ describiría una difusión cuántica quasi-balística. Una vez que los procesos de dispersión se vuelven relevantes, el exponente debería estabilizarse alrededor de $\alpha = 1$, lo que es indicativo de difusión en 1D. En nuestro caso la ley de desparramo Gaussiana representa la magnetización conservada, y $\alpha = d^*$ podría representar una difusión en un espacio fractal restringido de dimensión $d^* \leq 1$ [240]. En este modelo simple, la probabilidad de supervivencia está dada por $P_{00}(t) = 1/\sqrt{2\pi\sigma^2} \propto t^{-\alpha/2}$. La magnitud $S^2(t)$ en este modelo sería la integral de la magnetización al cuadrado $\int_{-\infty}^{\infty} [P_{x0}(t)]^2 dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi\sigma^2}} \propto t^{-\alpha/2}$. A medida que la localización conspira contra la difusión, α se vuelve más pequeña que 1 lo que explica una dinámica progresivamente subdifusiva.

La validez de la imagen anterior se ve reforzada por la concordancia de los exponentes que caracterizan nuestros observables dinámicos: la probabilidad de supervivencia local y el *grado de desparramo* cuantificado por la integral de la magnetización al cuadrado. El comportamiento observado concuerda plenamente con los procesos físicos que esperamos en los diversos regímenes del sistema a medida que cambiamos la amplitud del “desorden”. Para una amplitud de potencial finita, pero débil, en presencia de interacciones, la propagación de la excitación se ralentiza desde la dinámica balística cuántica a la difusión clásica (Fig. 4.8b), donde se observa una región estable para un pequeño rango de amplitudes del potencial en la vecindad del punto crítico. Un mayor aumento del potencial ralentiza continuamente el desparramo hasta que entra en la fase MBL.

En cierto modo, tal como vimos en el Capítulo 3 que la difusión coherente generada por el modelo de HHAA es estable ante decoherencia, aquí observamos que también se vuelve estable ante la presencia de interacciones many-body. Esto no es del todo sorprendente, ya que se ha propuesto a la presencia de interacciones many-body no controladas como una fuente de decoherencia [241, 242].

Otra información interesante que se puede extraer de los datos asintóticos de los regímenes difusivos y subdifusivos es que los mismo decrecen con una ley de potencias $S^2 \simeq L^{-d^*}$, siendo d^* la dimensión efectiva ó dimensión fractal. De hecho, esto resulta ser consistente con el exponente de decaimiento de la probabilidad de supervivencia y la integral de magnetización al cuadrado. Considerando tiempos entre $t \sim 10/J$ y $t \sim 500/J$, ajustamos la ley de potencia del decaimiento de la probabilidad de retorno y de la suma de la magnetización al cuadrado. Obtuvimos el mismo exponente α de ambos casos, reforzando la observación anterior. Su disminución a medida que aumenta el desorden indica una equilibración progresivamente más lenta (Fig. 4.8b).

4.4. Conclusiones.

En este capítulo generalizamos la secuencia GEA a un sistema de espines interactuantes. Mostramos que puede ser utilizada para medir la deslocalización en el tiempo de una excitación local en sistemas de espines. Esto es posible a través de la evaluación del término central del espectro obtenido mediante la secuencia \tilde{Q}_0 , un OTOC que denominamos *entrelazamiento de gradiente de orden cero* (ZOG), o de la varianza del espectro. La secuencia proporciona un método práctico para analizar la transición de localización/-deslocalización y, de manera más general, una herramienta para cuantificar la dinámica de excitación a medida que se vuelve no ergódica. Los únicos requisitos son el acceso

a un observable local, la posibilidad de aplicar un gradiente de campo magnético (o un gradiente de potencial eléctrico en sistemas de electrones), y que la dinámica global pueda invertirse en el tiempo, algo bastante estándar en RMN y, por extensión, en otras técnicas experimentales.

Las propiedades más atractivas del espectro observado mediante esta técnica son, como se observó en el Capítulo 2, que en el límite de interacción insignificante, \tilde{Q}_0 se convierte precisamente en el inverso de la razón de participación, IPR, de la polarización y aproxima a su definición generalizada S^2 para el caso interactuante. Si bien este observable no satisface una ley de conservación precisa, de alguna manera es equivalente a la integral de una densidad de carga cuadrada en un gas fermiónico. Esta correspondencia también proporciona una interpretación física sólida para este OTOC en particular. Asimismo, el segundo momento del espectro es equivalente al segundo momento de la excitación en el límite de $U \rightarrow 0$, siendo generalizado al OTOC $\text{Tr}\{\hat{[\mathcal{H}_g, \hat{\rho}(t)]^2}\}$ para $U \neq 0$.

Numéricamente, la similitud entre \tilde{Q}_0 y S^2 nos permite estimar el valor a tiempos largos de \tilde{Q}_0 mediante el cálculo de S^2 con mucho menos costo computacional. Realizamos un análisis de S^2 en los alrededores del punto crítico $W_c = J$ para una magnitud de interacción pequeña ($U \ll J$), lo que nos permite seguir el desorden crítico a medida que U aumenta. Observamos cómo el desorden crítico aumenta con U , lo que indica que las interacciones de muchos cuerpos, actuando como fuente de “decoherencia”, disminuyen las interferencias subyacentes al fenómeno de localización. Las interacciones, entonces, ayudan a mezclar la magnetización dentro de la fracción más amplia de espacio. En el límite de interacciones fuertes ($U \gg J$) las propias interacciones fragmentan el espacio de Hilbert y congelan la dinámica. Se ha observado que muchos de estos comportamientos continúan siendo válidos en generalizaciones del modelo [243, 244], particularmente, cuando se incluyen interacciones de largo alcance donde la física del sistema es cualitativamente distinta en el límite $U \gg J$.

En nuestra estrategia numérica, estudiamos el comportamiento asintótico de las excitaciones y nuestros resultados son capaces de discriminar entre estados localizados y extendidos, independientemente de la existencia de decaimientos lentos, aunque observamos regiones con decaimientos lentos consistentemente con la existencia de una *fase S* reportada en [125] para este modelo y asociada a una fase “extendida no-ergodica” [245]. Si bien este decaimiento lento es observado en diferentes OTOCs [246], en estados estacionarios [247], o en el decaimiento de excitaciones, como encontramos en este capítulo, en nuestros sistemas pequeños no nos vimos obligados a asignar una fase diferente.

Es claro que hay mucho espacio para una mayor exploración de la información que se puede extraer de todo el *espectro de entrelazamiento de gradientes*, en particular de los términos de orden alto, como fue visto en la sección 4.3.1. Al enfocarnos, debido a las exigencias numéricas de la cadena de $N = 19$, en la dinámica de $S^2(t)$ y sus valores asintóticos, esta información no fue extraída. No obstante, en un experimento real, uno puede aprovechar no solo \tilde{Q}_0 sino todos los \tilde{Q}_j para diferentes j , siendo de particular interés el segundo momento del espectro.

En un sistema MB, las diferencias crecientes en el espectro, como la aparición de valores más altos de \tilde{Q}_j con respecto al caso sin interacción, podrían encontrar un uso adicional para decodificar información particular sobre la ocupación real del espacio de Hilbert. En este sentido, una propiedad importante de S^2 y, a través de su correspondencia, de \tilde{Q}_0 es que mide cómo se propaga un observable en el espacio real. Por tanto, no depende

4.4. CONCLUSIONES.

directamente del tamaño del espacio de Hilbert.

Dado que la polarización es una magnitud conservada en varios sistemas de espines de muchos cuerpos, una secuencia similar a la propuesta, se puede usar para definir una entropía de Renyi [248]. La conexión de este último con la razón de participación inversa (IPR), obtenido como la suma del cuadrado de las polarizaciones locales, lo convierte en una magnitud natural para cuantificar la localización de muchos cuerpos en una cadena de espines interactuantes o modelos relacionados. Sin embargo, hasta ahora las implementaciones experimentales se han limitado a sistemas moleculares pequeños [249] u observables indirectos que son sólo un indicador de las propiedades de localización de cadenas de espín desordenadas [215]. Nuestro trabajo supera estas limitaciones al proponer una estrategia que se centra en la obtención de un IPR espacial, exacto en sistemas sin interacciones, a partir de procedimiento que conserva su potencial en el régimen MBL.

Finalmente, encontramos que el comportamiento dinámico a largo plazo de S^2 y P_{00} está impulsado por los mismos exponentes de decaimiento. Esta relación, que también derivamos de una modelización simple de la dinámica de la probabilidad espacial, permite caracterizar la dinámica con ambas magnitudes. En este caso, ambas muestran cómo la dinámica cambia de balística, a difusiva y subdifusiva, para luego entrar en una fase de localización de muchos cuerpos a medida que aumenta el desorden. La región de decaimiento lento es consistente con resultados anteriores [125, 232, 233, 236]. Además, el exponente de la ley de potencia α en el régimen subdifusivo se puede conectar directamente con una dinámica no ergódica restringida a una porción del sistema con dimensión fractal $d^* < 1$ [240].

Las contribuciones originales de este capítulo fueron publicadas en:

- Lozano-Negro, F. S., Zangara, P. R., & Pastawski, H. M. (2021). *Ergodicity breaking in an incommensurate system observed by OTOCs and Loschmidt echoes: From quantum diffusion to sub-diffusion*. Chaos, Solitons & Fractals, 150, 111175.

Capítulo 5

OTOCs Globales como una caracterización del desparramo en la dinámica de observables Locales.

En este capítulo se explora la hipótesis, originada en experimentos de RMN [79], de que es posible extraer información sobre la OTOCs locales a partir de observables globales. Específicamente, investigamos la evolución de los ecos generados por la secuencia de coherencias cuánticas múltiples y el número de espines correlacionados derivados de la misma. En un anillo de espines evaluamos numéricamente la discrepancia entre magnitudes globales y locales variando el rango de interacción entre espines y el tamaño del sistema.

En los últimos años, el concepto de Funciones de Correlación sin orden temporal (OTOC) ha captado la atención tanto de físicos teóricos como experimentales como una herramienta para detectar caos cuántico [53, 58, 250, 251]. Los OTOCs se han convertido en una herramienta analítica para identificar manifestaciones del caos en el desparramo o revoltijo (*scrambling*) de la información cuántica. Es decir, el proceso en el que la información local se propaga entre muchos grados de libertad, creando correlaciones complejas que impiden extraer la información a partir de mediciones locales. La motivación inicial surgió de reconocer que un comportamiento caótico es un requisito crucial para que una teoría cuántica de campos describa adecuadamente las inestabilidades clásicas extremas inducidas por la gravedad en la proximidad de un agujero negro [78]. Sin embargo, los OTOC son objetos inherentemente amplios, lo que deja algo oscuro su significado físico detallado y sus potenciales observaciones experimentales. Alexei Kitaev [252] reconoció que el concepto de OTOC estaba contenido en un trabajo de Larkin y Ovchinnikov, donde estudiaban del efecto de las colisiones con las impurezas en los electrones de superconductores desordenados [76]. En este artículo (Ref. [76]) se observó que los procesos de dispersión responsables del camino libre medio también dan lugar a un crecimiento dinámico en el módulo cuadrado de un par de operadores de Heisenberg “locales” que inicialmente comutan.

Buscando un modelo cuántico adecuado a las propiedades extremas en las cercanías de un agujero negro, Kitaev descartó el Hamiltoniano estándar de Heisenberg en favor de un sistema de Fermiones de Majorana con desorden e interacciones de muchos cuerpos

5.1. ECOS Y OTOCS.

con un rango infinito, ahora conocido como Sachdev-Ye-Kitaev (SYK), con el que predijo un crecimiento exponencial del conmutador OTO. Sin embargo, un enfoque experimental del problema parecía imposible, ya que implicaría evoluciones tanto hacia adelante como hacia atrás de diferentes operadores.

En una línea de desarrollo independiente, la comunidad de resonancia magnética nuclear (RMN) descubrió y utilizó varios OTOCs específicos en forma de ecos y observables derivados de estos. Esto se debe a que en RMN, la implementación de una reversión de la evolución de espines individuales es fundamental para muchos experimentos, siendo pionero el eco de Hahn, donde la imposibilidad de recuperar el estado inicial cuantifica en la escala de tiempo de la relajación T_2 [4]. Décadas más tarde, la posibilidad de invertir la dinámica de un Hamiltoniano de múltiples espines dio lugar a la observación de ecos mágicos y ecos generalizados de estados evolucionados y perturbados [253, 254]. Entre ellos destaca la secuencia de coherencias cuánticas múltiples y el número de espines correlacionados derivados de la misma, siendo ambas magnitudes un OTOC diferente [81, 82].

Sin embargo, una de las principales limitaciones de las mediciones de la RMN reside en la dificultad para excitar y detectar espines individuales. Aunque esta detección se puede realizar en algunos casos [129, 255], no es lo estándar. En la mayoría de los experimentos, los observables son operadores globales que involucran todos los espines del conjunto. Este hecho dificulta la comparación con el análisis teórico de las OTOC, usualmente basado en operadores locales.

Este capítulo se propone explorar la hipótesis, hecha explícita en la reciente publicación [79], de que un observable evaluado sobre toda la muestra podría representar el promedio de observables “locales” no correlacionados. Para ello, en la sección 5.1 examinamos analíticamente la relación entre ecos generalizados de coherencias cuánticas múltiples y el número de espines correlacionados usando un OTOC particular derivado de distintos LE. Para ambas magnitudes identificamos las distintas contribuciones de OTOCs y ecos locales a los observables globales. En la sección 5.2 evaluamos numéricamente estas magnitudes en un modelo de prueba: un anillo de espines con interacciones de largo alcance. Comparamos tanto en la evolución temporal como en los valores de equilibrio de OTOCs locales y globales para diferentes tamaños de sistemas, encontrando evidencia de que la hipótesis se cumple cuando el tamaño del sistema aumenta junto con su complejidad.

5.1. Ecos y OTOCs.

La forma general del conmutador sin orden temporal (OTO) se define como,

$$C_{\hat{V}\hat{W}}(t) = \text{Tr} \left\{ \left[\hat{W}(t), \hat{V} \right]^\dagger \left[\hat{W}(t), \hat{V} \right] \right\}. \quad (5.1)$$

En el caso de los operadores de \hat{W} y \hat{V} Hermíticos y evolución unitaria, la expresión se puede reescribir en la forma:

$$C_{\hat{V}\hat{W}}(t) = 2 \left(1 - \text{Tr} \left\{ \hat{W}(t)^\dagger \hat{V}^\dagger \hat{W}(t) \hat{V} \right\} \right), \quad (5.2)$$

donde en la literatura teórica y numérica, \hat{W} y \hat{V} son generalmente operadores locales como, por ejemplo, las matrices de Pauli [256]. Considerando que los operadores \hat{V} y \hat{W} inicialmente comutan, el correlador $F(t)$ definido como,

$$F(t) = \text{Tr} \left\{ \hat{W}(t)^\dagger \hat{V}^\dagger \hat{W}(t) \hat{V} \right\}, \quad (5.3)$$

comienza desde 1 y decae con el tiempo. En algunas condiciones, se observa una caída exponencial con el mismo exponente de Lyapunov que controla su contraparte clásica [226, 228, 257], lo que sirve como diagnóstico del desparramo de información y el caos cuántico.

El correlador $F(t)$ implica necesariamente un procedimiento de inversión temporal y su cálculo puede pensarse como un experimento en el que \hat{V} establece una excitación cuántica que evoluciona durante un tiempo t , y luego es perturbado por \hat{W} . Posteriormente, sigue una evolución de inversión temporal antes de aplicar una medición (\hat{V}^\dagger) [79, 80]. Bajo esta visión $F(t)$ tiene la forma de un eco de Loschmidt con una perturbación $\hat{W} = \exp[-i\hat{\Theta}\Delta t/\hbar]$, que actúa por un breve período Δt después de una evolución hacia adelante [79]. En la mayoría de los experimentos en sistemas de muchos cuerpos, hay una perturbación incontrolable $\hat{\Sigma}$ que persiste durante todo el período de inversión de tiempo y, por lo tanto, no es posible una factorización en la forma anterior. En este último caso, la señal recuperada es el eco de Loschmidt que muestra una caída dentro de la escala de tiempo independiente de la perturbación T_3 de unas pocas veces T_2 . En los modelos semicálicos de una sola partícula, el decaimiento es exponencial y una vez que $\hat{\Sigma}$ excede un pequeño valor crítico, la tasa de decoherencia $1/T_3$ se identifica con el exponente clásico de Lyapunov [67, 69]. También es una medición experimental ampliamente utilizada en configuraciones experimentales con implicancias prácticas para la normalización y el comportamiento de la dinámica [6, 258]. En nuestro sistema de prueba, asumimos la capacidad de revertir completamente la dinámica hacia adelante, lo que implica la ausencia de decoherencia o de cualquier componente no controlado en la evolución. En caso contrario, sería necesario normalizar las curvas obtenidas debido al decaimiento total provocado por la presencia de factores no controlados.

La dinámica de los OTOC como medida del crecimiento del “tamaño” y complejidad del operador inicialmente local ha sido estudiada en sistemas cerrados y abiertos [259], donde se la ha vinculado con la sensibilidad del sistema a la decoherencia, y con la emergencia de caos cuántico [260]. Los regímenes dinámicos de los OTOC se pueden separar en tiempos cortos, intermedios y largos. Los tiempos cortos e intermedios dependen en gran medida del Hamiltoniano y de los operadores iniciales particulares, y de su naturaleza (es decir, local o global). En tiempos prolongados, los OTOC de un sistema finito oscilan o, para sistemas altamente caóticos, fluctúan alrededor de un valor medio [228].

En la ref. [79] propuso que la información extraída de los OTOC globales es indicativa del comportamiento de los observables locales. Expresamente, se infiere el comportamiento a largo plazo de los OTOC locales a partir de los observables globales, ya que estos últimos están compuestos principalmente por un conjunto de magnitudes locales casi idénticas. Posteriormente, Zhou y Swingle [61] estudiaron la contribución de los OTOC locales a los globales en una cadena de espines, demostrando que en una expansión, los términos “diagonales” (OTOCs locales) son los que más contribuyen. Aquí, adoptamos una perspectiva algo diferente, tomando como punto de partida los observables experimentales: las magnetizaciones asociadas con los diferentes ecos.

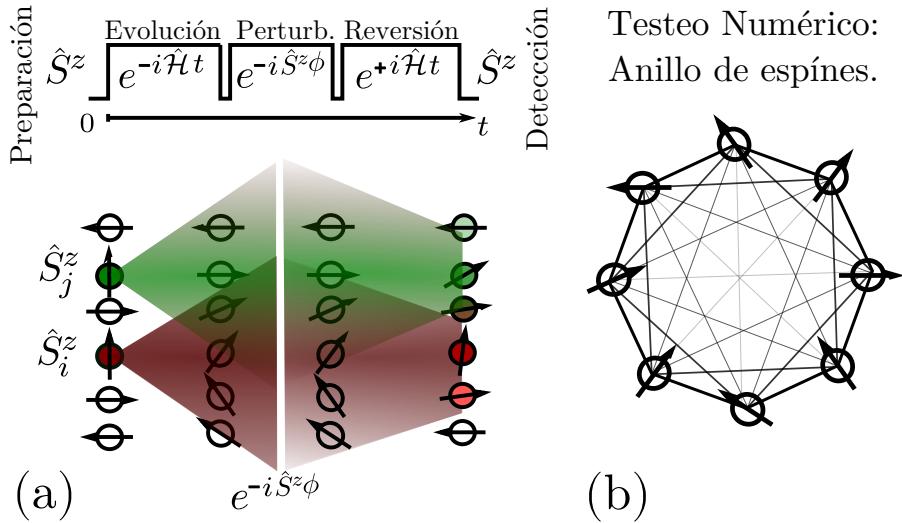


Figura 5.1: (a) Arriba: secuencia de evolución de un experimento MQC. Abajo: representación esquemática del experimento del eco de Loschmidt (MQC). A tiempos largos, el eco de magnetización global \hat{S}^z es una consecuencia de todos los ecos locales, ya que la polarización proveniente de otros sitios interfiere destructivamente (superposición de verde y granate). (b) Esquema del sistema de anillos de espines donde testeamos nuestra hipótesis. El rango de los acoplamientos entre espines se elige en términos de la “distancia de enlace” entre espines, $\propto \frac{1}{r^\alpha}$ para $\alpha = 1, 2, 3$.

5.1.1. Ecos generalizados en RMN.

En numerosas situaciones, particularmente conectadas a sistemas de espín de muchos cuerpos analizados mediante RMN, la señal adquirida está relacionada con operadores globales. En RMN, el observable es la magnetización total de la muestra, que es proporcional al espín total $\hat{S}^z = \sum \hat{S}_i^z$, combinando la contribución de cada espín individual, siendo la dirección z está determinada por el campo magnético externo. En consecuencia, la condición inicial también suele ser un operador global, la magnetización de equilibrio de un conjunto de espines polarizados en presencia del campo magnético, donde la matriz de densidad es $\hat{\rho}(t=0) \propto \hat{S}^z$.

La interacción natural entre espines $S = 1/2$ en una muestra sólida viene dada por el Hamiltoniano dipolar [261]. Se han desarrollado varias secuencias que utilizan pulsos de radiofrecuencia basados en el acoplamiento espín-espín, cada una con aplicaciones prácticas como el desacoplamiento homonuclear, la condición de Lee-Goldberg, la irradiación en resonancia o el Hamiltoniano de Cuantos dobles (*double quantum Hamiltonian*) [262, 263]. Estos avances han llevado tanto a la formulación de nuevos Hamiltonianos como de interacciones reescaladas, ampliando el alcance de las técnicas de espectroscopia de RMN. En estos Hamiltonianos, respaldados en la teoría de Hamiltonianos promedio, se basa típicamente en la expansión de Magnus y la aproximación de Floquet [264–266]. Entre las posibilidades dadas por esta técnica se destaca la capacidad de simular el efecto de una evolución inversa a partir de un cambio de signo en el Hamiltoniano. Esto permite el estudio de fenómenos de eco, como los ecos mágicos, los ecos de Hahn y los ecos de Loschmidt a través de secuencias de pulsos de inversión temporal. Además, la evolución de la magnetización inicial y la transición a superposiciones coherentes se puede investigar utilizando ecos modificados obteniendo una distribución de coherencias cuánticas

múltiples.

La secuencia de pulsos de coherencias cuánticas múltiple, ampliamente utilizada en RMN para el conteo de espines, puede considerarse una de las OTOC pioneras. Implica tres períodos, esquematizados en el panel superior de la Fig. 5.1a. Primero hay una evolución temporal (hacia adelante) con un Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$; a esto le sigue la codificación (o etiquetado de fase) de las coherencias cuánticas y, últimamente, una inversión temporal o evolución hacia atrás con $-\hat{\mathcal{H}}$. Experimentalmente, el observable final y el estado inicial son proporcionales a la magnetización total del operador \hat{S}^z . Aquí la codificación de fase (rotación alrededor de z) juega el rol de la perturbación (\hat{V}) en el procedimiento OTOC y es una evolución con un Hamiltoniano proporcional a la magnetización total \hat{S}^z .

Sin embargo, el estado inicial $\hat{\rho}(t=0) \propto \hat{S}^z = \sum \hat{S}_i^z$ puede considerarse como una suma de espines magnetizados individuales. Cada espín individual experimentará una evolución y, tras la perturbación y la evolución hacia atrás, contribuyendo con el retorno de la magnetización no solo en su sitio original sino también en los espines vecinos. Nuestra hipótesis es que la principal contribución al eco global (magnetización total) surge de la magnetización individual de cada espín que regresa a sí mismo. Este concepto se ilustra esquemáticamente en la Fig. 5.1a. Conjeturamos que cualquier magnetización que no regresa al sitio original de espín se cancela entre sí, ya que arriba con fases “aleatorias”.

La secuencia de eco generalizada de la Fig. 5.1 produce una señal global observable denominada M_G , que se mide después de un pulso de lectura final (no representado en la figura). Este eco se puede resumir en la siguiente ecuación,

$$M_G(t, \phi) = \frac{1}{\text{Tr}\{\hat{S}^z \hat{S}^z\}} \text{Tr}\left\{\hat{S}^z(t) R^\dagger \hat{S}^z(t) R\right\} \quad (5.4)$$

donde $R = e^{-i\phi \hat{S}^z}$, $\hat{S}^z(t) = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{S}^z e^{i\hat{\mathcal{H}}t}$, y la normalización $\text{Tr}\{\hat{S}^z \hat{S}^z\} = N2^{N-2}$ asegura $M_G(0, \phi) = 1$. Aquí se puede observar que R y $\hat{S}^z(0)$ comutan, sin embargo, esto no es válido una vez que el estado ha evolucionado. En los experimentos, la fase ϕ se varía en $2^M > m_{max}$ pasos entre 0 y 2π , lo que permite la adquisición de la distribución de coherencias cuánticas múltiples $M_G(t, m)$ mediante la transformada de Fourier de las señales $M_G(t, \phi)$, con m que van desde $-m_{max}$ a m_{max} .

En la siguiente sección aclararemos la conexión entre la Ec. (5.4) con un OTOC global y lo reescribimos como una combinación de un conjunto de OTOC locales.

5.1.2. Observables Locales y Globales.

El eco, ec. (5.4), se puede expresar en términos de ecos locales y términos cruzados como,

$$M_G(t, \phi) = \frac{1}{N2^{N-2}} \text{Tr} \left\{ \hat{S}^z(t) R^\dagger \hat{S}^z(t) R \right\} \quad (5.5)$$

$$= \frac{1}{N2^{N-2}} \sum_{i,j} \text{Tr} \left\{ \hat{S}_i^z(t) R^\dagger \hat{S}_j^z(t) R \right\}$$

$$= \frac{1}{N2^{N-2}} \sum_i \text{Tr} \left\{ \hat{S}_i^z(t) R^\dagger \hat{S}_i^z(t) R \right\} + \frac{1}{N2^{N-2}} \sum_{j \neq i} \text{Tr} \left\{ \hat{S}_i^z(t) R^\dagger \hat{S}_j^z(t) R \right\}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_i (M_L^i(t, \phi) + M_{CT}^i(t, \phi)) \quad (5.6)$$

$$= M_L(t, \phi) + M_{CT}(t, \phi). \quad (5.7)$$

Mediante la transformación de Fourier del conjunto $M_G(t, \phi)$ con respecto a ϕ , se obtiene la distribución de coherencias cuánticas múltiples (MQC) $M_G(t, m)$. Desde los años 80, siguiendo el modelo de Baum y Pines [81], la investigación en RMN ha ampliamente establecido que el segundo momento de esta distribución se relaciona directamente con el número de espines correlacionados (también llamado tamaño de *cluster*), designado como K_G . Luego, como la distribución global de MQC se escribe en términos de contribuciones locales y cruzadas, $M_G(t, m) = M_L(t, m) + M_{CT}(t, m)$, podemos reformular el número global de espines correlacionados K_G :

$$\begin{aligned} K_G(t) &= 2 \sum_m m^2 M_G(t, m) \\ &= 2 \sum_m m^2 (M_L(t, m) + M_{CT}(t, m)) \\ &= K_L(t) + K_{CT}(t), \end{aligned} \quad (5.8)$$

donde explícitamente se discrimina la contribución al número de espines correlacionados proveniente de los ecos locales y los términos cruzados.

El tamaño de *cluster* global se puede expresar como OTOC (Apéndice D.1) [267],

$$K_G(t) = -\frac{2}{N2^{N-2}} \text{Tr} \left\{ [\hat{S}^z, \hat{S}^z(t)] [\hat{S}^z, \hat{S}^z(t)] \right\} \quad (5.9)$$

y de manera similar, se puede expresar la contribución local y cruzada (ver apéndice D.1

y D.2) de la siguiente forma:

$$K_L(t) = \frac{-2}{N2^{N-2}} \left(\sum_{i,k} \text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}_k^z, \hat{S}_i^z(t) \right]^2 \right\} + \sum_{\substack{i,q,k \\ q \neq k}} \text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}_q^z, \hat{S}_i^z(t) \right] \left[\hat{S}_k^z, \hat{S}_i^z(t) \right] \right\} \right) \quad (5.10)$$

$$K_{CT}(t) = \frac{-2}{N2^{N-2}} \sum_{\substack{i,j,k,q \\ i \neq j}} \text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}_q^z, \hat{S}_i^z(t) \right] \left[\hat{S}_k^z, \hat{S}_j^z(t) \right] \right\}. \quad (5.11)$$

Una característica interesante a tener en cuenta es que, así como el eco global se puede pensar como la suma de diferentes condiciones iniciales \hat{S}_i^z , también se puede hacer con $K_L(t)$ y $K_{CT}(t)$. Luego, se puede separar la suma de sitios i en las expresiones anteriores, definiendo los promedios en sitio:

$$\begin{aligned} K_G(t) &= \sum_i K_G^i(t)/N, \\ K_L(t) &= \sum_i K_L^i(t)/N, \\ K_{CT}(t) &= \sum_i K_{CT}^i(t)/N. \end{aligned}$$

Observe que si bien los OTOC locales correspondientes a un sitio i , $K_L^i(t)$ están compuestos de tanto los llamados [61] términos diagonales $\text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}_k^z, \hat{S}_i^z(t) \right]^2 \right\}$ como también de términos no diagonales $\text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}_q^z, \hat{S}_i^z(t) \right] \left[\hat{S}_k^z, \hat{S}_i^z(t) \right] \right\}$, la contribución cruzada correspondiente al sitio i , $K_{CT}^i(t)$, solo tienen términos no diagonales. En consecuencia, lo mismo es válido para sus promedios en sitio $K_L(t)$ y $K_{CT}(t)$.

Numéricamente, podemos calcular la contribución i de estas magnitudes $K_L^i(t)$, $K_G^i(t)$, $K_{CT}^i(t)$ usando la secuencia de eco que se muestra en la Fig. 5.1 para un estado inicial \hat{S}_i^z . Partiendo de una excitación localizada en el sitio i , y observando la evolución de la magnetización y el posterior retorno (eco) a cada sitio j , podemos reconstruir por separado $M_L^i(t, \phi)$ y $M_{CT}^i(t, \phi)$, lo que nos permite calcular los términos cruzados, locales y la suma de ambos, el OTOC global.

5.2. Resultados Numéricos.

Las magnitudes globales, locales y los términos cruzados descritos en la sección anterior se calcularon considerando un sistema de prueba como se muestra en la Fig. 5.1b. Este es un anillo de N espines 1/2 interactúan a través de un Hamiltoniano de Cuantos Dobles

5.2. RESULTADOS NUMÉRICOS.

de largo alcance,

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i h_i \hat{S}_i^z + \sum_{\substack{i,j \\ i < j}} D_{ij} \left[\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x - \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y \right]. \quad (5.12)$$

El Hamiltoniano de cuántos dobles se puede obtener experimentalmente utilizando las secuencias de 8 a 16 pulsos [263, 266], modificaciones a estas secuencias originales permiten generar interacciones escaladas [258].

Ampliando aún más las cualidades del modelado, vamos a asumir la interacción entre espines D_{ij} con diferentes dependencias de las “distancias de enlace” $D_{ij} = J/|r_{ij}|^\alpha$ para $\alpha = 1, 2, 3$, donde $\alpha = 3$ es el caso dipolar habitual. Es importante señalar que esta “distancia de enlace” r_{ij} se define como el número mínimo de sitios entre los dos espines en lugar de una distancia geométrica. Esta definición es fundamental para preservar la homogeneidad del sistema entre diferentes valores de N . Dado que utilizamos D_{ij} no aleatorios, es crucial introducir campos aleatorios h_i para romper la alta simetría del anillo y evitar recurrencias. Los mismos son muestrados uniformemente entre $[-J/2, J/2]$, los resultados en ausencia de campos Zeeman se muestran en el apéndice D.5. Las interacciones en los Hamiltonianos moleculares típicos tienen un signo que depende de la orientación del enlace con respecto al campo externo. Sin embargo, para los fines de este estudio, adoptamos una convención de signos uniforme, como sería el caso en un anillo de ferroceno [65, 100]. Además, exploramos la incorporación de asignaciones aleatorias a los signos en el acoplamiento, considerando $\alpha = 1$ como un caso paradigmático.

La excitación local inicial tiene la forma $\hat{\rho}_0 \propto \hat{S}_i^z$, y evoluciona, como en una secuencia MQC típica (Fig. 5.1a) con el Hamiltoniano definido en la ecuación (5.12). Dado que una forma de autopromedio está naturalmente presente en un observable global, se considera solo una realización del desorden. La evolución se realizó siguiendo el algoritmo de Trotter-Susuki [173, 268, 269] y de paralelismo cuántico [223, 230] (Ver apéndice E). Como se señaló anteriormente, al repetir las simulaciones para todos los posibles sitios iniciales i , se pueden calcular los ecos de Loschmidt tanto globales como locales y, consecuentemente, los OTOCs asociados.

5.2.1. Ecos y coherencias.

Las Figuras 5.2 (a) y (b) muestran los ecos $M_G(t, \phi)$ (curvas a trazos) obtenidos para un sistema de $N = 16$ espines con $\alpha = 3$, partiendo de la condición inicial (es decir, la excitación) en los diferentes sitios, i , y sumando todas las señales independientemente de en qué sitio se detecte. Esta magnitud global representa el observable experimental dado por la Ec. (5.4). Junto con el eco global, las Fig. 5.2 (a) y (b), también muestran el eco local $M_L(t, \phi)$ (curvas sólidas), únicamente accesible mediante simulación numérica, para diferentes perturbaciones (fases), en función del tiempo. A tiempos cortos, las diferencias entre los ecos locales y globales son perceptibles, pero estas se vuelven más pequeñas a medida que el sistema evoluciona, llegando a ser indistinguibles en a tiempos largos.

Al analizar la señal recuperada a un tiempo dado en función de fases, (Figs. 5.2(c-e)), queda claro que en tiempos cortos, (c), las diferencias entre lo global y lo local siguen siendo apreciables, pero disminuyen a medida que el sistema evoluciona. Esto se evidencia en los términos cruzados, que son prácticamente cero en (e). Este comportamiento

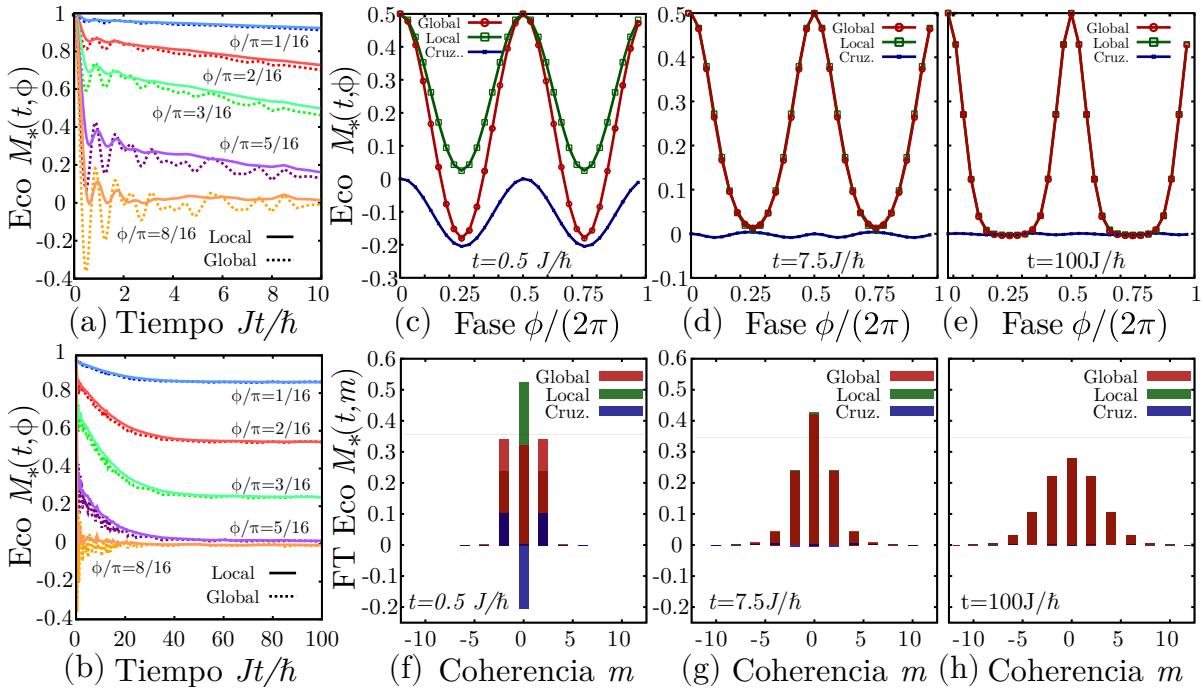


Figura 5.2: (a-b) Ecos globales $M_G(t, \phi)$ (curvas discontinuas) y locales $M_L(t, \phi)$ (curvas continuas), en función del tiempo para cinco valores representativos de $\phi = \{\pi/16, 2\pi/16, 3\pi/16, 5\pi/16, 8\pi/16\}$ (colores). El panel (a) muestra el comportamiento de los ecos en tiempos cortos e intermedios, mientras que el panel (b) muestra el decaimiento completo. (c-e) $M_G(t, \phi)$ (verde), $M_L(t, \phi)$ (rojo) y $M_{CT}(t, \phi)$ (azul) como función ϕ para tiempos fijos. (f-h) Distribución $M_G(t, m)$ (rojo), $M_L(t, m)$ (verde) y $M_{CT}(t, m)$ (azul) obtenidas al transformar Fourier las curvas (c-e). Los tiempos son (c/f) $t = 0.5J/\hbar$, (d/g) $t = 7.5J/\hbar$, (e/h) $t = 100J/\hbar$. Todos los paneles se calculan utilizando un anillo de espines con $N = 16$ y $\alpha = 3$.

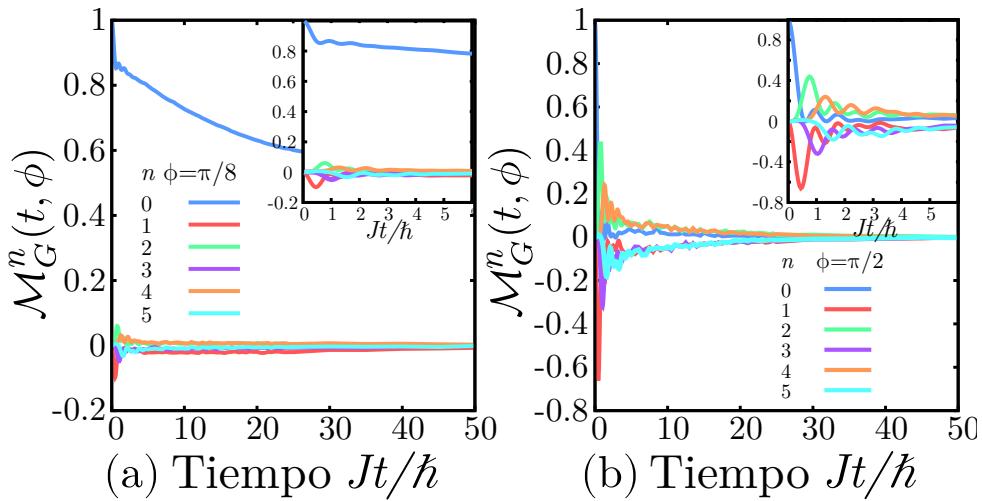


Figura 5.3: Eco promedio observado a una distancia n (colores) del sitio inicial en función del tiempo. El recuadro muestra los tiempos cortos. El panel (a) corresponde al valor de perturbación $\phi = \pi/8$, mientras que en el panel (b) a $\phi = \pi/2$. Los datos numéricos corresponden a un anillo de $N = 16$ con $\alpha = 3$.

5.2. RESULTADOS NUMÉRICOS.

temporal también se refleja en los aportes de los distintos términos, Global, G; Locales, L; y Cross-Terms, CT, a la distribución de coherencias, (f-h). Los segundos momentos de estas distribuciones nos permiten definir $K_G(t)$, $K_L(t)$ y $K_{CT}(t)$.

La figura 5.2 muestra resultados típicos que, aparte de la discriminación entre contribuciones locales y globales, son similares a los encontrados habitualmente en implementaciones experimentales. Sin embargo, al ser un estudio numérico, la disponibilidad de datos nos permite computar las contribuciones a los ecos globales $M_G(t, \phi)$ de los ecos observados a una distancia n del sitio inicial:

$$\mathcal{M}_G^n(t, \phi) = \frac{1}{N2^{N-2}} \sum_i \text{Tr} \left\{ (\hat{S}_{i+n}^z(t) + \hat{S}_{i-n}^z(t)) R^\dagger \hat{S}_i^z(t) R \right\} (1 - \delta_{n,0}/2). \quad (5.13)$$

Nótese que la contribución de los sitios $-n$ y n proviene de la geometría del anillo del sistema y significa una traslación de n sitios a la derecha e izquierda del sitio i . En la implementación numérica, la periodicidad de la indexación debe realizarse cuidadosamente. Por ejemplo, para un anillo de N espines $\mathcal{M}_G^0(t, \phi) = \frac{1}{N2^{N-2}} \sum_i \text{Tr} \{ \hat{S}_i^z(t) R^\dagger \hat{S}_i^z(t) R \}$ y $\mathcal{M}_G^1(t, \phi) = \frac{1}{N2^{N-2}} \sum_i \text{Tr} \{ (\hat{S}_{i+1}^z(t) + \hat{S}_{i-1}^z(t)) R^\dagger \hat{S}_i^z(t) R \}$, donde \hat{S}_{i+1}^z y \hat{S}_{i-1}^z representan el espín a la derecha e izquierda de i respectivamente.

Esta discriminación nos permite explorar nuestra hipótesis a un nivel más fundamental. Evaluando de qué manera la magnetización arriba a los sitios vecinos al inicial. El comportamiento de estos ecos se muestra en la Fig. 5.3 para dos perturbaciones diferentes. Se podría pensar que, como ocurre en el eco de polarización, lo que se pierde en el sitio original puede terminar como polarización en los espines vecinos. Sin embargo, en el Hamiltoniano DQ puede terminar en correlaciones que no observables. Algunas perturbaciones, como $\phi = \pi/2$, permiten convertir estas correlaciones en magnetización observada en los sitios vecinos. Estas correlaciones, sin embargo, desaparecen mucho antes de los tiempos de saturación. A tiempos cortos, es claro cómo el sistema está altamente correlacionado, observándose una polarización negativa que regresa a distancias impares n y una polarización positiva que llega a valores pares de n . Este efecto es más notable en la Fig. 5.3(b) debido a la magnitud de los ecos. Este máximo en el eco aparece en tiempos más prolongados a medida que n aumenta. Después de estos efectos transitorios, observamos que todos los ecos en $n \neq 0$ van a cero, como ya se insinuó en el análisis anterior.

5.2.2. Crecimiento, saturación y fluctuaciones en OTOCs locales y globales.

Los resultados anteriores muestran que la equivalencia entre OTOCs globales y locales se observa en nuestro sistema de prueba. A continuación se estudia sistemáticamente y la diferencia entre ambas magnitudes, variando el tamaño del anillo (N) y el rango de las interacciones (α).

Los tamaños de *cluster*, K_* con $* = \{G, L, CT\}$, se obtienen promediando las realizaciones individuales en diferentes sitios, K_*^i , que se ejemplifican en la Fig. 5.4 para $N = 12$ y $\alpha = \{1, 2\}$. Se observa que los K_*^i presentan el mismo comportamiento de los valores totales, pero difieren en las fluctuaciones. Por lo tanto, al promediar sobre los sitios iniciales, el efecto principal es mitigar estas fluctuaciones, lo que da como resultado curvas

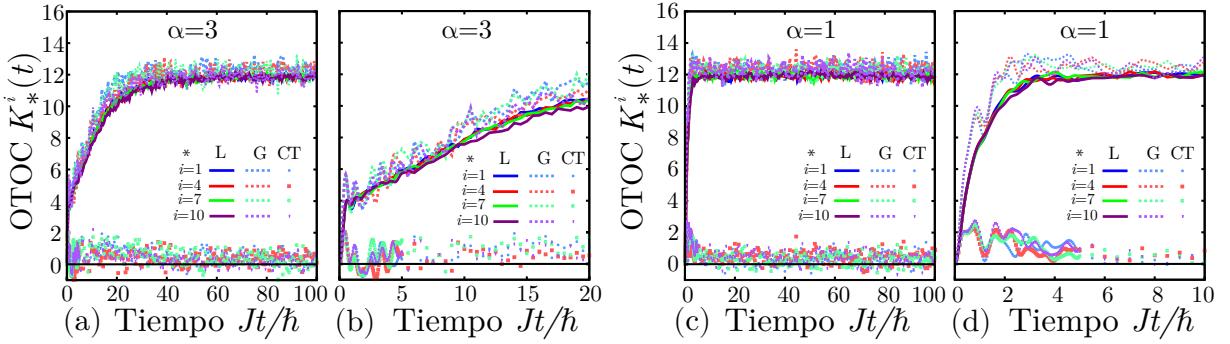


Figura 5.4: Realizaciones individuales por sitio, K_*^i , para un anillo de $N = 12$ espines, $D_{ij} = J/|r_{i,j}|^3$ para los paneles (a-b) y $D_{ij} = J/|r_{i,j}|$ para los paneles (c-d). El supraíndice i representa el sitio, mientras que el asterisco * indica si el OTOC es Global, G, Local, L o Cross Terms, CT. Los paneles (b) y (d) son una ampliación breve de las figuras (a) y (c), respectivamente.

más suaves.

La Figura 5.5 muestra la evolución temporal del número de espines correlacionados calculados a partir de ecos globales o locales, $K_G(t)$ y $K_L(t)$ (curvas a trazos y continuas respectivamente) para diferentes tamaños del anillo $N = 8 - 16$. De izquierda a derecha, la Fig. 5.5 muestra los resultados para todos los valores de α de 3 a 1, más $\alpha = 1$ con signos aleatorios. Observamos como, tras el régimen inicial, ambas curvas representan el crecimiento en el número de espines correlacionados y difieren en menos del 10 %. Usaremos el valor de saturación a largo plazo y sus fluctuaciones para cuantificar esta diferencia a medida que aumenta el número de espines en el sistema N . Al disminuir α , las magnitudes K_* alcanzan los valores de saturación en tiempos más cortos, debido a las interacciones más fuertes. Normalmente, los tiempos de saturación t_s son $Jt_s/\hbar \approx 50$ para la interacción $\propto 1/r^3$, $Jt_s/\hbar \approx 20$ para $\propto 1/r^2$ y $Jt_s/\hbar \approx 10$ para $\propto 1/r$, un análisis más detallado arrojaría t_s dependiendo de N y α . Podemos observar que tanto $K_G(t)$ como $K_L(t)$, al saturar, tienden hacia un valor cercano al tamaño del sistema N .

En el límite de α grande predomina la interacción entre vecinos cercanos, lo que lleva a un comportamiento tipo cadena. En este límite, el Hamiltoniano Doble Cuántico genera exclusivamente coherencias de segundo orden [216, 270–272], y la diferencia entre OTOC globales y locales debería ser más relevante. Por el contrario, en el límite de α muy pequeño, la interacción se extiende infinitamente, y en el caso de acoplamientos con signos aleatorios, debería comportarse como el modelo SYK [252]. El hecho de que para un sistema más grande los términos cruzados se vuelvan relativamente menos importantes significa que agregar vías a la dinámica aumenta las posibilidades de interferencias destructivas. Esto sugiere que las interferencias destructivas aumentarían al incorporar aleatoriedad en los acoplos, como se observa al incluir signos aleatorios en D_{ij} (Fig. 5.5(d)). De hecho, en un cristal real aparecen signos y magnitudes pseudoaleatorias debido a las diferentes direcciones del acoplamiento.

A tiempos cortos e intermedios, el crecimiento de los OTOC locales y globales es ligeramente diferente, como se muestra en la Fig. 5.6. Esta diferencia tiene su origen en los patrones de interferencia particulares en la dinámica de espín del Hamiltoniano DQ durante la inversión del tiempo. Las componentes que no regresan a sus sitios originales dentro de este breve período de tiempo exhiben una fuerte tendencia a regresar a sus

5.2. RESULTADOS NUMÉRICOS.

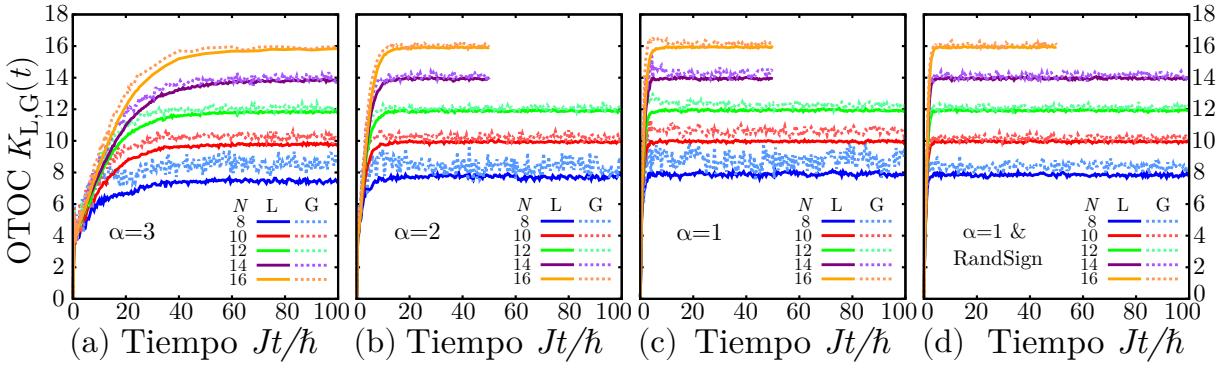


Figura 5.5: Evolución temporal de la OTOC local $K_L(t)$ (curvas continuas) y la OTOC global $K_G(t)$ (curvas discontinuas), para un sistema de anillos con interacciones dadas por la ecuación (5.12). Las interacciones son de la forma, (a) $D_{ij} \propto \frac{J}{|r_{ij}|^3}$, (b) $D_{ij} \propto \frac{J}{|r_{ij}|^2}$, (c) $D_{ij} \propto \frac{J}{|r_{ij}|}$, (d) $D_{ij} \propto \frac{\pm J}{|r_{ij}|}$ con signos aleatorios.

sitios adyacentes, con relaciones de fase específicas.

Matemáticamente, la diferencia a tiempos muy cortos se puede analizar usando la expansión de Baker-Campbell-Hausdorff [265]. Después de realizar alguna manipulación algebraica, se puede demostrar (como se detalla en el Apéndice D.3) que para el Hamiltoniano DQ, tanto el OTOC global como el local exhiben un comportamiento cuadrático en tiempos cortos, con coeficientes que difieren solo por un factor de dos:

$$K_G(t) \approx \frac{32}{N} t^2 \hbar^2 \sum_{i,j} D_{ij}^2, \quad (5.14)$$

$$K_L(t) \approx \frac{16}{N} t^2 \hbar^2 \sum_{i,j} D_{ij}^2. \quad (5.15)$$

En consecuencia, $K_L(t) \approx K_{CT}(t)$ en tiempos cortos. Estas expresiones han sido validadas numéricamente, como se muestra en la Fig. 5.6 (derecha). Además, es evidente que el crecimiento de los OTOC es más rápido cuando el exponente α se vuelve más pequeño, ya que aumenta el valor de $\sum_{i,j} D_{ij}^2$. Nótese que este comportamiento no cambia al incluir signos aleatorios en los valores de D_{ij} .

En tiempos intermedios, después de esta expansión cuadrática inicial, la complejidad del Hamiltoniano empieza a afectar la dinámica y la ley de crecimiento cambia dependiendo del exponente α , un comportamiento esperable teóricamente [273–276]. En la Fig. 5.6 observamos que esta ley de crecimiento para OTOC locales y globales muestra el mismo comportamiento, haciendo que la diferencia relativa $K_{CT}(t)/K_G(t)$ sea menor a medida que el sistema evoluciona. Sin embargo, la ventana de crecimiento relativamente pequeña del sistema estudiado hace difícil asignar una ley particular a cada Hamiltoniano, dejando solo el régimen saturado para estudiar sistemáticamente la dependencia de los términos cruzados $K_{CT}(t)/K_G(t)$ con N .

Para cuantificar la diferencia entre los OTOC locales y globales en tiempos largos, calculamos el promedio temporal del término cruzado en la saturación $\langle K_{CT}^i \rangle =$

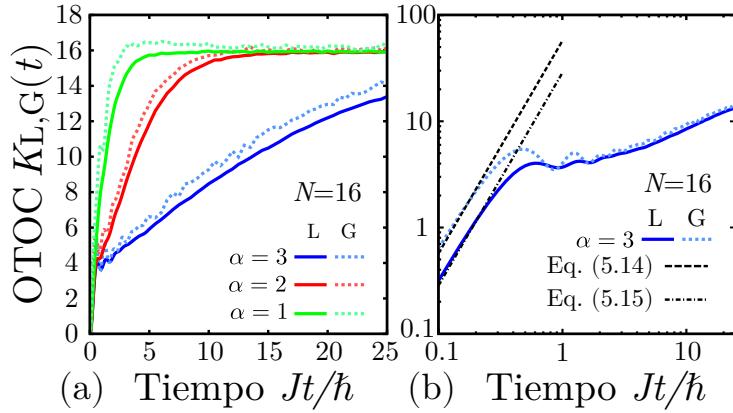


Figura 5.6: (a) Evolución de $K_L(t)$ (curvas continuas) y $K_G(t)$ (curvas discontinuas) para tiempos previos a la saturación. Interacciones de la forma $D_{ij} \propto 1/|r_{ij}|^\alpha$ con $\alpha = \{1, 2, 3\}$, y un anillo con $N = 16$. (b) Zoom del comportamiento a tiempo muy pequeño para $\alpha = 3$ en escala log-log. En líneas discontinuas negras se muestra la expresión analítica dada por la Ec. (5.14) y (5.15).

$\frac{1}{\tau} \int_{t_s}^{t_{max}} K_{CT}^i(t) dt$, donde t_{max} es el tiempo final en nuestra simulación y $\tau = t_{max} - t_s$, para varios tamaños de sistemas. En la Fig. 5.7, representamos estas magnitudes relativas al tamaño del sistema como una función de N , lo que puede interpretarse como el error relativo entre K_G y K_L , ya que N es aproximadamente su valor de saturación. Las contribuciones del sitio $\langle K_{CT}^i \rangle / N$ se muestran con cruces moradas, mientras que su promedio $\langle K_{CT} \rangle / N$ con puntos rojos. En todos los casos observamos que $\langle K_{CT} \rangle / N$ no sólo disminuye con N sino que también cada $\langle K_{CT}^i \rangle / N$ lo hace, esto implica que la equivalencia de la observación global o local es válida para cada estado inicial individual, sin necesidad de sumar todas las condiciones iniciales para tener el efecto. Las barras de error de los puntos rojos en la Fig. 5.7 corresponden a la desviación estándar normalizada $SD(K_{CT})/N$, donde

$$SD(K_{CT}) = \sqrt{\frac{1}{\tau} \int_{t_s}^{t_{max}} (K_{CT}(t) - \langle K_{CT} \rangle)^2 dt}, \quad (5.16)$$

cuantifica las fluctuaciones temporales alrededor del valor de saturación. Se utiliza una expresión equivalente para definir la desviación estándar del valor promedio de cada sitio $SD(K_{CT}^i)/N$, cuyo valor promedio se muestra en barras moradas desplazadas. Observamos que, así como $\langle K_{CT}^i \rangle / N$ disminuye cuando N aumenta, también lo hacen sus fluctuaciones, como se puede percibir en la Fig. 5.5. Las fluctuaciones en el comportamiento a tiempos largos de los OTOC se han asociado directamente con el caos, particularmente, cuanto más caótico es el sistema, menores son estas fluctuaciones [228]. Dado que las fluctuaciones de K_L son considerablemente menores que las fluctuaciones de K_G , podemos afirmar que $SD(K_G) \approx SD(K_{CT})$. En consecuencia, a medida que aumentamos N , los sistemas se vuelven más caóticos y los OTOC locales y globales se vuelven casi idénticos. Esto se evidencia por la disminución simultánea del valor promedio de $K_{CT}(t)$ y sus fluctuaciones.

Además, podemos ampliar el análisis a la magnitud de las fluctuaciones en los OTOC individuales y totales. Observamos que las fluctuaciones en $\langle K_{CT} \rangle$ son considerablemen-

5.2. RESULTADOS NUMÉRICOS.

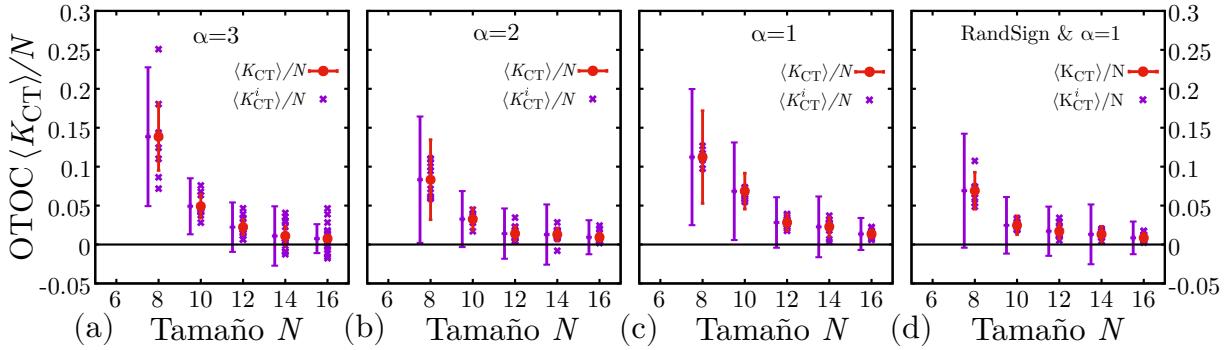


Figura 5.7: Promedio temporal de la contribución cruzada al número de espines correlacionados, $\langle K_{CT} \rangle / N$ (círculos sólidos rojos), en comparación con el promedio temporal de la contribución cruzada de un solo sitio, $\langle K_{CT}^i \rangle / N$ (cruces moradas). También se muestra la desviación estándar $SD(K_{CT}) / N$ (ec.(5.16), barras rojas), y la raíz cuadrada del promedio de varianza del sitio $\sqrt{\sigma_{CT}^2}$ (ec. (5.18), barras moradas) ligeramente desplazadas para mayor claridad. (a) $D_{ij} \propto 1/|r_{ij}|^3$ (b) $D_{ij} \propto 1/|r_{ij}|^2$, (c) $D_{ij} \propto 1/|r_{ij}|$, (d) $D_{ij} \propto \pm/|r_{ij}|$ con signos aleatorios.

te más pequeñas que la fluctuación de $\langle K_{CT}^i \rangle$. Es fácil ver que la relación entre ambas magnitudes se satisface,

$$\begin{aligned} SD^2(K_{CT}) &= \frac{1}{N^2} \sum_i SD^2(K_{CT}^i) \\ &+ \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \text{Cov}(K_{CT}^i(t), K_{CT}^j(t)) \\ &= \frac{\sigma_{CT}^2}{N} + \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \text{Cov}(K_{CT}^i(t), K_{CT}^j(t)) \end{aligned} \quad (5.17)$$

donde se denota

$$\overline{\sigma_{CT}^2} = \frac{1}{N} \sum_i SD^2(K_{CT}^i). \quad (5.18)$$

La línea superior representa un promedio sobre los sitios iniciales (barras moradas en la figura 5.7). Por lo tanto, si no hubiera correlación entre diferentes $K_{CT}^i(t)$, tendríamos $SD^2(K_{CT}) = \overline{\sigma_{CT}^2}/N$. Esta última expresión se muestra válida en el límite de N grande, como se puede ver en el Apéndice D.4. De hecho, vemos que la correlación total (suma de las covarianzas) disminuye muy rápidamente con N . Para $N = 14$ ya son del mismo orden que nuestra precisión estadística. Particularmente para el Hamiltoniano que incluye signos aleatorios en D_{ij} , la correlación entre diferentes $K_{CT}^i(t)$ esto sucede para $N = 12$. Igualmente, se observa que la dispersión entre los valores de $\langle K_{CT}^i \rangle / N$ es menor cuando α es menor. Esto se puede racionalizar pensando que para α grandes los espines están menos interconectados y las fluctuaciones del sitio, observadas en cada $\langle K_{CT}^i \rangle / N$, dependen en gran medida de los campos locales h_i afectando al espín y sus vecinos.

La figura 5.8 muestra el valor promedio $\langle K_{CT} \rangle / N$ en escala logarítmica, donde destaca el decaimiento discutido anteriormente. Si bien los tamaños no son lo suficientemente grandes como para que los ajustes discriminan entre la caída exponencial o una ley de

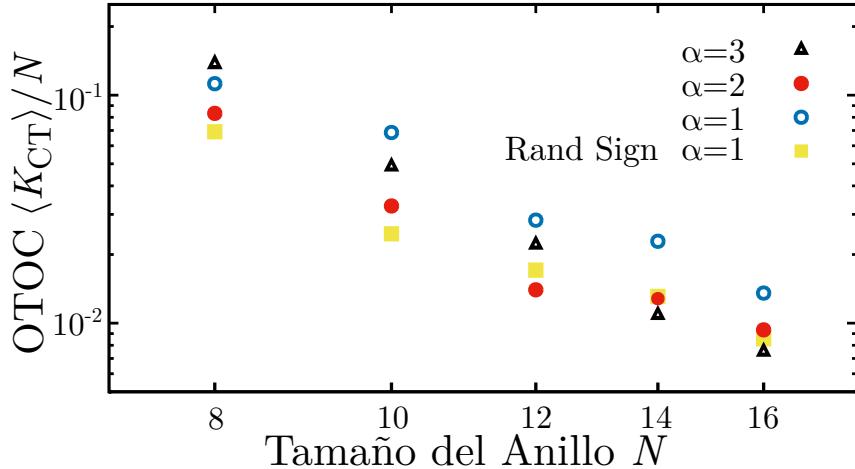


Figura 5.8: Valor de saturación $\langle K_{CT} \rangle / N$ en escala log-log para anillos de espín que interactúan con el Hamiltoniano (5.12), con $D_{ij} = 1/r_{ij}^\alpha$ por $\alpha = 1, 2, 3$.

potencial, en el último caso, el exponente de este decaimiento podría variar entre $-4, 3$ y $-3, 1$. Para sistemas completamente aleatorios se espera una caída exponencial resultante de una distribución homogénea de los estados en el espacio de Hilbert. Sin embargo, para un Hamiltoniano DQ se espera que las regiones del espacio de Hilbert correspondientes a una magnetización total tengan una distribución normal, como es reflejado en la distribución de coherencias cuánticas. Bajo este supuesto, es razonable que la caída con N siga una ley de potencia en lugar de una ley exponencial. Independientemente de la forma particular del decaimiento, la disminución en la magnitud de los términos cruzados con N deja evidencia de que, en sistemas cuya complejidad es lo suficientemente fuerte como para generar dinámicas caóticas, los ecos globales están compuestos por una simple suma de ecos locales. Las contribuciones provenientes de fuera del sitio original serán totalmente descorrelacionadas (pseudoaleatorias) y a tiempos largos se cancelarán entre sí. Por lo tanto, los OTOC locales y globales proporcionarán la misma información.

5.3. Conclusiones.

Este capítulo, hemos evaluado la hipótesis, nacida a partir de resultados obtenidos en experimentos de RMN [79], de que la evolución (y magnitud) de OTOCs locales y globales se vuelve equivalente a medida que la complejidad y el tamaño del sistema crecen. Específicamente, hemos investigado la evolución de los ecos generados por la secuencia de coherencias cuánticas múltiples y el conteo del número de espines correlacionados derivados de la misma. Analíticamente, hemos demostrado que tanto las magnitudes globales como las locales están compuestas por términos locales y cruzados, donde esperamos que (los últimos) sean despreciables al aumentar el tamaño y la complejidad del sistema.

A través de la evaluación numérica en un anillo de espines interactuantes con variantes del Hamiltoniano de cuantos dobles, observamos que la evolución del número de espines correlacionados obtenido a partir de la secuencia MQC presenta un comportamiento similar independientemente de si se utilizan observables globales o locales. Tanto las magnitudes globales $K_G(t)$ como las locales $K_L(t)$ siguen una misma ley de crecimiento después de un

5.3. CONCLUSIONES.

régimen inicial, lo que nos permite asociar ambas medidas al crecimiento del número de espines efectivamente acoplados. La discrepancia $K_{CT}(t) = K_G(t) - K_L(t)$ se vuelve rápidamente menor al 10 %, lo que permite, para todo fin práctico, asignar cualquier de estos valores al número preciso de espines correlacionados por la evolución de una excitación local.

Después de un breve transitorio inicial, tanto los valores de las correlaciones cruzadas, K_{CT} , responsables de la discrepancia en observables locales y globales, como sus fluctuaciones tienden a cero. Esto respalda la idea de asignar a los observables globales determinados experimentalmente (LE y MQC), el significado local que nos interesa físicamente. La interpretación de las mediciones locales está, consecuentemente, bien respaldada. Por otra parte, esto resulta consistente con los resultados de Zhou y Swingle, Ref. [61], donde se estudia la contribución de las correlaciones “diagonales” y “no diagonales” en un sistema de espín. De hecho, sus resultados implican, parcialmente, los nuestros. Esto se debe a que el tamaño del sistema local ($K_L(t)$) contiene toda la contribución de los OTOC “diagonales” (junto con algunos “no diagonales”), mientras que lo que nosotros denominamos correlaciones cruzadas ($K_{CT}(t)$) está compuesto únicamente por términos “fuera de la diagonal” (Ec. (5.11)).

Nuestro enfoque destaca que la equivalencia de los OTOCs locales y globales se origina en la cancelación de las contribuciones a la señal de eco que llegan de sitios distintos al de la excitación inicial. En este caso, se observa un doble efecto: por un lado, la dinámica de muchos cuerpos impide directamente el retorno de parte del estado evolucionado; por otro lado, las partes de la polarización que efectivamente pueden revertirse llegan con fases pseudoaleatorias a los sitios vecinos, anulándose entre sí.

Este análisis le da un sustento analítico y numérico a la interpretación de muchos procedimientos experimentales, donde se asume el mismo comportamiento del OTOC global y el local.

Las contribuciones originales de este capítulo se encuentran en preparación para su presentación en una revista académica.

Capítulo 6

Conclusiones.

A lo largo de esta tesis, más allá de las conclusiones específicas alcanzadas en cada capítulo, me parece fundamental resaltar el valor de los modelos “simples”. Estos modelos, caracterizados por contener los ingredientes mínimos para manifestar un efecto particular, desempeñan un papel fundamental en la comprensión de fenómenos físicos. Mucha física se puede entender desde el análisis de un péndulo o de un sistema de dos niveles (dos péndulos). Aunque siempre existe la posibilidad de aumentar la complejidad, incorporar nuevos ingredientes y añadir detalle según sea necesario, es crucial reconocer que, en la mayoría de los casos, una comprensión profunda de los sistemas simples constituye la base para entender fenómenos más complejos e incluso para construir nuevos modelos *a piacere*.

En esta tesis, esta visión fue una prioridad, comenzamos en el Capítulo 2 con un modelo de enlaces fuertes (*Tight-Binding*) de una partícula. La elección del potencial de HHAA nos permitió tener una transición de fase a un valor finito de la amplitud del potencial sin necesidad de recurrir a un modelo 3D, lo que hubiera sido numéricamente muy costoso. Para nuestra motivación esto era suficiente, aunque generalizaciones directas del modelo permitirían agregar, por ejemplo, bordes de movilidad [108, 235]. Las ideas utilizadas para caracterizar la dinámica son, también, relativamente simples. La caracterización de la dinámica a tiempos largos para la región extendida se basó en una extensión directa de la solución para una cadena ordenada y una cadena dimerizada. En el punto crítico, aprovechamos desarrollos perturbativos y un juego entre las escalas de tiempo dadas por las energías de los sitios y la magnitud del acoplamiento intersitio (*hopping*) nos llevó a una expresión analítica para el coeficiente de difusión. Esta estrategia, i.e considerar un sistema simple, nos permitió diseñar un OTOC para extraer información del desparramo espacial de la excitación accediendo a un único sitio del sistema, sin la necesidad de lidiar con la complejidad de cadenas de operadores de Pauli, simplemente implementando proyecciones sobre cada sitio. Al interpretar al OTOC como un experimento de Loschmidt echo donde el estado inicial evoluciona, es perturbado y evoluciona hacia atrás, es intuitivo pensar, que si deseamos extraer información del desparramo espacial, es necesario que esta perturbación marque de manera distinta cada parte de la cadena. El uso de un gradiente de campo es la forma más simple, y nos permite obtener tanto el IPR como el segundo momento de la función de onda. No obstante, el eventual uso de otras perturbaciones, por ejemplo otras dependencias en n del campo aplicado, nos permitirían extraer información complementaria.

En el Capítulo 3, los efectos de un ambiente son incorporados a la cadena de HHAA, de una forma sencilla: como un ruido totalmente descorrelacionado. Esto genera, para tiempos mayores al de decoherencia, una dinámica difusiva. Si el menor tiempo característico es el de la decoherencia observamos que el coeficiente de difusión decrece con el inverso de la magnitud de este tiempo, lo que puede verse como una manifestación del efecto Zenón cuántico, donde el ambiente limita cualquier dinámica. Para magnitudes de decoherencias menores, el coeficiente de difusión siempre decrece con la decoherencia en el régimen extendido, mientras que en el régimen localizado aumenta, ya que las fluctuaciones ambientales impiden la localización de las excitaciones sistema. En el punto crítico, donde la dinámica coherente ya es inherentemente difusiva, el coeficiente de difusión se mantiene aproximadamente constante hasta entrar en el régimen de Zenón cuántico. La observación de esta estabilidad nos llevó a discutir (acaloradamente) sobre si el origen de la misma era propia del punto crítico o heredada de la difusión coherente. Esto nos llevó a buscar otros Hamiltonianos modelo (con y sin transiciones de fase) que presenten difusión coherente. Simultáneamente, buscamos entender cómo se relacionan el coeficiente de difusión, la dinámica y el ambiente.

Nuestra primera estrategia fue pensar que el ambiente realiza mediciones a tiempos fijos. Si bien esta visión “básica” del efecto del ambiente es suficiente para explicar el comportamiento del coeficiente de difusión en los regímenes extremos, la misma fue refinada para incluir una distribución de probabilidad más realista en los tiempos de medición. Este último enfoque resultó muy efectivo para reproducir resultados numéricos del coeficiente de difusión a partir de la dinámica coherente. Esto sugiere que es la difusión coherente lo que origina la estabilidad observada.

Para generar otros Hamiltonianos modelo con difusión, nuestro primer abordaje fue construir sistemas quasi-1D, donde, eligiendo adecuadamente su número de canales disponibles para el transporte y la magnitud del desorden podíamos generar dinámicas aproximadamente difusivas en un rango de tiempo suficiente para su cómputo. Si bien estos modelos pueden ser bastante cercanos sistemas realistas, los resultados no fueron incluidos en esta tesis debido a que los modelos de Fibonacci y PBRM presentan una dinámica difusiva más limpia y con menor costo computacional. En el caso del PBRM, un análisis de la relación entre los parámetros del sistema, el tamaño del mismo, y la velocidad de la dinámica, nos permitió aumentar la ventana de tiempo donde la difusión es claramente observable. Esto es necesario para testear la estabilidad del coeficiente de difusión para distintas magnitudes del ambiente. En estos modelos, no solo corroboramos el comportamiento anticipado por el modelo de colapso, sino que también confirmamos la dependencia universal en régimen difusivo: el coeficiente de difusión como función de la magnitud de la decoherencia sigue una curva universal una vez que estas magnitudes son reescaladas con las características intrínsecas de cada sistema.

Esta difusión estable podría tener implicancias directas en muchos sistemas físicos y biológicos, como cadenas de espines interactuantes, átomos fríos, cadenas poliméricas, microtúbulos y cadenas de ADN. Esta robustez frente a la decoherencia, se ve reflejada en diferentes efectos en el sistema, en particular en el decaimiento del LE a tiempos largos (Pureza), el cual, a tiempos largos, entra en un decaimiento independiente de la magnitud de la decoherencia. Sin embargo, este régimen es intrínsecamente distinto del decaimiento independiente de la perturbación inducido por el caos propuesto por Jalabert & Pastawski [67], ya que corresponde a un decaimiento totalmente incoherente.

Esperamos que la inclusión de cierta correlación espacial en el ruido podría llevarnos al decaimiento independiente de perturbación en analogía con el resultado pronosticado en [67]. No obstante, el estudio del LE se vuelve imprescindible para diferenciar el origen de la difusión: si la dinámica difusiva es coherente el LE es cercano a 1 mientras que, cuando es inducida por un ambiente, se inicia como una exponencial antes de convertirse en ley de potencias que indica la casi total aleatoriedad del retorno.

En el Capítulo 4, se extiende el OTOC (GEA) desarrollado en el Capítulo 2 a sistemas de espines interactuantes, estudiando sus diferencias con el equivalente de un cuerpo. Si bien aparecen tanto diferencias cualitativas como cuantitativas, la secuencia GEA sigue siendo efectiva para estudiar la localización espacial de excitaciones en sistemas unidimensionales. En el caso de un sistema de espines, el término central del espectro obtenido deja de ser el IPR para aproximarse a la suma de las magnetizaciones al cuadrado; el segundo momento de este espectro ya no tiene una exacta correspondencia con la varianza de la distribución de magnetizaciones, sino que se corresponde con el OTOC $\text{Tr} \left\{ [\hat{\mathcal{H}}_g, \hat{\rho}(t)] \right\}$. Numéricamente, el crecimiento exponencial del espacio de Hilbert nos limita a trabajar con cadenas de hasta 19 espines. Por esta razón, la secuencia fue testeada en primera instancia para una cadena corta (7 espines) con tres Hamiltonianos de interacción basados en la cadena de HHAA. Uno de ellos, no-interactuante, tiene una correspondencia unívoca con la cadena HHAA. El segundo incluye interacciones MB que conservan la magnetización total. El tercero no conserva la magnetización total. El segundo Hamiltoniano representa una cadena de HHAA generada por campos Zeeman locales e acoplamientos XY, a los que se añaden interacciones tipo Ising (MB). En este caso, realizamos un análisis exhaustivo sobre el efecto de incluir estas interacciones. Luego de verificar que la suma de las magnetizaciones (S^2) y el término central de la GEA son aproximadamente iguales; estudiamos la dinámica y valores de equilibración de S^2 variando la magnitud de las interacciones de Ising. Observamos que las interacciones MB ayudan a la deslocalización del sistema, moviendo el “valor crítico” del potencial a amplitudes mayores. Sin embargo, si las interacciones son fuertes ($U \gg J$), las mismas dificultan la dinámica de excitaciones en el sistema, desplazando nuevamente el “valor crítico” hacia valores menores de la magnitud de la modulación local. Dinámicamente, en las cercanías de la transición entre estados extendidos y localizados observamos un acercamiento muy lento (ley de potencias) hacia los valores de equilibrio, lo que dificulta determinar el valor crítico del potencial. A futuro sería interesante realizar un estudio similar, pero computando los valores derivados de la secuencia GEA. Esto podría representar una nueva fuente de información; particularmente tomando provecho del segundo momento de esta distribución.

Finalmente, en el Capítulo 5, buscamos evaluar la equivalencia de OTOCs globales y locales en experimentos de RMN. En particular, un OTOC global (K_G) derivado de la secuencia de coherencias cuánticas múltiples, cuantifica el número de espines correlacionados de la misma manera que su versión local K_L , en principio solo accesible de manera numérica. Intuitivamente, uno espera que la equivalencia de estos OTOCs sea una propiedad intrínseca de los propios experimentos de eco de Loschmidt dados por la secuencia de MQC. En este caso, cada eco observando es consecuencia los términos locales de estos ecos, resultando despreciables las contribuciones cruzadas. Cuantitativamente, un poco de álgebra nos permite, al ser lineal la relación entre los ecos globales observados y su correspondiente K_G , separar las contribuciones de ecos locales y cruzados a K_G , determinando

la cancelación de los términos cruzados.

En la práctica, es imposible simular un experimento de RMN, principalmente debido al número macroscópico de espines y toda la riqueza de su dinámica. En consecuencia, nuestra evaluación numérica, debe ser restringida a no mucho mas de una docena de espines, en lo posible conteniendo algunos de los elementos necesarios para representar un sistema real. Por esto, elegimos testear la equivalencia entre observables locales y globales considerando anillos de espines con interacciones a largo alcance dadas por el Hamiltoniano de Cuantos Dobles y desorden Zeeman de sitio. La elección de un anillo frente a una cadena se debe a que buscamos que todos los sitios sean equivalentes, minimizando los efectos de borde y facilitando el análisis al incrementar N . Sin embargo, es crucial que sean equivalente pero no iguales, a modo de evitar las recurrencias propias de sistemas con alta simetría, lo que se logra introduciendo desorden de sitio. La interacción de largo alcance permite la creación de coherencias de orden mayor a dos, como se observa experimentalmente. Nuestros resultados numéricos confirman que a medida que se aumenta el tamaño del sistema y la complejidad de las interacciones, el OTOC local y el OTOC global se vuelven equivalentes; es decir, la diferencia entre los mismos tiende a cero con N . Este resultado es fundamental para la interpretación de la dinámica que controla el desparramo (efecto mariposa) que resulta de los experimentos, especialmente de aquellos que verifican la Hipótesis Central de Irreversibilidad [6, 79].

Sintetizando, a lo largo de esta tesis hemos explorado dinámicas cuánticas generadas en una variedad de condiciones: sistemas tanto cerrados como abiertos, de una sola partícula y de muchos cuerpos. Asimismo, hemos examinado distintas formas de extraer información de estos sistemas, tanto directamente de la dinámica como mediante de diferentes OTOCs y de ecos de Loschmidt. Cada análisis nos ha proporcionado una comprensión más profunda de los procesos involucrados los sistemas estudiados. Mirando hacia adelante, se abren múltiples caminos para futuras investigaciones:

- Introducir correlaciones en el ruido ambiental de manera de que la decoherencia no impida la reversión de la dinámica de las excitaciones, al menos dentro de una longitud de correlación. Esto permitiría de explorar el decaimiento independiente de perturbación sugerido en [67] ya adentrados en el régimen cuánticamente difusivo.
- Explorar la estabilidad de la dinámica difusiva ante la introducción de interacciones MB, de un ambiente correlacionado, o directamente un ambiente con una dinámica no-Markoviana.
- Introducir ruido Zeeman en la dinámica de un sistema MB y posibilitar la generalización del Quantum-Drift para su implementación numérica.
- Observar el efecto de fluctuaciones en los campos Zeeman (ruido), en la dinámica de OTOCs en un sistema many-body; en particular, en el crecimiento del número de espines correlacionados y la equivalencia entre los OTOCs globales y locales en estas condiciones.
- Evaluar la Hipótesis Central de Irreversibilidad en los sistemas anteriores mediante un crecimiento sistemático de la complejidad del sistema (incluyendo un aumento del tamaño) y una simultánea reducción del acoplamiento con el ambiente.

Apéndice A

Segundo momento del espectro GEA.

En este apéndice se presenta con mayor detalle el cálculo del segundo momento del espectro GEA, tanto para el caso de una partícula como para su generalización a sistemas de espines.

A.1. Un cuerpo.

De la evaluación del eco proveniente de la secuencia ZOGE, Ec. 2.29 y 2.30, tenemos:

$$M(t, \varphi) = \sum_{m,n} |b_n(t)|^2 |b_m(t)|^2 e^{-i\varphi(m-n)} = \sum_j Q_j e^{-i\varphi j}, \quad (\text{A.1})$$

se puede observar que el segundo momento del espectro observado (Q_j) corresponde al segundo momento de la función de onda. Para esto, vanta evaluar la derivada segunda del eco respecto a φ , evaluada en $\varphi = 0$:

$$-\frac{\partial^2 M(t, \varphi)}{\partial \varphi^2} \Big|_{\varphi=0} = \sum_j Q_j j^2 = \sum_{m,n} |b_n(t)|^2 |b_m(t)|^2 (m - n)^2 \quad (\text{A.2})$$

$$= \sum_{m,n} |b_n(t)|^2 |b_m(t)|^2 (m^2 - 2nm + n^2) \quad (\text{A.3})$$

$$= 2 \sum_n |b_n(t)|^2 n^2 - 2 \left(\sum_n n |b_n(t)|^2 \right)^2 \quad (\text{A.4})$$

$$= 2\sigma_0^2(t), \quad (\text{A.5})$$

donde hemos utilizado $\sum_m |b_m(t)|^2 = 1$. Este resultado es válido no solo para una condición inicial localizada, sino para todo estado inicial puro.

A.2. Sistemas de espines.

Generalizando a sistemas de espines tenemos:

$$M(t, \varphi) = \frac{1}{\text{Tr}\{(\hat{S}_0^z)^2\}} \text{Tr} \left\{ e^{i\varphi \hat{\mathcal{H}}_g} \hat{S}_0^z(t) e^{-i\varphi \hat{\mathcal{H}}_g} \hat{S}_0^z(t) \right\} = \sum_j \tilde{Q}_j e^{-i\varphi j} \quad (\text{A.6})$$

nuevamente, basta derivar dos veces respecto φ y evaluar en cero para obtener el segundo momento de la distribución de \tilde{Q}_j .

$$\sum_j \tilde{Q}_j e^{-i\varphi j} = - \frac{\partial^2 M(t, \varphi)}{\partial \varphi^2} \Big|_{\varphi=0} = \frac{2}{\text{Tr}\{(\hat{S}_0^z)^2\}} \text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{H}}_g \hat{S}_0^z(t) \hat{\mathcal{H}}_g \hat{S}_0^z(t) \right\} \quad (\text{A.7})$$

$$= \frac{2}{\text{Tr}\{(\hat{S}_0^z)^2\}} \text{Tr} \left\{ [\hat{\mathcal{H}}_g, \hat{S}_0^z(t)]^2 \right\}. \quad (\text{A.8})$$

Apéndice B

Corriente Estacionaria y Fórmula de Green-Kubo.

En la primera sección de este apéndice definimos la corriente en estado estacionario y derivamos una expresión aproximada de la corriente en función del coeficiente de difusión. Los resultados aquí descritos han sido realizados por Emilio Álvarez Navarro como parte de su tesis de maestría [179].

En la segunda sección mostramos como calcular el coeficiente de difusión a partir utilizando los autoestados y autoenergías del sistema, a partir de la fórmula de Green-Kubo.

B.1. Corriente Estacionaria.

Para generar una corriente, se coloca una fuente y un sumidero de excitaciones (incoherentes) en los bordes de la cadena. Esto se modela incluyendo términos adicionales en la ecuación maestra de Lindblad (Ec. (3.1)), que se convierte en

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \mathcal{L}[\hat{\rho}] = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}] + \mathcal{L}_\phi[\hat{\rho}] + \mathcal{L}_p[\hat{\rho}] + \mathcal{L}_d[\hat{\rho}], \quad (\text{B.1})$$

donde $\hat{\mathcal{H}}$ es el Hamiltoniano de la cadena, $\mathcal{L}_\phi = -\frac{\gamma_\phi}{2\hbar} \sum_{n=1}^N [|n\rangle \langle n|, [|n\rangle \langle n|, \hat{\rho}]]$ es el disipador del texto principal, mientras que los términos adicionales,

$$\mathcal{L}_p[\hat{\rho}] = \frac{\gamma_p}{\hbar} \left(|1\rangle \langle 0| \hat{\rho} |0\rangle \langle 1| - \frac{1}{2} |0\rangle \langle 0| \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} |0\rangle \langle 0| \right), \quad (\text{B.2})$$

y

$$\mathcal{L}_d[\hat{\rho}] = \frac{\gamma_d}{\hbar} \left(|0\rangle \langle N| \hat{\rho} |N\rangle \langle 0| - \frac{1}{2} |N\rangle \langle N| \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} |N\rangle \langle N| \right), \quad (\text{B.3})$$

son dos operadores modelando el bombeo en el primer sitio ($|1\rangle$) y el drenaje desde el último sitio ($|N\rangle$). Aquí $|0\rangle$ es el estado de vacío, donde no hay excitación presente en el sistema [137, 277]. Para simplificar, las tasas de bombeo y drenaje se establecen para que sean iguales en magnitud ($\gamma_p = \gamma_d$). Al resolver la ecuación (B.1) en estado estacionario

B.1. CORRIENTE ESTACIONARIA.

$(\mathcal{L}[\hat{\rho}_{ss}] = 0)$ se puede calcular la corriente estacionaria,

$$I_{ss} = \frac{\gamma_d}{\hbar} \langle N | \hat{\rho}_{ss} | N \rangle, \quad (\text{B.4})$$

siendo $\hat{\rho}_{ss}$ el operador de densidad de estado estacionario [137, 277].

B.1.1. Corriente en estado estacionario: método de tiempo de transferencia promedio.

Dado que el enfoque de la ecuación maestra discutido anteriormente es numéricamente costoso, para N grandes utilizamos el método de *tiempo de transferencia promedio* (ATT), como se describe en [137]. El tiempo promedio de transferencia τ se define como

$$\tau = \frac{\gamma_d}{\hbar} \int_0^\infty t \langle N | \exp(-\mathcal{L}_{\text{eff}}t) \hat{\rho}(0) | N \rangle dt = \frac{\gamma_d}{\hbar} \langle N | \mathcal{L}_{\text{eff}}^{-2} \hat{\rho}(0) | N \rangle. \quad (\text{B.5})$$

donde \mathcal{L}_{eff} es Ec. (B.1) *sin el termino de bombeo*.

En [137] se ha demostrado que la corriente de estado estacionario determinada a partir de la ecuación maestra (B.1) *en ausencia de desfase* depende únicamente del tiempo promedio de transferencia, es decir

$$I_{ss} = \frac{\gamma_p}{\gamma_p \tau + \hbar}. \quad (\text{B.6})$$

Hemos verificado numéricamente que la Ec. (B.6) es válida también en presencia de desfase, por lo que a continuación la usamos debido a su menor complejidad numérica junto con una construcción heurística, que se detalla a continuación.

Construcción heurística del tiempo de transferencia medio.

El método ATT nos brinda la posibilidad de construir heurísticamente el tiempo medio de transferencia considerando los tiempos característicos de difusión y drenaje inducidos por desfase.

Dado que en equilibrio la probabilidad de estar en el sitio N es $1/N$ y la tasa de drenaje es γ_d/\hbar , podemos estimar el tiempo de drenaje como $\hbar N/\gamma_d$. Luego, para determinar el tiempo de difusión, sabemos que una excitación se mueve de un sitio a un vecino con un tiempo promedio $a^2/(2D)$. Además, la excitación se mueve como un paseo aleatorio y el número total de pasos requeridos en 1D es $N(N - 1)$. Por lo tanto, estimamos el tiempo de difusión como $N(N - 1)a^2/(2D)$ [278, 279]. Así, sumando el tiempo de drenaje y el tiempo de difusión tenemos

$$\tau = \hbar \frac{N}{\gamma_d} + \frac{(N - 1)N}{2D} a^2. \quad (\text{B.7})$$

La Figura B.1a compara I_{ss} en función de la decoherencia calculada usando los tres métodos discutidos arriba: la solución estacionaria de la ecuación maestra (B.1) (ME), el método ATT (B.5-B.6), y la fórmula heurística (B.7). En este último caso, el coeficiente

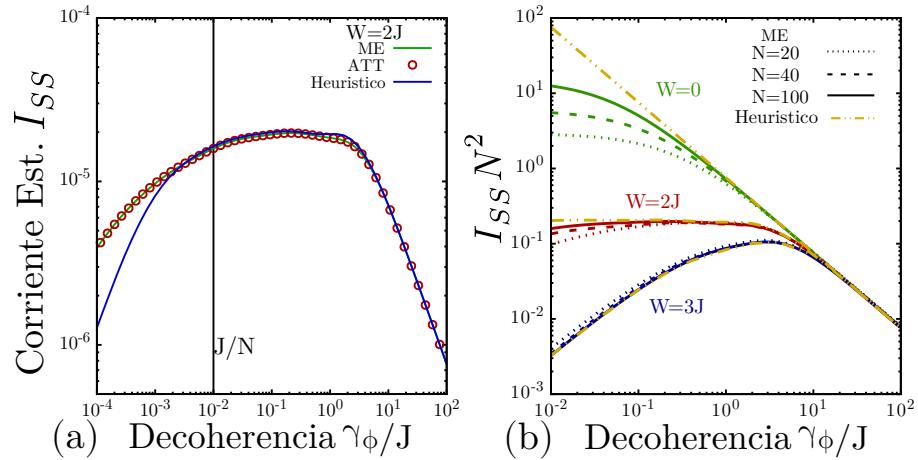


Figura B.1: (a) Corriente de estado estacionario vs. γ_ϕ/J para el modelo HHAA para $N = 100$ y $W = 2J$ obtenido con tres métodos diferentes: (i) Ecuación maestra (ME, curva verde (gris claro)), (ii) método del tiempo de transferencia promedio (ATT, círculos rojos) y (iii) expresión heurística (Ec. (B.7), azul (gris oscuro) curva). (b) Corriente de estado estacionario reescalada $I_{SS}N^2$ en función del desfase (γ_ϕ/J) en los regímenes extendido, crítico y localizado (colores/gris) para diferentes tamaños de sistemas $N = \{20, 40, 100\}$. $I_{SS}N^2$ se calcula utilizando el método ME y se muestra con diferentes tipos de guiones dependiendo de N . La estimación (heurística) basada en el coeficiente de difusión de la corriente para $N = 1000$ se incluye con curvas de puntos y guiones amarillos (gris claro).

de difusión D se ha calculado utilizando el enfoque de Green-Kubo, discutido en la sección siguiente.[Ec. (3.2)]. Se observa una buena concordancia general entre los tres enfoques. Las desviaciones con un desfase pequeño se deben al tamaño finito del sistema ($N = 100$), por lo que la excitación alcanza balísticamente el borde de la cadena en un tiempo menor que $\tau_\phi = \hbar/\gamma_\phi$.

B.2. Fórmula de Green-Kubo.

El coeficiente de difusión D en presencia de decoherencia para el modelo de Haken-Strobl se puede calcular a partir de la expresión de Green-Kubo, utilizando solo las (ε_μ) autoenergías y los autoestados (ϕ^μ) del Hamiltoniano,

$$\hat{\mathcal{H}}\phi^\mu = \varepsilon_\mu\phi^\mu. \quad (\text{B.8})$$

Siguiendo la derivación de Ref. [167]:

$$D(\vec{u}) = \frac{\hbar}{N} \sum_{\mu,\nu=1}^N \frac{\gamma_\phi}{\gamma_\phi^2 + \omega_{\mu,\nu}^2} |\hat{j}_{\mu,\nu}(\vec{u})|^2, \quad (\text{B.9})$$

B.2. FÓRMULA DE GREEN-KUBO.

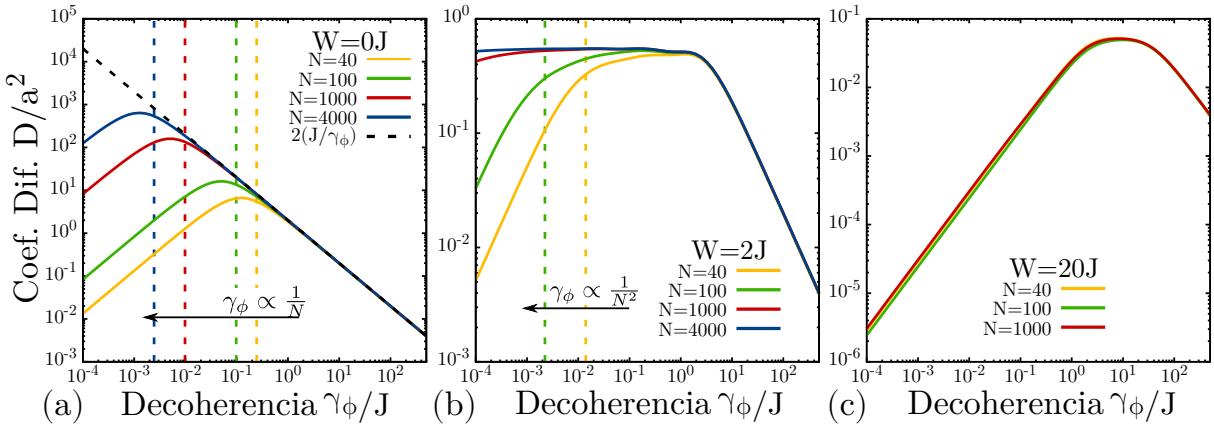


Figura B.2: Coeficiente de difusión D/a^2 , calculado usando Green-Kubo (Ec. (3.2)), vs. γ_ϕ/J para el modelo HHAA con decoherencia Haken-Stobl para diferentes valores de $N = \{40, 100, 1000, 4000\}$. La figura (a) es para $W/J = 0$ (régimen metálico), la figura (b) es para $W/J = 2.0$ (MIT) y la figura (c) es para $W/J = 20$ (régimen aislante). Las líneas discontinuas verticales indican los valores de γ_ϕ debajo de los cuales los efectos de tamaño finito son relevantes. La dependencia de este valor con N se muestra en la parte superior de la flecha negra.

donde γ_ϕ es la magnitud de la decoherencia, $\omega_{\mu,\nu} = \varepsilon_\mu - \varepsilon_\nu$ es la diferencia de energía entre los autoestados μ y ν , y $\hat{j}_{\mu,\nu}$ es el operador de flujo en la base propia:

$$\hat{j}_{\nu,\mu}(\vec{u}) = \frac{i}{\hbar} \sum_{n,m} (\vec{u} \cdot \vec{r}_{n,m}) \phi_n^{\mu*} \phi_m^\nu \mathcal{H}_{n,m}. \quad (\text{B.10})$$

En la expresión anterior, \vec{u} es un vector unitario que indica la dirección de transporte, $\vec{r}_{n,m}$ es el vector que conecta los sitios en posiciones n y m , ϕ_n^ν es la amplitud del autoestado ν en el sitio n y $\mathcal{H}_{n,m} = \langle n | \hat{\mathcal{H}} | m \rangle$ es el acoplamiento entre n y m sitios. Para sistemas 1D con interacciones a primeros vecinos, $\vec{u} \cdot \vec{r}_{n,m} = m - n = \pm a$ y $\mathcal{H}_{n,m} = J(\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1})$. Por lo tanto,

$$\hat{j}_{\nu,\mu} = i \frac{Ja}{\hbar} \sum_n \phi_n^{\mu*} (\phi_{n+1}^\nu - \phi_{n-1}^\nu). \quad (\text{B.11})$$

La ecuación (3.2) es de utilidad para estudiar simultáneamente la dependencia con γ_ϕ y N del coeficiente de difusión en varios modelos. La figura B.2 muestra el coeficiente de difusión D del modelo HHAA en los tres regímenes en función de la fuerza de desfase para diferentes longitudes de cadena N . Para tasas de decoherencia pequeñas observamos una clara dependencia de D del tamaño del sistema. Esto se debe al hecho de que cuando la tasas de decoherencia es pequeña, la excitación alcanza los límites antes de que pueda establecerse la difusión. Definiendo la escala de tiempo típica para que la decoherencia afecte la dinámica como $\tau_\phi = \frac{\hbar}{\gamma_\phi}$, podemos estimar la magnitud de la decoherencia por debajo de la cual los efectos de tamaño finito son relevantes, comparando τ_ϕ con el tiempo necesario para alcanzar balísticamente los límites para el caso limpio ($W = 0$). En el régimen balístico ($W < 2J$) el valor de la tasa de decoherencia por debajo la cual el efecto de tamaño finito comienza a ser relevante disminuirá proporcionalmente a $1/N$, mientras que en el régimen difusivo ($W = 2J$) con $1/N^2$ (ver líneas discontinuas verticales en Figuras B.2ab). En el régimen localizado, los efectos de tamaño finito son insignificantes

APÉNDICE B. CORRIENTE ESTACIONARIA Y FÓRMULA DE GREEN-KUBO.

si el tamaño del sistema es mayor que la longitud de localización.

Apéndice C

Solución analítica para la difusión.

En este apéndice mostramos que la Ec. (3.9) para $p(t) = e^{-t/\tau_\phi}/\tau_\phi$ genera una dinámica difusiva a tiempos largos y encontramos soluciones analíticas en algunos casos paradigmáticos. La ecuación (3.9) se puede reorganizar de la siguiente forma:

$$\sigma^2(t) = f(t) + \int_0^t dt_i p(t_i) \sigma^2(t - t_i), \quad (\text{C.1})$$

notando que $\left(1 - \int_0^t p(t)dt\right) = e^{-t/\tau_\phi} = \tau_\phi p(t)$ y definiendo $f(t) = \tau_\phi g(t) + \int_0^t dt_i g(t_i)$ siendo $g(t) = \sigma_0^2(t)p(t)$.

La estrategia habitual para resolver este tipo de ecuación es utilizar la transformada de Laplace en la ecuación,

$$\sigma_{LT}^2(s) = \mathcal{F}(s) + \sigma_{LT}^2(s)\mathcal{P}(s),$$

donde $\sigma_{LT}^2(s)$, $\mathcal{F}(s)$ y $\mathcal{P}(s) = \frac{1}{s\tau_\phi+1}$ son las transformadas de Laplace de $\sigma^2(t)$, $f(t)$ y $p(t)$ respectivamente.

Si identificamos $\mathcal{G}(s)$ como la transformada de Laplace de $g(t)$, obtenemos $\mathcal{F}(s) = \mathcal{G}(s)(\frac{s\tau_\phi+1}{s})$, y:

$$\sigma_{LT}^2(s) = \frac{\mathcal{F}(s)}{1 - \mathcal{P}(s)} = \mathcal{G}(s)\tau_\phi \frac{(s\tau_\phi + 1)^2}{(s\tau_\phi)^2} = \mathcal{G}(s)\tau_\phi \left[\frac{1}{(s\tau_\phi)^2} + \frac{2}{s\tau_\phi} + 1 \right]. \quad (\text{C.2})$$

Dado que la transformada de Laplace de $t^n u(t)$, donde $u(t)$ es la función escalón, es $\frac{n!}{s^{n+1}}$, observamos que $\sigma^2(t)$ será difusiva a largo plazo si $\mathcal{G}(0)$ es finito y distinto de cero, una condición que se cumple trivialmente en los sistemas considerados. En este caso, $D = \frac{\mathcal{G}(0)}{2\tau_\phi} = \frac{\int_0^\infty \sigma_0^2(t)p(t)dt}{2\tau_\phi}$, como encontramos en la ecuación (3.3).

La transformada inversa de $\sigma_{LT}^2(s)$ se puede realizar analíticamente en varios casos (por ejemplo $\sigma_0^2(t) = A_\alpha t^\alpha$), sin embargo, aquí solo discuta dos casos paradigmáticos $\sigma_0^2(t) = 2D_0 t$ y $\sigma_0^2(t) = v_0^2 t^2$. En el primer caso, la difusión difusiva, encontramos $\sigma^2(t) = 2D_0 t$, es decir, la dinámica de σ_0^2 no se ve afectada.

En el segundo caso, la propagación balística, la solución es

$$\sigma^2(t) = 2\tau_\phi v_0^2 \left(\tau_\phi \left(e^{-\frac{t}{\tau_\phi}} - 1 \right) + t \right), \quad (\text{C.3})$$

que para $t \ll \tau_\phi$, $\sigma^2(t) \approx v_0^2 t^2$, mantiene su comportamiento balístico, pero se vuelve difusivo para $t \gg \tau_\phi$, $\sigma^2(t) \approx 2v_0^2 \tau_\phi t = 2Dt$. La misma expresión se encuentra en una cadena *tight-binding* ordenada y con decoherencia de Haken-Strobl utilizando el formalismo de Lindblad [166, 183].

Es importante tener en cuenta que si se consideran dos procesos de Poisson, $p_1(t) = e^{-t/\tau_1}/\tau_1$ y $p_2(t) = e^{-t/\tau_2}/\tau_2$, el efecto combinado será equivalente a considerar solo un proceso con $p(t) = e^{-t/\tau}/\tau$ con $\tau = \frac{\tau_1 \tau_2}{\tau_1 + \tau_2}$, es decir, la suma de los inversos de los tiempos característicos. Este resultado es estándar en sistemas clásicos donde se considera una partícula que se mueve con velocidad v_0 hacia la izquierda o hacia la derecha con la misma probabilidad después de un evento con cualquiera de los dos procesos. El coeficiente de difusión, en este caso, es $D = v_0^2 \tau = v_0^2 \frac{\tau_1 \tau_2}{\tau_1 + \tau_2} = D_1 \frac{1}{1 + \tau_1/\tau_2}$, que para $\tau_2 \gg \tau_1$ genera una corrección lineal al coeficiente de difusión asociado al proceso p_1 .

Apéndice D

Cálculos Auxiliares Capítulo 5.

Este apéndice reúne cálculos, derivaciones, y resultados auxiliares del Capítulo 5.

D.1. Coherencias Cuánticas Múltiples.

El orden de coherencia m corresponde a transiciones entre estados de multi-espín en bases de Zeeman que difieren en la magnetización m . La matriz de densidad se puede expresar mediante una superposición de contribuciones de diferentes órdenes como

$$\hat{\rho} = \sum_m \hat{\rho}_m \quad (\text{D.1})$$

donde el componente de coherencia cuántica m se comporta bajo una rotación como,

$$e^{i\phi\hat{S}^z} \hat{\rho}_m e^{-i\phi\hat{S}^z} = \hat{\rho}_m e^{im\phi}. \quad (\text{D.2})$$

Formalmente, la intensidad de coherencia m se puede definir como

$$g_m = \frac{1}{\text{Tr}\left\{(\hat{S}^z)^2\right\}} \text{Tr}\left\{\hat{\rho}_m \hat{\rho}_{-m}\right\}.$$

Experimentalmente, al implementar rotaciones sistemáticas alrededor de Z de pasos ϕ , la distribución de coherencia se puede decodificar mediante la transformación de Fourier de las señales recopiladas,

$$M_G(\phi, t) = \frac{1}{\text{Tr}\left\{(\hat{S}^z)^2\right\}} \text{Tr}\left\{e^{-i\phi\hat{S}^z} \hat{\rho}(t) e^{i\phi\hat{S}^z} e^{i\hat{H}t} \hat{S}^z e^{-i\hat{H}t}\right\},$$

donde $\phi = 2\pi/M$, y $M/2$ representa el orden de coherencia máximo a decodificar. Al expandir $\hat{\rho}(t)$ en la forma (D.1), considerando $\hat{\rho}(0) = \hat{S}^z$ y usando la ecuación (D.2) (propiedad de rotación), las señales recopiladas satisfacen

$$M_G(\phi, t) = \frac{1}{\text{Tr}\left\{(\hat{S}^z)^2\right\}} \text{Tr}\left\{\sum_m \hat{\rho}_m e^{im\phi} \sum_m \hat{\rho}_m\right\} = \sum_m g_m e^{im\phi}.$$

D.1. MAPEO A OTOCS DIAGONALES Y NO-DIAGONALES.

Se puede notar que $M_G(\phi = 0, t) = \sum_m g_m$ es la intensidad del eco de Loschmidt a tiempo t [258]. Separadamente, se puede observar que el segundo momento de esta distribución MQC es un OTOC global [267]:

$$\begin{aligned} \sum_m m^2 g_m &= -\partial_\phi^2 M_G(\phi, t) \Big|_{\phi=0} \\ &= \frac{1}{\text{Tr}\left\{\hat{S}^z\right\}^2} \text{Tr}\left\{\left[\hat{S}^z, \left[\hat{S}^z, \hat{S}^z(t)\right]\right] \hat{S}^z(t)\right\} \\ &= -\frac{1}{\text{Tr}\left\{\hat{S}^z\right\}^2} \text{Tr}\left\{\left[\hat{S}^z, \hat{S}^z(t)\right] \left[\hat{S}^z, \hat{S}^z(t)\right]\right\}. \end{aligned}$$

D.2. Mapeo de las contribuciones locales y globales al tamaño del grupo K con OTOC diagonales y no-diagonales.

De las Ecs. (5.5, 5.8) tenemos,

$$\begin{aligned} M_G(t, \phi) &= \frac{1}{N2^{N-2}} \text{Tr}\{\hat{S}^z(t)R^\dagger \hat{S}^z(t)R\} & (D.3) \\ &= \frac{1}{N2^{N-2}} \sum_{i,j} \text{Tr}\{\hat{S}_i^z(t)R^\dagger \hat{S}_j^z(t)R\} \\ M_L(t, \phi) &= \frac{1}{N2^{N-2}} \sum_i \text{Tr}\{\hat{S}_i^z(t)R^\dagger \hat{S}_i^z(t)R\} \\ M_{CT}(t, \phi) &= \frac{1}{N2^{N-2}} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \text{Tr}\{\hat{S}_i^z(t)R^\dagger \hat{S}_j^z(t)R\}, \end{aligned}$$

aplicando la derivada segunda a cada término y analizamos sus contribuciones a los OTOC,

$$\begin{aligned} \sum_m m^2 g_m &= -\partial_\phi^2 M_G(\phi, t) \Big|_{\phi=0} \\ &= -\partial_\phi^2 M_L(\phi, t) \Big|_{\phi=0} - \partial_\phi^2 M_{CT}(\phi, t) \Big|_{\phi=0}, \end{aligned}$$

al hacerlo, podemos escribir explícitamente los ecos como una combinación de contribuciones “diagonales” de la forma $\sum_{i,k} \text{Tr}\left\{\left[\hat{S}_k^z, \hat{S}_i^z(t)\right]^2\right\}$ y “no-diagonales”

$$\sum_{\substack{i,j,k,q \\ j \neq i \text{ o } k \neq q}} \text{Tr}\left\{\left[\hat{S}_q^z, \hat{S}_i^z(t)\right] \left[\hat{S}_k^z, \hat{S}_j^z(t)\right]\right\}$$

tan como son definidos en Ref. [61]. De donde sigue que los términos “diagonales” solo contribuyen a los ecos locales $M_L(t, \phi)$:

$$\begin{aligned}
 N2^{N-2}K_L(t) &= -2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} M_L(t, \phi) \Big|_{\phi=0} \\
 &= -2 \sum_i \text{Tr} \left\{ \hat{S}_i^z(t) \hat{S}^z \hat{S}^z \hat{S}_i^z(t) - \hat{S}_i^z(t) \hat{S}^z \hat{S}_i^z(t) \hat{S}^z \right\} \\
 &= -2 \sum_i \text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}_i^z, [\hat{S}^z, \hat{S}_i^z(t)] \right] \hat{S}_i^z(t) \right\} \\
 &= -2 \sum_i \text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}^z, \hat{S}_i^z(t) \right]^2 \right\} \\
 &= -2 \sum_{i,q,k} \text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}_q^z, \hat{S}_i^z(t) \right] \left[\hat{S}_k^z, \hat{S}_i^z(t) \right] \right\} \\
 &= -2 \left(\sum_{i,k} \text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}_k^z, \hat{S}_i^z(t) \right]^2 \right\} \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{\substack{i,q,k \\ q \neq k}} \text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}_q^z, \hat{S}_i^z(t) \right] \left[\hat{S}_k^z, \hat{S}_i^z(t) \right] \right\} \right),
 \end{aligned}$$

mientras que en el término cruzado M_{CT} sólo aparecen términos “no-diagonales”:

$$\begin{aligned}
 N2^{N-2}K_{CT}(t) &= -2 \frac{\partial^2 M_{CT}(t, \phi)}{\partial \phi^2} \\
 &= -2 \sum_{i \neq j} \text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}^z, \hat{S}_i^z(t) \right] \left[\hat{S}^z, \hat{S}_j^z(t) \right] \right\} \\
 &= -2 \sum_{\substack{i,j,k,q \\ i \neq j}} \text{Tr} \left\{ \left[\hat{S}_q^z, \hat{S}_i^z(t) \right] \left[\hat{S}_k^z, \hat{S}_j^z(t) \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

D.3. Crecimiento a tiempos muy cortos.

Para derivar la expresión para el comportamiento a corto plazo de $K_G(t)$ comenzamos usando la expansión de Baker-Campbell-Hausdorff en $\hat{S}^z(t)$, que aproxima la evolución temporal de \hat{S}^z bajo un Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$:

$$\hat{S}^z(t) \approx \hat{S}^z + (-i \frac{t}{\hbar}) [\hat{S}^z, \hat{\mathcal{H}}] \tag{D.4}$$

$$\left[\hat{S}^z, \hat{S}^z(t) \right] \approx \left[\hat{S}^z, \hat{S}^z + (-i \frac{t}{\hbar}) [\hat{S}^z, \hat{\mathcal{H}}] \right] \tag{D.5}$$

$$\approx (-i \frac{t}{\hbar}) \left[\hat{S}^z, [\hat{S}^z, \hat{\mathcal{H}}] \right]. \tag{D.6}$$

En este punto, llevando a cabo el conmutador para el Hamiltoniano cuantos dobles.

(5.12) tenemos:

$$\left[\hat{S}^z, [\hat{S}^z, \hat{\mathcal{H}}_{DQ}] \right] = 4\hbar^2 \hat{\mathcal{H}}_{DQ}. \quad (\text{D.7})$$

Finalmente, sustituyendo estas expresiones en la Ec. (5.9) y simplificando, se llega a:

$$K_G \approx 2 \frac{16t^2\hbar^2}{\text{Tr}\left\{(\hat{S}^z)^2\right\}} \text{Tr}\left\{\hat{\mathcal{H}}_{DQ}^2\right\} \quad (\text{D.8})$$

$$= \frac{16t^2\hbar^2}{\text{Tr}\left\{(\hat{S}^z)^2\right\}} \sum_{i,j,k,l,i \neq j,k \neq l} D_{i,j} D_{k,l} \text{Tr}\left\{\hat{\mathcal{H}}_{DQ_{i,j}} \hat{\mathcal{H}}_{DQ_{k,l}}\right\}$$

$$= 2 \frac{16t^2\hbar^2}{\text{Tr}\left\{(\hat{S}^z)^2\right\}} \sum_{i,j,k,l,i \neq j,k \neq l} 2D_{i,j} D_{k,l} \text{Tr}\left\{\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x \hat{S}_k^x \hat{S}_l^x\right\}$$

$$= 2 \frac{16t^2\hbar^2}{\text{Tr}\left\{(\hat{S}^z)^2\right\}} \sum_{i \neq j} 4D_{i,j}^2 \text{Tr}\left\{\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x \hat{S}_i^x \hat{S}_j^x\right\}$$

$$= 2 \frac{16t^2\hbar^2}{N2^{N-2}} \sum_{i \neq j} 4D_{i,j}^2 2^{N-4}$$

$$= \frac{32t^2\hbar^2}{N} \sum_{i,j,i \neq j} D_{i,j}^2. \quad (\text{D.9})$$

Siguiendo el mismo procedimiento para una OTOC local, encontramos que el crecimiento inicial sólo difiere en un factor de dos:

$$K_L(t) = -\frac{2}{N2^{N-2}} \sum_i \text{Tr}\left\{\left[\hat{S}^z, \hat{S}_i^z(t)\right]^2\right\} \quad (\text{D.10})$$

$$\approx \frac{2}{N2^{N-2}} 16t^2\hbar^2 \sum_{i,j} 2D_{i,j}^2 2^{N-4} \quad (\text{D.11})$$

$$\approx \frac{16}{N} t^2 \hbar^2 \sum_{i,j} D_{i,j}^2. \quad (\text{D.12})$$

D.4. Comportamiento de magnitudes individuales $K_*^i(t)$ y covarianza.

En el texto principal y en las secciones anteriores del apéndice, hemos demostrado que $K_*(t)$ se puede expresar como un promedio de las contribuciones del sitio, denotado como $K_*^i(t)$. Cada una de estas contribuciones exhibe una desviación mínima del valor promedio $K_*(t)$, un hecho respaldado al observar la varianza de este promedio o comparar

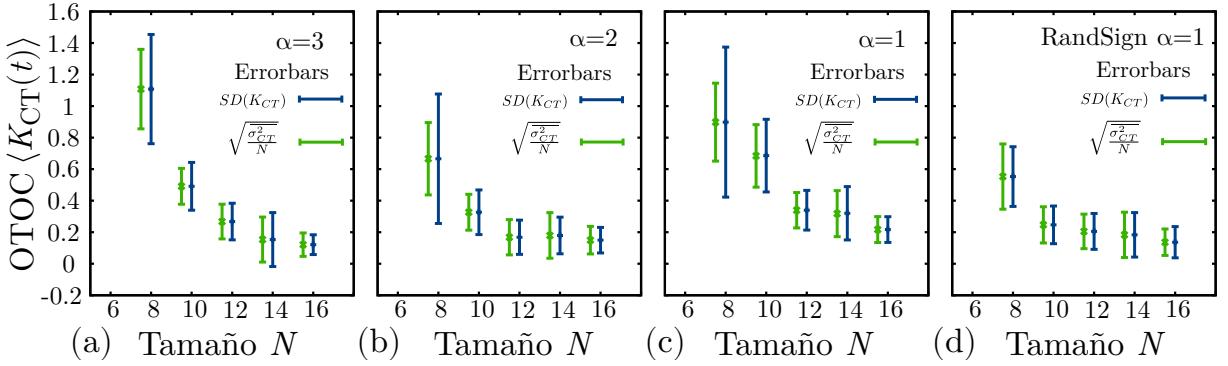


Figura D.1: Promedio temporal de la contribución cruzada al número de espines correlacionados, $\langle K_{CT} \rangle$. La desviación estándar del valor promedio $SD(K_{CT})$ (Ec. (5.16), barras azules), y la raíz cuadrada del promedio de varianza del sitio sobre N ($\sqrt{\sigma_{CT}^2/N}$, barras verdes) que están ligeramente desplazadas para mayor claridad. (a) $D_{ij} \propto 1/|r_{ij}|^3$ (b) $D_{ij} \propto 1/|r_{ij}|^2$, (c) $D_{ij} \propto 1/|r_{ij}|$, (d) $D_{ij} \propto \pm/|r_{ij}|$ con signos aleatorios.

directamente diferentes curvas, como se muestra en la Fig. 5.4. Las curvas correspondientes a diferentes sitios iniciales difieren principalmente en las fluctuaciones.

Sin embargo, dispersión entre estas curvas se puede extraer información de la correlación entre espines:

$$\langle K_{CT} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle K_{CT}^i \rangle \quad (\text{D.13})$$

$$\langle K_{CT}^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \langle K_{CT}^i K_{CT}^j \rangle \quad (\text{D.14})$$

$$= \frac{1}{N^2} \left[\sum_i \langle K_{CT}^i \rangle^2 + \sum_{i \neq j} \langle K_{CT}^i K_{CT}^j \rangle \right] \quad (\text{D.15})$$

Expandiendo Ec. (5.16) en contribuciones individuales se tiene:

$$SD^2(K_{CT}) = \frac{1}{\tau N^2} \sum_{i,j} \int_{t_s}^{t_{max}} \left[K_{CT}^i(t) K_{CT}^j(t) dt - \langle K_{CT}^i \rangle \langle K_{CT}^j \rangle \right],$$

lo que puede ser reacomodado en la siguiente forma,

$$\begin{aligned} SD^2(K_{CT}) &= \frac{1}{N^2} \sum_i SD^2(K_{CT}^i) \\ &+ \frac{1}{\tau N^2} \sum_{i,j} \int_{t_s}^{t_{max}} (K_{CT}^i(t) K_{CT}^j(t) - \langle K_{CT}^i \rangle \langle K_{CT}^j \rangle) dt \\ &= \frac{\sigma_{CT}^2}{N} + \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \text{Cov}(K_{CT}^i, K_{CT}^j). \end{aligned}$$

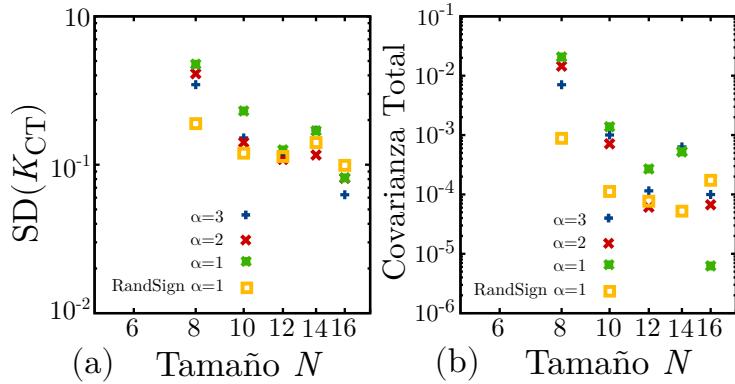


Figura D.2: (a) Desviación estándar $SD(K_{CT})$ en función de N . (b) Covarianza total (Ec. (D.17)) en función de N .

Donde se denota,

$$\overline{\sigma_{CT}^2} = \frac{1}{N} \sum_i SD^2(K_{CT}^i), \quad (\text{D.16})$$

y se define la covarianza total como:

$$\text{Total Cov.} = \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \text{Cov}(K_{CT}^i, K_{CT}^j). \quad (\text{D.17})$$

este último término da una medida de la correlación total entre las dinámica de diferentes K_*^i . Si la dinámica de espín no estuviera correlacionada, tendríamos $SD^2(K_{CT}) = \frac{\sigma_{CT}^2}{N}$. La Fig. D.1 compara estas magnitudes para K_{CT} , vemos que las barras de error, que representan $SD(K_{CT})$ y $\sqrt{\frac{\sigma_{CT}^2}{N}}$ (barras azules y verdes respectivamente), se acerca a medida que N aumenta. Para un sistema con $\alpha = 1$ más signos aleatorios en las interacciones, esta diferencia es pequeña incluso para un N pequeño.

D.5. Anillo ordenado

Los resultados principales, incluidos dentro del Capítulo 5, fueron realizados considerando la presencia de desorden en los campos Zeeman h_i del Hamiltoniano dado por la Ec. (5.12), debido a dos razones: (1) Es experimentalmente razonable considerar que, si bien todos los sitios son en media equivalentes, existe un desorden que los hace ligeramente diferentes uno de otros; (2) la presencia de estos campos rompe la simetría del sistema, borrando las recurrencias propias de los sistemas pequeños (a costa de un mayor costo computacional). Sin embargo, las ideas generales discutidas en el capítulo 5 siguen siendo validas en ausencia de desorden, especialmente al tratar con sistemas grandes. A modo de ejemplo la Fig. D.3 muestra la evolución de número de espines correlacionados calculados local y globalmente para interacciones con un rango $\alpha = 3$ y $\alpha = 1$ (paneles (a) y (b) respectivamente); el panel (c) muestra los valores de saturación de la diferencia de estas magnitudes en función de N para las curvas presentadas en (a) y (b). Se observa un comportamiento similar al encontrado incluyendo los campos Zeeman aleatorios, solamente con un nivel mayor de recurrencias en los términos cruzados.

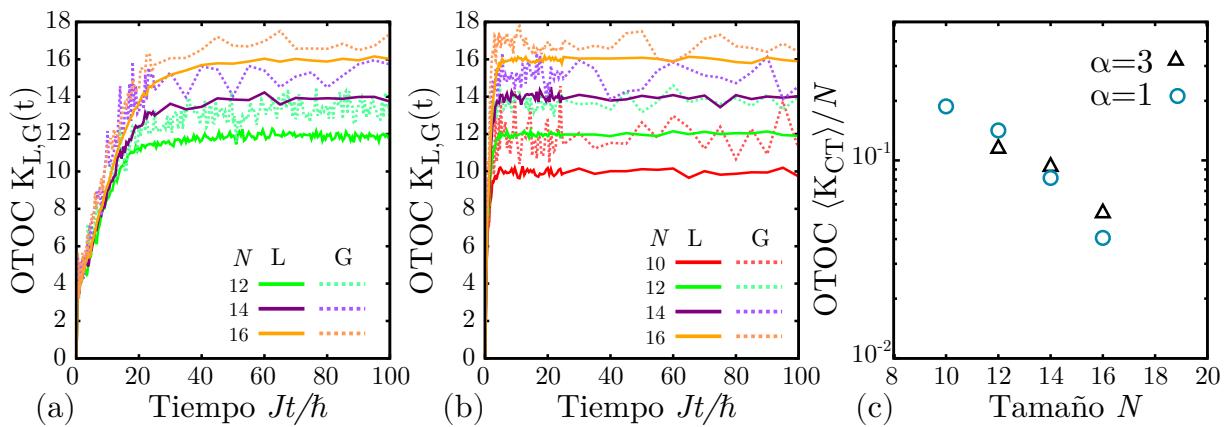


Figura D.3: Evolución temporal de la OTOC local $K_L(t)$ (curvas continuas) y la OTOC global $K_G(t)$ (curvas discontinuas), para un sistema de anillos con interacciones dadas por la ecuación (5.12) en ausencia de campos Zeeman, i.e. $h_i = 0 \forall i$. Las interacciones son de la forma, (a) $D_{ij} \propto \frac{J}{|r_{ij}|^3}$, (b) $D_{ij} \propto \frac{J}{|r_{ij}|}$. (c) Valor de saturación $\langle K_{CT} \rangle / N$ en escala log-lin en función del tamaño del anillo N para las curvas correspondientes a los paneles (a) y (b).

Apéndice E

Consideraciones numéricas

Una manera de resolver la ecuación de Schödinger es encontrar los autovectores de $\hat{\mathcal{H}}$ (diagonalizarlo) y expandir el estado inicial en términos de dichos autovectores ($|\varphi_\nu\rangle$), y colocar las fases correspondientes para un dado tiempo:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar}|\psi(0)\rangle = \sum_{\nu} a_{\nu} e^{-i\varepsilon_{\nu} t/\hbar} |\varphi_{\nu}\rangle.$$

En ésta tesis, esta estrategia fue utilizada para la simulación de las dinámicas (y ecos) de sistemas de hasta 7 espines con interacciones MB y para sistemas de hasta 1000 sitios en sistemas de una partícula. Sin embargo, no es aplicable para sistemas de espines más grandes debido a que la dimensión del espacio de Hilbert crece exponencialmente con el número de espines N del sistema, y junto con esto el costo computacional (tanto en tiempo como en memoria) de esta tarea.

Existen diferentes alternativas que pueden utilizarse para obtener una evolución aproximada de la solución sin recurrir a la diagonalización exacta. En esta tesis se utilizó para dicha tarea el algoritmo de Trotter-Suzuki (TS), el cual preserva la unitariedad de la evolución (conserva probabilidades), y se basa en aproximar el operador evolución mediante una secuencia de operadores de evolución adecuadamente elegidos. Asimismo, el algoritmo de Trotter-Suzuki es naturalmente extensible al Quantum-Drift, donde la presencia de un ambiente es incluida como un término estocástico en el Hamiltoniano.

Para realizar las simulaciones con más de 7 espines MB en esta tesis se utilizó el algoritmo TS a 4to orden implementado por Axel Dente, Pablo Zangara y Carlos Bederián [230], tanto en su versión secuencial como paralelizada (GPU), ambos algoritmos están implementados en Fortran 90. Para sistemas de una partícula, aislada o en interacción con un ambiente (Quantum-Drift), la implementación se realizó en C++, haciendo uso de la biblioteca Armadillo [280] para una computación eficiente. A continuación se resumen los puntos principales del algoritmo tal como se presenta en las tesis de Axel Dente, Pablo Zangara y Fernando Cucchietti.

E.1. Algoritmo de Trotter-Suzuki

La idea del algoritmo es encontrar una descomposición de $\hat{\mathcal{H}}$ que provea un conjunto de evoluciones simples que aproximen la evolución exacta $\hat{U}(t)$. Si, $\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^K \hat{\mathcal{H}}_i$, entonces

$$\hat{U}(t) = e^{-it\hat{\mathcal{H}}} = e^{-it\sum_{i=1}^K \hat{\mathcal{H}}_i} = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^K e^{-it\hat{\mathcal{H}}_i/m} \right)^m, \quad (\text{E.1})$$

lo cual a primer orden es,

$$\hat{U}(t) \simeq \hat{U}_1(t) = e^{-it\hat{\mathcal{H}}_1} \dots e^{-it\hat{\mathcal{H}}_K}, \quad (\text{E.2})$$

y a segundo y cuarto orden (utilizado en la tesis):

$$\hat{U}_2(t) = \hat{U}_1^\dagger(-t/2)\hat{U}_1(t/2), \quad (\text{E.3})$$

$$\hat{U}_4(t) = \hat{U}_2(pt)\hat{U}_2(pt)\hat{U}_2((1-4p)t)\hat{U}_2(pt)\hat{U}_2(pt), \quad (\text{E.4})$$

donde $p = 1/(4 - 4^{1/3})$. A fines prácticos, la evolución de la función de onda hasta un tiempo t se realiza con sucesivas evoluciones de $\hat{U}_4(\delta t)$, bajo la condición de que δt sea suficientemente pequeño en comparación con la escala de tiempo más rápida dada por $\hat{\mathcal{H}}$.

E.1.1. Una partícula

Para sistemas de una partícula, cuyo Hamiltoniano puede escribirse como un Hamiltoniano *tight-binding*, la descomposición del mismo suele aparecer naturalmente al observar la estructura “geométrica” del mismo. A modo de ejemplo, en una cadena unidimensional, con *hoppings* a primeros vecinos y energías de sitio dadas, la siguiente separación para el Hamiltoniano resulta natural:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \sum_n \varepsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_n -J(|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) \\ &= \sum_n \varepsilon_n |n\rangle \langle n| \\ &\quad + \sum_n -J(|2n\rangle \langle 2n+1| + |2n+1\rangle \langle 2n|) \\ &\quad + \sum_n -J(|2n\rangle \langle 2n-1| + |2n-1\rangle \langle 2n|) \\ &= \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{par} + \hat{\mathcal{H}}_{impar} \end{aligned}$$

en este caso, la evolución de cada término puede obtenerse analíticamente. Utilizando la función de onda escrita en la base de sitios, el término $\hat{\mathcal{H}}_0$ coloca fases en cada sitio, mientras que $\hat{\mathcal{H}}_{par}$ y $\hat{\mathcal{H}}_{impar}$ generan una evolución entre dos sitios contiguos:

$$\begin{pmatrix} \psi_n(t + \delta t) \\ \psi_{n+1}(t + \delta t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(J\delta t/hbar) & i \sin(J\delta t/hbar) \\ i \sin(J\delta t/hbar) & \cos(J\delta t/hbar) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n(t) \\ \psi_{n+1}(t) \end{pmatrix}, \quad (\text{E.5})$$

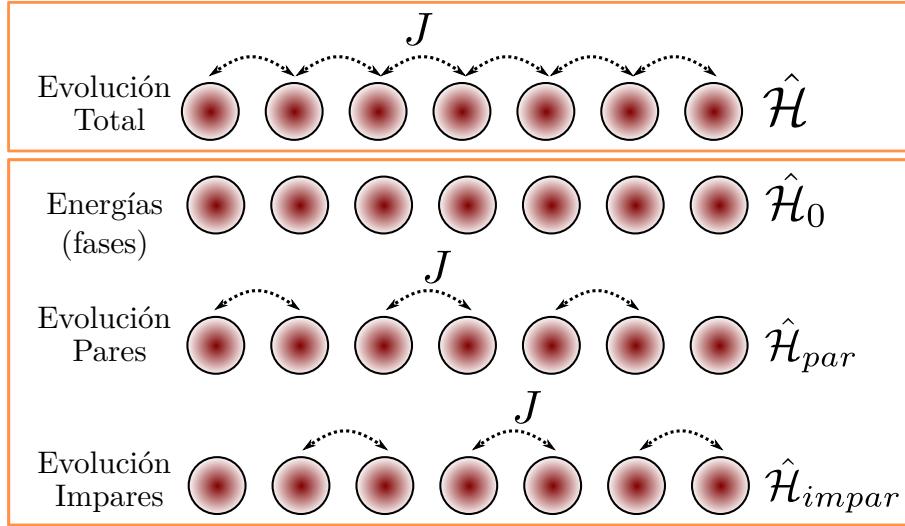


Figura E.1: Esquema de la “Trotterización” de un Hamiltoniano tight-binding a primeros vecinos: la evolución se descompone en un Hamiltoniano de energías de sitios $\hat{\mathcal{H}}_0$ y de evoluciones entre 2 sitios, entre sitios pares y el siguiente $\hat{\mathcal{H}}_{par}$, y entre sitios pares y el anterior $\hat{\mathcal{H}}_{impar}$.

la evolución total se logra intercalando la evolución de los sitios pares, impares, y fases mediante la prescripción de la sección anterior, como se esquematiza en la Fig. E.1.

Para dimensiones mayores, e interacciones entre más vecinos la generalización es directa. Sin embargo, existen situaciones donde es conveniente realizar diagonalizaciones exactas de algunas partes del Hamiltoniano, por ejemplo cuando el mismo esta compuesto de cúmulos/grupos de sitios con energías y *hoppings* (internos) de magnitud aleatoria, pero los *hoppings* entre cúmulos presentan una estructura dada. En este caso, resulta apropiado Trotterizar las evoluciones entre grupos, intercalándolas con evoluciones “exactas” de la dinámica dentro de cada grupo. Otra situación del mismo índole, es en el Hamiltoniano PBRM, donde las interacciones son todos con todos y aleatorias. En este caso, para la aplicación del Quantum-Drift, fue necesario diagonalizar el Hamiltoniano y obtener los operadores de evolución a un paso de tiempo δt , cuyas evoluciones fueron intercaladas con las fases aleatorias producto de la parte estocástica del Hamiltoniano.

E.1.2. Sistemas de espines

Consideremos el Hamiltoniano de espín:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} h_j^\alpha \hat{S}_j^\alpha + \sum_{j,k=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} J_{j,k}^\alpha \hat{S}_j^\alpha \hat{S}_k^\alpha, \quad (\text{E.6})$$

donde \hat{S}_j^α es el operador de espín en el sitio j y proyección $\alpha = x, y, z$. Los parámetros h_j^α describen campos locales y $J_{j,k}^\alpha$ son las constantes de acoplamiento entre espines.

Asumamos que el sistema de N espines esta descripto por un estado,

$$|\Phi_0\rangle = \sum_{i=1}^{2^N} c_i |\beta_i\rangle, \quad (\text{E.7})$$

E.2. PARALELISMO CUÁNTICO

expandido en la base de Ising ($|\beta_i\rangle$, productos tensoriales de los autovectores de cada \hat{S}_j^z) y c_i coeficientes complejos. El estado del sistema a tiempo t será $|\Phi_t\rangle = \hat{U}(t)|\Phi_0\rangle = e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar}|\Phi_0\rangle$.

La descomposición utilizada para el Hamiltoniano (E.6) viene dada por los términos de un espín y los términos de interacciones espín-espín. Cada uno de ellos se rota adecuadamente para obtener su representación diagonal. Por esta razón, consideremos los operadores $R_{\pi/2,j}^y$ y $R_{-\pi/2,j}^x$, los cuales rotan respectivamente a \hat{S}_j^x e \hat{S}_j^y a \hat{S}_j^z . Las rotaciones globales se definen mediante los productos, $Y = \otimes_j R_{\pi/2,j}^y$ y $X = \otimes_j R_{\pi/2,j}^x$.

El objetivo es aplicar solo correcciones de fase “diagonales” a la base de Ising. La evolución parcial $e^{-ith_j^\alpha \hat{S}_j^\alpha}$ produce una fase trivial (para la implementación) para $\alpha = z$ debido a la base elegida, mientras que para $\alpha = x, y$ se requiere la aplicación de rotaciones.

Tenemos entonces, para las operaciones de un espín,

$$\exp\left(-i\frac{t}{\hbar}\sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} h_j^\alpha \hat{S}_j^\alpha\right) \simeq \prod_{\alpha=x,y,z} \exp\left(-i\frac{t}{\hbar}\sum_{j=1}^N h_j^\alpha \hat{S}_j^\alpha\right), \quad (\text{E.8})$$

donde las operaciones las exponenciales que no involucran operadores en z deben rotarse.

De la misma manera,

$$\exp\left(-i\frac{t}{\hbar}\sum_{j,k=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} J_{j,k}^\alpha \hat{S}_j^\alpha \hat{S}_k^\alpha\right) \simeq \prod_{\alpha=x,y,z} \exp\left(-i\frac{t}{\hbar}\sum_{j,k=1}^N J_{j,k}^\alpha \hat{S}_j^\alpha \hat{S}_k^\alpha\right), \quad (\text{E.9})$$

donde nuevamente los términos en z involucran operadores diagonales y los restantes deben rotarse.

E.2. Paralelismo cuántico

El algoritmo anterior, nos proporciona una manera rápida de evolucionar funciones de onda, lo cual en principio nos permitiría realizar la evolución de ensamble evolucionando cada elemento de la base del ensamble y promediando adecuadamente con una necesidad de memoria mucho menor a la necesaria al utilizar la matriz densidad. Sin embargo, evolucionar las 2^N funciones de onda del ensamble tiene un coste temporal algo. Por esta razón, solo se recurrió a este método para sistemas de hasta 8 espines. Para espines de tamaños mayores, de 10 a 19 en esta tesis se utilizó el paralelismo cuántico [223], el cual permite simular la dinámica de un ensamble, bajo ciertas condiciones mediante la evolución de un número pequeño de funciones de onda adecuadamente construidas. A continuación se resume el método tal como se describe en [223].

La idea principal es que, si la condición inicial y el observable son “locales”, cuando se evalúa un estado el cual es una superposición con fases aleatorias de todos los elementos del ensamble estos observables se vuelven autopromediantes (*self-averaging*). Tomemos un ensamble de todos los estados $|\Psi_i^m\rangle = |\phi_m\rangle \otimes |\Psi_i\rangle$, donde hay m espines en el estado $|\phi_m\rangle$ y el resto ($N - m$) están en $|\Psi_i\rangle$. La probabilidad de encontrar a tiempo t m' espines

en el estado $|\phi_{m'}\rangle$ si a tiempo $t = 0$ había m espines en $|\phi_m\rangle$ viene dada por:

$$W_{m',m}^{ens}(t) = \sum_{f=1}^{2^{M-m'}} \sum_{i=1}^{2^{M-m}} p_i |\langle \Psi_f^{m'} | e^{-i\hat{\mathcal{H}}/\hbar t} |\Psi_i^m \rangle|^2, \quad (\text{E.10})$$

donde se suma sobre todos los posibles estados iniciales y finales.

Como caso particular y ejemplo podemos tomar $m = m' = 1$, $|\phi_m\rangle = |\uparrow\rangle_n$ el estado correspondiente a n -esimo espín up y $|\phi_{m'}\rangle = |\uparrow\rangle_{n'}$ correspondiente al n' -esimo espín. La polarización del espín n' a tiempo t , estando el espín n up a tiempo cero esta dada por $P_{n,n'}^{ens} = 2[W_{1,1}^{ens} - 1/2]$, la cual fue en fue utilizada en este trabajo para $n = n'$ como condición localizada.

La expresión (E.10) implica la evolución de $D = 2^{M-m}$ estados, el paralelismo cuántico sugiere que la función de correlación deseada esta contenida en la dinámica de un estado puro, este estado se construye mediante un superposición de todas las componentes del ensamble,

$$\Psi_{m,m'}^\alpha = \sum_{i=1}^{\alpha} \alpha_i |\Psi_i^m \rangle, \quad (\text{E.11})$$

donde $\alpha_i = \sqrt{p_i} e^{i\varphi}$, con φ aleatorio. La función de correlación viene dada entonces por,

$$W_{m',m}^{\{\alpha\}}(t) = \sum_{f=1}^{D'} \sum_{i=1}^D p_i |\langle \Psi_f^{m'} | e^{-i\hat{\mathcal{H}}/\hbar t} |\Psi_i^m \rangle|^2 \quad (\text{E.12})$$

$$+ \sum_{f=1}^{D'} \sum_{i' \neq i=1}^D \alpha_i \alpha_{i'} * \langle \Psi_i^m | e^{it\hat{\mathcal{H}}/\hbar t} |\Psi_f^{m'} \rangle \langle \Psi_f^{m'} | e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar t} |\Psi_i^m \rangle, \quad (\text{E.13})$$

donde $\{\alpha\}$ denota el set de todos los α_i utilizados en la construcción del estado y $D' = 2^{M-m'}$.

Se puede observar que el término cruzado es la diferencia entre $W_{m',m}^{ens}(t)$ y $W_{m',m}^\alpha(t)$, y, promediando sobre N_α realizaciones de posibles estados iniciales, tenemos que $W_{m',m}^{ens}(t) = \lim_{N_\alpha \rightarrow \infty} \langle W_{m',m}^\alpha(t) \rangle_{N_\alpha}$.

Sin embargo, puede demostrarse que, para una distribución homogénea $p_i = 2^{M-m}$, y condición inicial localizada ($M \gg m$), y M medianamente grande ($M > 9$) uno obtiene $W_{m',m}^{ens}(t) \approx W_{m',m}^\alpha(t)$ en una única realización.

Bibliografía

- [1] L. Boltzmann, “Weitere studien über das wärmegleichgewicht unter gasmolekülen. sitzungberichte der kaiserlichen akademie der wissenschaften. mathematisch-naturwissenschaftliche classe 66, 275–370,” *The kinetic theory of gases. History of modern physical sciences*, vol. 1, pp. 262–349, 1872.
- [2] L. Boltzmann, “Über die beziehung eines allgemeine mechanischen satzes zum zweiten haupsatze der wärmetheorie,” *Sitzungberichte der Akademie der Wissenschaften II*, vol. 67, 1877.
- [3] J. Loschmidt, *Über den Zustand des Wärmegleichgewichtes eines Systems von Körpern mit Rücksicht auf die Schwerkraft: I [-IV]*. aus der KK Hof-und Staatsdruckerei, 1876.
- [4] E. Hahn, “Spin Echoes,” *Phys. Rev.*, vol. 80, pp. 580–594, 1950.
- [5] R. G. Brewer and E. L. Hahn, “Atomic memory,” *Sci. Am.*, vol. 251, no. 6, pp. 50–57, 1984.
- [6] C. M. Sánchez, A. K. Chattah, and H. M. Pastawski, “Emergent decoherence induced by quantum chaos in a many-body system: A Loschmidt echo observation through nmr,” *Phys. Rev. A*, vol. 105, p. 052232, 2022.
- [7] M. H. Levitt, *Spin Dynamics Basics of Nuclear Magnetic Resonance*. Wiley, 2008.
- [8] F. Schmitt, M. K. Stehling, and R. Turner, *Echo-planar imaging: theory, technique and application*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [9] F. S. Lozano-Negro, M. A. Ferreyra-Ortega, D. Bendersky, L. Fernández-Alcázar, and H. M. Pastawski, “Simulating a catalyst induced quantum dynamical phase transition of a Heyrovsky reaction with different models for the environment,” *J. Condens. Matter Phys.*, vol. 34, no. 21, p. 214006, 2022.
- [10] M. B. Plenio and S. F. Huelga, “Dephasing-assisted transport: quantum networks and biomolecules,” *New J. Phys.*, vol. 10, no. 11, p. 113019, 2008.
- [11] P. Rebentrost, M. Mohseni, I. Kassal, S. Lloyd, and A. Aspuru-Guzik, “Environment-assisted quantum transport,” *New J. Phys.*, vol. 11, p. 033003, 2009.
- [12] D. N. Biggerstaff, R. Heilmann, A. A. Zecevik, M. Gräfe, M. A. Broome, A. Fedrizzi, S. Nolte, A. Szameit, A. G. White, and I. Kassal, “Enhancing coherent transport

BIBLIOGRAFÍA

- in a photonic network using controllable decoherence,” *Nat. Comm.*, vol. 7, no. 1, p. 11282, 2016.
- [13] M. S. Capiglioni, *A study on Magnetic Resonance based Neuronal Current Imaging (NCI) techniques for the detection of seizure onset zones in epilepsy*. PhD thesis, University of Bern, 2023.
- [14] N. Lambert, Y.-N. Chen, Y.-C. Cheng, C.-M. Li, G.-Y. Chen, and F. Nori, “Quantum biology,” *Nat. Phys.*, vol. 9, no. 1, pp. 10–18, 2013.
- [15] J. L. Lebowitz and O. Penrose, “Modern ergodic theory,” *Phys. Today*, vol. 26, pp. 23–29, 02 1973.
- [16] I. P. Cornfeld, S. V. Fomin, and Y. G. Sinai, *Ergodic theory*, vol. 245. Springer Science & Business Media, 2012.
- [17] M. C. Bañuls, J. I. Cirac, and M. B. Hastings, “Strong and weak thermalization of infinite nonintegrable quantum systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, no. 5, p. 050405, 2011.
- [18] J. v. Neumann, “Beweis des ergodensatzes und des h-theorems in der neuen mechanik,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 57, pp. 30–70, 1929.
- [19] J. von Neumann, “Proof of the ergodic theorem and the H -theorem in quantum mechanics,” *Eur. Phys. J. H*, vol. 35, pp. 201–237, nov 2010.
- [20] J. M. Deutsch, “Quantum statistical mechanics in a closed system,” *Phys. Rev. A*, vol. 43, p. 2046, 1991.
- [21] M. Srednicki, “The approach to thermal equilibrium in quantized chaotic systems,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 32, no. 7, p. 1163, 1999.
- [22] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii, “Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems,” *Nature*, vol. 452, pp. 854–858, 2008.
- [23] L. D’Alessio, Y. Kafri, A. Polkovnikov, and M. Rigol, “From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics,” *Adv. Phys.*, vol. 65, no. 3, pp. 239–362, 2016.
- [24] I. Prigogine, J. Vivanco, and J. G. Sanz, *Las leyes del caos*. Crítica Barcelona, 1999.
- [25] J. R. Dorfman, *Transport coefficients and chaos*, p. 152–162. Cambridge Lecture Notes in Physics, Cambridge University Press, 1999.
- [26] R. B. Laughlin, “Electrical resistivity as quantum chaos,” *Nucl. Phys. B - Proceedings Supplements*, vol. 2, pp. 213–224, 1987.
- [27] K. Nakamura, *Quantum chaos: a new paradigm of nonlinear dynamics*, vol. 3. CUP Archive, 1994.

-
- [28] F. Borgonovi, F. M. Izrailev, L. F. Santos, and V. G. Zelevinsky, “Quantum chaos and thermalization in isolated systems of interacting particles,” *Phys. Rep.*, vol. 626, pp. 1 – 58, 2016.
 - [29] C. Turner, A. Michailidis, D. Abanin, M. Serbyn, and Z. Papić, “Quantum scarred eigenstates in a rydberg atom chain: Entanglement, breakdown of thermalization, and stability to perturbations,” *Phys. Rev. B*, vol. 98, no. 15, p. 155134, 2018.
 - [30] P. Peng, C. Yin, X. Huang, C. Ramanathan, and P. Cappellaro, “Floquet prethermalization in dipolar spin chains,” *Nat. Phys.*, vol. 17, pp. 444–447, 2021.
 - [31] K. X. Wei, P. Peng, O. Shtanko, I. Marvian, S. Lloyd, C. Ramanathan, and P. Cappellaro, “Emergent prethermalization signatures in Out-of-time ordered correlations,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 123, p. 090605, 2019.
 - [32] B. A. Bernevig and T. L. Hughes, *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, stu - student edition ed., 2013.
 - [33] P. W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattices,” *Phys. Rev.*, vol. 109, no. 5, p. 1492, 1958.
 - [34] P. W. Anderson, “Localized magnetic states in metals,” *Phys. Rev.*, vol. 124, no. 1, p. 41, 1961.
 - [35] P. W. Anderson, “Local moments and localized states,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 50, pp. 191–201, 1978.
 - [36] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, “Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 42, p. 673, 1979.
 - [37] A. Lagendijk, B. v. Tiggelen, and D. S. Wiersma, “Fifty years of anderson localization,” *Phys. Today*, vol. 62, no. 8, pp. 24–29, 2009.
 - [38] L. Fleishman and P. W. Anderson, “Interactions and the anderson transition,” *Phys. Rev. B*, vol. 21, no. 6, p. 2366, 1980.
 - [39] B. L. Altshuler, Y. Gefen, A. Kamenev, and L. S. Levitov, “Quasiparticle lifetime in a finite system: A nonperturbative approach,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78, no. 14, p. 2803, 1997.
 - [40] D. M. Basko, I. L. Aleiner, and B. L. Altshuler, “Metal-insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-particle states,” *Ann. Phys.*, vol. 321, no. 5, pp. 1126–1205, 2006.
 - [41] J. Z. Imbrie, “On many-body localization for quantum spin chains,” *J. Stat. Phys.*, vol. 163, pp. 998–1048, 2016.
 - [42] M. Rispoli, A. Lukin, R. Schittko, S. Kim, M. E. Tai, J. Léonard, and M. Greiner, “Quantum critical behaviour at the many-body localization transition,” *Nature*, vol. 573, no. 7774, pp. 385–389, 2019.

BIBLIOGRAFÍA

- [43] G. Roati, C. D'Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno, and M. Inguscio, "Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate," *Nature (London)*, vol. 453, no. 7197, pp. 895–898, 2008.
- [44] S. Iyer, V. Oganesyan, G. Refael, and D. A. Huse, "Many-body localization in a quasiperiodic system," *Phys. Rev. B*, vol. 87, p. 134202, 2013.
- [45] I. V. Gornyi, A. D. Mirlin, and D. G. Polyakov, "Interacting electrons in disordered wires: Anderson localization and low-t transport," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, no. 20, p. 206603, 2005.
- [46] D. M. Basko, L. I. Aleiner, and B. L. Altshuler, "Metal–insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-particle states," *Ann. Phys. (New York)*, pp. 1126–1205, 2006.
- [47] V. Oganesyan and D. A. Huse, "Localization of interacting Fermions at high temperature," *Phys. Rev. B*, vol. 75, p. 155111, 2007.
- [48] M. Schreiber, S. S. Hodgman, P. Bordia, H. P. Lüschen, M. H. Fischer, R. Vosk, E. Altman, U. Schneider, and I. Bloch, "Observation of many-body localization of interacting Fermions in a quasirandom optical lattice," *Science*, vol. 349, pp. 842–845, 2015.
- [49] D. A. Huse, R. Nandkishore, V. Oganesyan, A. Pal, and S. L. Sondhi, "Localization-protected quantum order," *Phys. Rev. B*, vol. 88, no. 1, p. 014206, 2013.
- [50] N. Y. Yao and C. Nayak, "Time crystals in periodically driven systems," *Phys. Today*, vol. 71, pp. 40–47, Sept. 2018.
- [51] I. Carraro-Haddad, D. Chafatinos, A. Kuznetsov, I. Papuccio-Fernández, A. Reynoso, A. Bruchhausen, K. Biermann, P. Santos, G. Usaj, and A. Fainstein, "Solid-state continuous time crystal in a polariton condensate with a built-in mechanical clock," *Science*, vol. 384, no. 6699, pp. 995–1000, 2024.
- [52] J. Cayssol, B. Dóra, F. Simon, and R. Moessner, "Floquet topological insulators," *physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters*, vol. 7, no. 1-2, pp. 101–108, 2013.
- [53] A. Goussev, R. A. Jalabert, H. M. Pastawski, and D. A. Wisniacki, "Loschmidt echo," *Scholarpedia*, vol. 7, no. 8, p. 11687, 2012.
- [54] J. Tuck, "Los alamos report la-3990 (1968); jl tuck and mt menzel," *Adv. Math.*, vol. 9, p. 399, 1972.
- [55] E. Fermi, P. Pasta, S. Ulam, and M. Tsingou, "Studies of the nonlinear problems," tech. rep., Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States), 1955.
- [56] G. P. Berman and F. M. Izrailev, "The Fermi–Pasta–Ulam problem: Fifty years of progress," *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, vol. 15, p. 015104, 03 2005.

- [57] G. A. Álvarez, D. Suter, and R. Kaiser, “Localization-delocalization transition in the dynamics of dipolar-coupled nuclear spins,” *Science*, vol. 349, pp. 846–848, 2015.
- [58] B. Swingle, “Unscrambling the physics of out-of-time-order correlators,” *Nat. Phys.*, vol. 14, pp. 988–990, 2018.
- [59] R. J. Lewis-Swan, A. Safavi-Naini, J. J. Bollinger, and A. M. Rey, “Unifying scrambling, thermalization and entanglement through measurement of fidelity out-of-time-order correlators in the Dicke model,” *Nat. Comm.*, vol. 10, p. 1581, 2019.
- [60] C. M. Sánchez, A. K. Chattah, K. X. Wei, L. Buljubasich, P. Cappellaro, and H. M. Pastawski, “Perturbation independent decay of the Loschmidt echo in a many-body system,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 124, p. 030601, 2020.
- [61] T. Zhou and B. Swingle, “Operator growth from global out-of-timeorder correlators,” *Nature Communications*, vol. 14, p. 3411, 2023.
- [62] P. C. Maurer, G. Kucsko, C. Latta, L. Jiang, N. Y. Yao, S. D. Bennett, F. Pastawski, D. Hunger, N. Chisholm, M. Markham, D. J. Twitchen, J. I. Cirac, and M. D. Lukin, “Room-temperature quantum bit memory exceeding one second,” *Science*, vol. 336, pp. 1283–1286, 2012.
- [63] A. M. Souza, G. A. Álvarez, and D. Suter, “Robust dynamical decoupling,” *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 370, no. 1976, pp. 4748–4769, 2012.
- [64] D. Suter and G. A. Álvarez, “Colloquium: Protecting quantum information against environmental noise,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 88, no. 4, p. 041001, 2016.
- [65] C. M. Sánchez, P. R. Levstein, L. Buljubasich, H. M. Pastawski, and A. K. 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*, vol. 374, p. 20150155, 2016.
- [66] A. Peres, “Stability of quantum motion in chaotic and regular systems,” *Phys. Rev. A*, vol. 30, no. 4, p. 1610, 1984.
- [67] R. A. Jalabert and H. M. Pastawski, “Environment-Independent Decoherence Rate in Classically Chaotic Systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 86, pp. 2490–2493, 2001.
- [68] P. R. Zangara and H. M. Pastawski, “Loschmidt echo in many-spin systems: a quest for intrinsic decoherence and emergent irreversibility,” *Phys. Script.*, vol. 92, p. 033001, 2017.
- [69] 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: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 283, pp. 166–170, 2000.
- [70] H. M. Pastawski, P. R. Levstein, and G. Usaj, “Quantum dynamical echoes in the spin diffusion in mesoscopic systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 4310–4313, Dec 1995.

BIBLIOGRAFÍA

- [71] F. M. Cucchietti, D. A. R. Dalvit, J. P. Paz, and W. H. Zurek, “Decoherence and the loschmidt echo,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 91, p. 210403, 2003.
- [72] F. M. Cucchietti, H. M. Pastawski, and R. A. Jalabert, “Universality of the Lyapunov regime for the Loschmidt echo,” *Phys. Rev. B*, vol. 70, p. 035311, 2004. (see Figs. 4, 5 and 6).
- [73] P. R. Zangara, A. D. Dente, P. R. Levstein, and H. M. Pastawski, “Loschmidt echo as a robust decoherence quantifier for many-body systems,” *Phys. Rev. A*, vol. 86, p. 012322, 2012.
- [74] P. R. Zangara, A. D. Dente, A. Iucci, P. R. Levstein, and H. M. Pastawski, “Interaction-disorder competition in a spin system evaluated through the Loschmidt echo,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 195106, 2013.
- [75] P. R. Zangara, P. R. Levstein, and H. M. Pastawski, “Role of energy uncertainties in ergodicity breaking induced by competing interactions and disorder. a dynamical assessment through the Loschmidt echo,” *Papers in Physics*, vol. 7, p. 070012, 2015.
- [76] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, “Quasiclassical Method in the Theory of Superconductivity,” *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, vol. 28, p. 1200, June 1969.
- [77] S. H. Shenker and D. Stanford, “Black holes and the butterfly effect,” *J. High Energy Phys.*, vol. 2014, no. 3, pp. 1–25, 2014.
- [78] J. M. Maldacena, S. H. Shenker, and D. Stanford, “A bound on chaos,” *J. High Energy Phys. (Online)*, vol. 2016(8), p. 106, 8 2016.
- [79] C. M. Sánchez, A. K. Chattah, K. X. Wei, L. Buljubasich, P. Cappellaro, and H. M. Pastawski, “Perturbation independent decay of the Loschmidt echo in a many-body system,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 124, p. 030601, 2020.
- [80] F. Lozano-Negro, P. R. Zangara, and H. M. Pastawski, “Ergodicity breaking in an incommensurate system observed by OTocs and Loschmidt echoes: From quantum diffusion to sub-diffusion.,” *Chaos, Solitons and Fractals*, vol. 150, p. 111175, 2021.
- [81] J. Baum, M. Munowitz, A. N. Garraway, and A. Pines, “Multiple-quantum dynamics in solid state NMR,” *J. Chem. Phys.*, vol. 83, p. 2015, 1985.
- [82] M. Munowitz and A. Pines, “Multiple-quantum nuclear magnetic resonance spectroscopy,” *Science*, vol. 233, pp. 525–531, 1986.
- [83] C. M. Sánchez, L. Buljubasich, H. M. Pastawski, and A. K. Chattah, “Evolution of multiple quantum coherences with scaled dipolar hamiltonian,” *Journal of Magnetic Resonance*, vol. 281, pp. 75–81, 2017.
- [84] N. F. Mott, “The wave mechanics of α -ray tracks,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, vol. 126, no. 800, pp. 79–84, 1929.

- [85] R. Figari and A. Teta, “Emergence of classical trajectories in quantum systems: the cloud chamber problem in the analysis of mott (1929),” *Archive for history of exact sciences*, vol. 67, no. 2, pp. 215–234, 2013.
- [86] R. Landauer, “Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices,” *Phil. Mag.*, vol. 21, no. 172, pp. 863–867, 1970.
- [87] M. Büttiker, “Role of quantum coherence in series resistors,” *Phys. Rev. B*, vol. 33, pp. 3020–3026, 1986.
- [88] J. L. D’Amato and H. M. Pastawski, “Conductance of a disordered linear chain including inelastic scattering events,” *Phys. Rev. B*, vol. 41, no. 11, p. 7411, 1990.
- [89] H. M. Pastawski, “Classical and quantum transport from generalized Landauer-Büttiker equations.,” *Phys. Rev. B*, vol. 44, p. 6329, 1991.
- [90] L. J. Fernández-Alcázar and H. M. Pastawski, “Decoherent time-dependent transport beyond the Landauer-Büttiker formulation: A quantum-drift alternative to quantum jumps,” *Phys. Rev. A*, vol. 91, p. 022117, 2015.
- [91] G. C. Ghirardi, A. Rimini, and T. Weber, “Unified dynamics for microscopic and macroscopic systems,” *Phys. Rev. D*, vol. 34, pp. 470–491, 1986.
- [92] G. Lindblad, “On the generators of quantum dynamical semigroups,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 48, pp. 119–130, 1976.
- [93] H. Haken and G. Strobl, “An exactly solvable model for coherent and incoherent exciton motion,” *Z Phys. A-Hadron Nucl.*, vol. 262, pp. 135–148, 1973.
- [94] G. S. Engel, T. R. Calhoun, E. L. Read, T.-K. Ahn, T. Mančal, Y.-C. Cheng, R. E. Blankenship, and G. R. Fleming, “Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems,” *Nature*, vol. 446, no. 7137, pp. 782–786, 2007.
- [95] M. Mohseni, P. Rebentrost, S. Lloyd, and A. Aspuru-Guzik, “Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer,” *J. Chem. Phys.*, vol. **129**, p. 11B603, 2008.
- [96] J. Cao, R. J. Cogdell, D. F. Coker, H.-G. Duan, J. Hauer, U. Kleinekathöfer, T. L. C. Jansen, T. Mančal, R. J. D. Miller, J. P. Ogilvie, V. I. Prokhorenko, T. Renger, H.-S. Tan, R. Tempelaar, M. Thorwart, E. Thyrhaug, S. Westenhoff, and D. Zigmantas, “Quantum biology revisited,” *Sci. Adv.*, vol. 6, no. 14, p. eaaz4888, 2020.
- [97] S. Kauffman, “Mind, body, quantum mechanics,” *Act. Nerv. Super.*, vol. 61, pp. 61–64, 2019.
- [98] S. Kauffman, S. Niranen, and G. Vattay, “Uses of systems with degrees of freedom posed between fully quantum and fully classical states.” U.S. Patent No. 2012/0071333 A1, 3 2012.

BIBLIOGRAFÍA

- [99] G. Vattay, S. Kauffman, and S. Niiranen, “Quantum biology on the edge of quantum chaos,” *PLoS ONE*, vol. 9, no. 3, p. e89017, 2014.
- [100] P. R. Levstein, G. Usaj, and H. M. Pastawski, “Attenuation of polarization echoes in nuclear magnetic resonance: A study of the emergence of dynamical irreversibility in many-body quantum systems,” *J. Chem. Phys.*, vol. 108, p. 2718, 1998.
- [101] H. M. Pastawski, G. Usaj, R. A. Iglesias, and P. R. Levstein, “Surgimiento de irreversibilidad dinámica en sistemas cuánticos de muchos cuerpos: Una prueba usando resonancia magnética nuclear,” *Rev. Mex. Fis.*, vol. 44, no. 3, pp. 1–6, 1998.
- [102] B. Kramer and A. MacKinnon, “Localization: theory and experiment,” *Rep. Prog. Phys.*, vol. 56, p. 1469, 1993.
- [103] R. A. Römer and M. Schreiber, “Numerical investigations of scaling at the Anderson transition,” in *Anderson Localization and Its Ramifications*, pp. 3–19, Springer, 2003.
- [104] P. G. Harper, “Single band motion of conduction electrons in a uniform magnetic field,” *Proceedings of the Physical Society. Section A*, vol. 68, no. 10, p. 874, 1955.
- [105] P. G. Harper, J. W. Hodby, and R. A. Stradling, “Electrons and optic phonons in solids—the effects of longitudinal optical lattice vibrations on the electronic excitations of solids,” *Rep. Prog. Phys.*, vol. 36, p. 1, 1973.
- [106] D. R. Hofstadter, “Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields,” *Phys. Rev. B*, vol. 14, no. 6, p. 2239, 1976.
- [107] S. Aubry and G. André, “Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices,” *Ann. Israel Phys. Soc.*, vol. 3, no. 133, p. 18, 1980.
- [108] J. F. Weisz and H. M. Pastawski, “Critical strength for ideal incommensurate structures,” *Phys. Lett. A*, vol. 105, pp. 421–424, 1984.
- [109] H. M. Pastawski, J. F. Weisz, and S. Albornoz, “Matrix continued-fraction calculation of localization length,” *Phys. Rev. B*, vol. 28, p. 6896, 1983.
- [110] A. MacKinnon and B. Kramer, “One-parameter scaling of localization length and conductance in disordered systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 47, p. 1546, 1981.
- [111] H. M. Pastawski, C. M. Slutzky, and J. F. Weisz, “Localization as a breakdown of extended states,” *Phys. Rev. B*, vol. 32, p. 3642, 1985.
- [112] D. J. Thouless, “Electrons in disordered systems and the theory of localization,” *Phys. Rep.*, vol. 13, pp. 93–142, 1974.
- [113] P. R. Zangara, A. D. Dente, E. J. Torres-Herrera, H. M. Pastawski, A. Iucci, and L. F. Santos, “Time fluctuations in isolated quantum systems of interacting particles,” *Phys. Rev. E*, vol. 88, p. 032913, 2013.
- [114] X. Li, X. Li, and S. Das Sarma, “Mobility edges in one-dimensional bichromatic incommensurate potentials,” *Phys. Rev. B*, vol. 96, p. 085119, 2017.

- [115] E. J. Torres-Herrera and L. F. Santos, “Dynamical manifestations of quantum chaos: correlation hole and bulge,” *Phil. Trans. R. Soc. A: Math., Phys., Eng. Sc.*, vol. 375, p. 20160434, 2017.
- [116] G. Domínguez-Castro and R. Paredes, “The aubry–andré model as a hobbyhorse for understanding the localization phenomenon,” *Eur. J. Phys.*, vol. 40, no. 4, p. 045403, 2019.
- [117] E. J. Torres-Herrera and L. F. Santos, “Dynamical detection of level repulsion in the one-particle Aubry-André model,” *Condens. Matter*, vol. 5, p. 7, 2020.
- [118] Z. Xu, H. Huangfu, Y. Zhang, and S. Chen, “Dynamical observation of mobility edges in one-dimensional incommensurate optical lattices,” *New J. Phys.*, vol. 22, p. 013036, 2020.
- [119] C. Chiaracane, M. T. Mitchison, A. Purkayastha, G. Haack, and J. Goold, “Quasi-periodic quantum heat engines with a mobility edge,” *Phys. Rev. Research*, vol. 2, no. 1, p. 013093, 2020.
- [120] P. Bordia, H. Lüschen, U. Schneider, M. Knap, and I. Bloch, “Periodically driving a many-body localized quantum system,” *Nat. Phys.*, vol. 13, p. 460–464, 2017.
- [121] R. E. Peierls, *Quantum theory of solids*. Clarendon Press, 1996.
- [122] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, vol. 3. Addison-Wesley, 1965.
- [123] G. Roati, C. D’Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno, and M. Inguscio, “Anderson localization of a non-interacting bose–einstein condensate,” *Nature*, vol. 453, no. 7197, pp. 895–898, 2008.
- [124] E. J. Torres-Herrera and L. F. Santos, “Dynamical manifestations of quantum chaos: correlation hole and bulge,” *Phil. Trans. R. Soc. A.*, vol. 375, p. 20160434, 2017.
- [125] S. Xu, X. Li, Y.-T. Hsu, B. Swingle, and S. Das Sarma, “Butterfly effect in interacting aubry-andré model: Thermalization, slow scrambling, and many-body localization,” *Phys. Rev. Res.*, vol. 1, p. 032039(R), Dec 2019.
- [126] F. S. Lozano-Negro, P. R. Zangara, and H. M. Pastawski, “Ergodicity breaking in an incommensurate system observed by OTOCs and Loschmidt echoes: From quantum diffusion to sub-diffusion,” *Chaos Solit. Fractals*, vol. 150, p. 111175, 2021.
- [127] T. Phillips, “The most irrational number,” *American Mathematical Society*, vol. 15, 2015. <http://www.ams.org/publicoutreach/feature-column/fcarc-irrational1>.
- [128] H. M. Pastawski, G. Usaj, and P. R. Levstein, “Quantum interference phenomena in the local polarization dynamics of mesoscopic systems: an NMR observation,” *Chem. Phys. Lett.*, vol. 261, pp. 329–334, 1996.

BIBLIOGRAFÍA

- [129] Z. Mádi, B. Brutscher, T. Schulte-Herbrüggen, R. Brüschweiler, and R. Ernst, “Time-resolved observation of spin waves in a linear chain of nuclear spins,” *Chem. Phys. Lett.*, vol. 268, pp. 300–305, 1997.
- [130] G. A. Álvarez, P. R. Levstein, and H. M. Pastawski, “Signatures of a quantum dynamical phase transition in a three-spin system in presence of a spin environment,” *Phys. B: Condens. Matter*, vol. 398, pp. 438–441, 2007.
- [131] S. Datta, *Quantum transport: atom to transistor*. Cambridge university press, 2005.
- [132] E. Rufeil Fiori, *Dinámica coherente de excitaciones de carga y espín en sistemas unidimensionales*. PhD thesis, Universidad Nacionalde Córdoba., 2009.
- [133] 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.*, vol. 420, pp. 35–41, 2006.
- [134] E. Rufeil-Fiori and H. Pastawski, “Survival probability of a local excitation in a non-markovian environment: Survival collapse, zeno and anti-zeno effects,” *Phys. B: Condens. Matter*, vol. 404, no. 18, pp. 2812–2815, 2009.
- [135] Y. V. Fyodorov, O. Chubykalo, F. Izrailev, and G. Casati, “Wigner random banded matrices with sparse structure: local spectral density of states,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 76, no. 10, p. 1603, 1996.
- [136] L. F. Santos, F. Borgonovi, and F. Izrailev, “Onset of chaos and relaxation in isolated systems of interacting spins: Energy shell approach,” *Phys. Rev. E*, vol. 85, no. 3, p. 036209, 2012.
- [137] N. C. Chávez, F. Mattiotti, J. A. Méndez-Bermúdez, F. Borgonovi, and G. L. Celardo, “Disorder-enhanced and disorder-independent transport with long-range hopping: Application to molecular chains in optical cavities,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 126, p. 153201, Apr 2021.
- [138] H. M. Pastawski and E. Medina, “Tight binding’methods in quantum transport through molecules and small devices: From the coherent to the decoherent description,” *Rev. Mex. Fís.*, vol. 47s1, pp. 1–23, 2001.
- [139] R. Fleischmann, T. Geisel, R. Ketzmerick, and G. Petschel, “Quantum diffusion, fractal spectra, and chaos in semiconductor microstructures,” *Phys. D: Nonlinear Phenom.*, vol. 86, no. 1-2, pp. 171–181, 1995.
- [140] D. J. Thouless, “Bandwidths for a quasiperiodic tight-binding model,” *Phys. Rev. B*, vol. 28, no. 8, p. 4272, 1983.
- [141] H. Hiramoto and S. Abe, “Dynamics of an electron in quasiperiodic systems. ii. harper’s model,” *J. Phys. Soc. Jap.*, vol. 57, pp. 1365–1371, 1988.
- [142] D. J. Thouless and S. Kirkpatrick, “Conductivity of the disordered linear chain,” *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, vol. 14, no. 3, p. 235, 1981.

- [143] S. I. Doronin, I. I. Maksimov, and E. B. Fel'dman, “Multiple-quantum dynamics of one-dimensional nuclear spin systems in solids,” *J. Exp. Th. Phys.*, vol. 91, pp. 597–609, 2000.
- [144] C. Yang, Y. Wang, P. Wang, X. Gao, and S. Chen, “Dynamical signature of localization-delocalization transition in a one-dimensional incommensurate lattice,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 184201, 2017.
- [145] L. Benini, P. Naldei, R. A. Römer, and T. Roscilde, “Loschmidt echo singularities as dynamical signatures of strongly localized phases,” *New J. Phys.*, vol. 23, p. 023030, 2020.
- [146] I. Guarneri, “Spectral properties of quantum diffusion,” *Scholarpedia*, vol. 5, no. 11, p. 10463, 2010.
- [147] E. Akkermans, A. Gero, and R. Kaiser, “Photon localization and dicke superradiance in atomic gases,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **101**, p. 103602, 2008.
- [148] C. W. Beenakker, “Random-matrix theory of quantum transport,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. **69**, no. 3, p. 731, 1997.
- [149] G. Vattay, D. Salahub, I. Csabai, A. Nassimi, and S. A. Kaufmann, “Quantum criticality at the origin of life,” *J. of Phys.: Conf. Ser.*, vol. 626, no. 1, p. 012023, 2015.
- [150] G. L. Celardo, F. Borgonovi, M. Merkli, V. I. Tsifrinovich, and G. P. Berman, “Superradiance transition in photosynthetic light-harvesting complexes,” *J. Phys. Chem. C*, vol. **116**, pp. 22105–22111, 2012.
- [151] F. C. Spano, J. R. Kuklinski, and S. Mukamel, “Cooperative radiative dynamics in molecular aggregates,” *J. Chem. Phys.*, vol. **94**, pp. 7534–7544, 1991.
- [152] F. Mattiotti, W. M. Brown, N. Piovella, S. Olivares, E. M. Gauger, and G. L. Celardo, “Bio-inspired natural sunlight-pumped lasers,” *New J. Phys.*, vol. 23, p. 103015, 2021.
- [153] J. Schachenmayer, C. Genes, E. Tignone, and G. Pupillo, “Cavity-enhanced transport of excitons,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 114, p. 196403, 2015.
- [154] F. Mattiotti, M. Sarovar, G. G. Giusteri, F. Borgonovi, and G. L. Celardo, “Efficient light harvesting and photon sensing via engineered cooperative effects,” *New J. Phys.*, vol. 24, p. 013027, 2022.
- [155] R. Gutierrez, E. Díaz, R. Naaman, and G. Cuniberti, “Spin-selective transport through helical molecular systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 85, p. 081404(R), Feb 2012.
- [156] M. Gullì, A. Valzelli, F. Mattiotti, M. Angeli, F. Borgonovi, and G. L. Celardo, “Macroscopic coherence as an emergent property in molecular nanotubes,” *New J. Phys.*, vol. 21, no. 1, p. 013019, 2019.

BIBLIOGRAFÍA

- [157] C. Chuang, C. K. Lee, J. M. Moix, J. Knoester, and J. Cao, “Quantum diffusion on molecular tubes: Universal scaling of the 1d to 2d transition,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 116, no. 19, p. 196803, 2016.
- [158] L. Sepunaru, I. Pecht, M. Sheves, and D. Cahen, “Solid-state electron transport across azurin: From a temperature-independent to a temperature-activated mechanism,” *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 133, pp. 2421–2423, 2011.
- [159] D. H. Dunlap, H.-L. Wu, and P. W. Phillips, “Absence of localization in a random-dimer model,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, pp. 88–91, 1990.
- [160] F. M. Izrailev and A. A. Krokhin, “Localization and the mobility edge in one-dimensional potentials with correlated disorder,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 82, pp. 4062–4065, May 1999.
- [161] A. D. Mirlin, Y. V. Fyodorov, F.-M. Dittes, J. Quezada, and T. H. Seligman, “Transition from localized to extended eigenstates in the ensemble of power-law random banded matrices,” *Phys. Rev. E*, vol. 54, pp. 3221–3230, 1996.
- [162] N. F. Mott, “Metal-insulator transition,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 40, no. 4, p. 677, 1968.
- [163] H. Haken, “Die theorie des exzitons im festen körper,” *Fortschritte Phys.*, vol. 6, p. 271–334, 1958.
- [164] H. M. Pastawski and G. Usaj, “Dimensional crossover in spin diffusion: A manifestation of the quantum zeno effect,” *Phys. Rev. B*, vol. 57, no. 9, p. 5017, 1998.
- [165] F. Caruso, A. W. Chin, A. Datta, S. F. Huelga, and M. B. Plenio, “Highly efficient energy excitation transfer in light-harvesting complexes: The fundamental role of noise-assisted transport,” *J. Chem. Phys.*, vol. 131, no. 10, p. 09B612, 2009.
- [166] J. M. Moix, M. Khasin, and J. Cao, “Coherent quantum transport in disordered systems: I. the influence of dephasing on the transport properties and absorption spectra on one-dimensional systems,” *New J. Phys.*, vol. 15, no. 8, p. 085010, 2013.
- [167] C. Chuang, C. K. Lee, J. M. Moix, J. Knoester, and J. Cao, “Quantum diffusion on molecular tubes: Universal scaling of the 1d to 2d transition,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 116, no. 19, p. 196803, 2016.
- [168] A. Madhukar and W. Post, “Exact solution for the diffusion of a particle in a medium with site diagonal and off-diagonal dynamic disorder,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 39, no. 22, p. 1424, 1977.
- [169] R. A. Molina, E. Benito-Matias, A. D. Somoza, L. Chen, and Y. Zhao, “Superradiance at the localization-delocalization crossover in tubular chlorosomes,” *Phys. Rev. E*, vol. 93, p. 022414, 2016.
- [170] B. Zhang, W. Song, P. Pang, Y. Zhao, P. Zhang, I. Csabai, G. Vattay, and S. Lindsay, “Observation of giant conductance fluctuations in a protein,” *Nano Futures*, vol. 1, p. 035002, 2017.

-
- [171] S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand, H. J. Schellnhuber, and E. D. Siggia, “One-dimensional Schrödinger equation with an almost periodic potential,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 50, p. 1873, 1983.
 - [172] J. Strümpfer, M. Sener, and K. Schulten, “How quantum coherence assists photosynthetic light-harvesting,” *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 3, pp. 536–542, 2012.
 - [173] H. De Raedt and B. De Raedt, “Applications of the generalized Trotter formula,” *Phys. Rev. A*, vol. 28, pp. 3575–3580, 1983.
 - [174] F. M. Cucchietti, *The Loschmidt echo in classically chaotic systems*. PhD thesis, Universidad Nacional de Córdoba., 2004.
 - [175] P. R. Zangara, *El eco de Loschmidt en sistemas de espines: decoherencia, equilibración, localización y los mecanismos emergentes de irreversibilidad*. PhD thesis, Universidad Nacional de Córdoba., 2015.
 - [176] L. J. Fernández Alcazar, *Decoherencia en el transporte cuántico: descripciones dinámicas y procesos dependientes de espín*. PhD thesis, Universidad Nacional de Córdoba., 2016.
 - [177] A. Purkayastha, S. Sanyal, A. Dhar, and M. Kulkarni, “Anomalous transport in the Aubry-andré-Harper model in isolated and open systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 97, no. 17, p. 174206, 2018.
 - [178] D. Dwiputra and F. P. Zen, “Environment-assisted quantum transport and mobility edges,” *Phys. Rev. A*, vol. 104, no. 2, p. 022205, 2021.
 - [179] E. Álvarez Navarro, “Study of transport in the Harper model in the presence of thermal noise,” 2022.
 - [180] G. A. Álvarez, E. P. Danieli, P. R. Levstein, and H. M. Pastawski, “Decoherence under many-body system-environment interactions: A stroboscopic representation based on a fictitiously homogenized interaction rate,” *Phys. Rev. A*, vol. 75, p. 062116, 2007.
 - [181] I. Tutunnikov, C. Chuang, and J. Cao, “Coherent spatial control of wave packet dynamics on quantum lattices,” *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 14, no. 51, pp. 11632–11639, 2023.
 - [182] S. Lloyd, M. Mohseni, A. Shabani, and H. Rabitz, “The quantum goldilocks effect: on the convergence of timescales in quantum transport,” *arXiv preprint arXiv:1111.4982*, 2011.
 - [183] P. Reineker, *Stochastic Liouville equation approach: Coupled coherent and incoherent motion, optical line shapes, magnetic resonance phenomena*, pp. 111–226. Berlin, Heidelberg: Springer, 1982.
 - [184] A. Amir, Y. Lahini, and H. B. Perets, “Classical diffusion of a quantum particle in a noisy environment,” *Phys. Rev. E*, vol. 79, no. 5, p. 050105(R), 2009.

BIBLIOGRAFÍA

- [185] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F. Y. Juang, and P. K. Bhattacharya, “Quasiperiodic GaAs-AlAs heterostructures,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 55, pp. 1768–1770, 1985.
- [186] V. K. Varma and M. Žnidarič, “Diffusive transport in a quasiperiodic fibonacci chain: Absence of many-body localization at weak interactions,” *Phys. Rev. B*, vol. 100, no. 8, p. 085105, 2019.
- [187] A. M. Lacerda, J. Goold, and G. T. Landi, “Dephasing enhanced transport in boundary-driven quasiperiodic chains,” *Phys. Rev. B*, vol. 104, no. 17, p. 174203, 2021.
- [188] C. Chiaracane, A. Purkayastha, M. T. Mitchison, and J. Goold, “Dephasing-enhanced performance in quasiperiodic thermal machines,” *Phys. Rev. B*, vol. 105, no. 13, p. 134203, 2022.
- [189] A. D. Mirlin and F. Evers, “Multifractality and critical fluctuations at the Anderson transition,” *Phys. Rev. B*, vol. 62, pp. 7920–7933, Sept. 2000.
- [190] F. Evers and A. D. Mirlin, “Fluctuations of the Inverse Participation Ratio at the Anderson Transition,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 84, pp. 3690–3693, 2000.
- [191] E. Cuevas, V. Gasparian, and M. Ortúñoz, “Anomalously Large Critical Regions in Power-Law Random Matrix Ensembles,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 87, p. 056601, 2001.
- [192] F. Evers and A. D. Mirlin, “Anderson transitions,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 80, pp. 1355–1417, 2008.
- [193] L. F. Santos and E. J. Torres-Herrera, “Nonequilibrium quantum dynamics of many-body systems,” *Chaotic, Fractional, and Complex Dynamics: New Insights and Perspectives*, pp. 231–260, 2018.
- [194] B. L. Al’tshuler and P. A. Lee, “Disordered Electronic Systems,” *Phys. Today*, vol. 41, pp. 36–44, 12 1988.
- [195] R. A. Webb and S. Washburn, “Quantum Interference Fluctuations in Disordered Metals,” *Phys. Today*, vol. 41, pp. 46–53, 12 1988.
- [196] E. Ott, T. M. Antonsen, and J. D. Hanson, “Effect of noise on time-dependent quantum chaos,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 53, no. 23, p. 2187, 1984.
- [197] L. Fallani, J. E. Lye, V. Guarnera, C. Fort, and M. Inguscio, “Ultracold atoms in a disordered crystal of light: Towards a bose glass,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, no. 13, p. 130404, 2007.
- [198] P. Peng, B. Ye, N. Y. Yao, and P. Cappellaro, “Exploiting disorder to probe spin and energy hydrodynamics,” *Nat. Phys.*, pp. 1–6, 2023.
- [199] P. R. Levstein, H. M. Pastawski, and R. Calvo, “Spin diffusion in low-dimensional copper-amino-acid complexes,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 3, no. 12, p. 1877, 1991.

- [200] H. M. Pastawski, J. F. Weisz, and E. A. Albanesi, “Transport properties of organic conductors: Influence of the statistics of distances between charged centers,” *Phys. Rev. B*, vol. 52, no. 15, p. 10665, 1995.
- [201] R. Gutiérrez, S. Mandal, and G. Cuniberti, “Dissipative effects in the electronic transport through dna molecular wires,” *Phys. Rev. B*, vol. 71, no. 23, p. 235116, 2005.
- [202] D. Nozaki, C. Gomes da Rocha, H. M. Pastawski, and G. Cuniberti, “Disorder and dephasing effects on electron transport through conjugated molecular wires in molecular junctions,” *Phys. Rev. B*, vol. 85, no. 15, p. 155327, 2012.
- [203] S. Reineke, M. Thomschke, B. Lüssem, and K. Leo, “White organic light-emitting diodes: Status and perspective,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 85, pp. 1245–1293, 2013.
- [204] K. Namsheer and C. S. Rout, “Conducting polymers: a comprehensive review on recent advances in synthesis, properties and applications,” *RSC Advances*, vol. 11, pp. 5659–5697, 2021.
- [205] R. Szabla, M. Zdrowowicz, P. Spisz, N. J. Green, P. Stadlbauer, H. Kruse, J. Šponer, and J. Rak, “2, 6-diaminopurine promotes repair of DNA lesions under prebiotic conditions,” *Nat. Comm.*, vol. 12, p. 3018, 2021.
- [206] E. O’Brien, M. E. Holt, M. K. Thompson, L. E. Salay, A. C. Ehlinger, W. J. Chazin, and J. K. Barton, “The [4fe4s] cluster of human DNA primase functions as a redox switch using DNA charge transport,” *Science*, vol. 355, p. 6327, 2017.
- [207] D. Klotsa, R. A. Römer, and M. S. Turner, “Electronic transport in dna,” *Biophysical journal*, vol. 89, no. 4, pp. 2187–2198, 2005.
- [208] G. Rosenblum, N. Elad, H. Rozenberg, F. Wiggers, J. Jungwirth, and H. Hofmann, “Allostery through dna drives phenotype switching,” *Nat. Commun.*, vol. 12, no. 1, p. 2967, 2021.
- [209] P. R. Levstein, H. M. Pastawski, and J. L. D’Amato, “Tuning the through-bond interaction in a two-centre problem,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 2, p. 1781, 1990.
- [210] S. M. Sarhangi and D. V. Matyushov, “Electron tunneling in biology: When does it matter?,” *ACS Omega*, vol. 8, pp. 27355–27365, 2023.
- [211] S. Sahu, S. Ghosh, B. Ghosh, K. Aswani, K. Hirata, D. Fujita, and A. Bandyopadhyay, “Atomic water channel controlling remarkable properties of a single brain microtubule: correlating single protein to its supramolecular assembly,” *Biosens. Bioelectron.*, vol. 47, pp. 141–148, 2013.
- [212] A. Jain, J. Gosling, S. Liu, H. Wang, E. M. Stone, S. Chakraborty, P.-S. Jayaraman, S. Smith, D. B. Amabilino, M. Fromhold, Y. Long, L. Pérez-García, L. Turyanska, R. Rahman, and F. J. Rawson, “Wireless electrical-molecular quantum signalling for cancer cell apoptosis,” *Nat. Nanotechnol.*, sep 2023.

BIBLIOGRAFÍA

- [213] A. Nitzan, *Chemical dynamics in condensed phases: relaxation, transfer and reactions in condensed molecular systems*. Oxford university press, 2006.
- [214] M. Peralta, S. Feijoo, S. Varela, R. Gutierrez, G. Cuniberti, V. Mujica, and E. Medina, “Spin-phonon coupling in a double-stranded model of DNA,” *J. Chem. Phys.*, vol. 159, p. 024711, 2023.
- [215] K. X. Wei, C. Ramanathan, and P. Cappellaro, “Exploring Localization in Nuclear Spin Chains,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 120, p. 070501, 2018.
- [216] 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*, vol. 79, pp. 032324–032329, 2009.
- [217] S. Zhang, B. H. Meier, and R. R. Ernst, “Polarization echoes in NMR,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 69, pp. 2149–2151, 1992.
- [218] M. Munowitz, A. Pines, and M. Mehring, “Multiple-quantum dynamics in NMR: A directed walk through Liouville space,” *J. Chem. Phys.*, vol. 86, pp. 3172–3182, 1987.
- [219] P. Jordan and E. P. Wigner, *Über das Paulische Äquivalenzverbot*. Springer, 1928.
- [220] H. Bethe, “Zur theorie der metalle: I. eigenwerte und eigenfunktionen der linearen atomkette,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 71, no. 3, pp. 205–226, 1931.
- [221] A. Gubin and L. F Santos, “Quantum chaos: An introduction via chains of interacting spins 1/2,” *American Journal of Physics*, vol. 80, no. 3, pp. 246–251, 2012.
- [222] D. G. Cory, A. F. Fahmy, and T. F. Havel, “Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy,” *PNAS*, vol. 94, pp. 1634–1639, 1997.
- [223] G. A. Álvarez, E. P. Danieli, P. R. Levstein, and H. M. Pastawski, “Quantum parallelism as a tool for ensemble spin dynamics calculations,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, no. 12, p. 120503, 2008.
- [224] Q. Hummel, B. Geiger, J. D. Urbina, and K. Richter, “Reversible quantum information spreading in many-body systems near criticality,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 123, p. 160401, 2019.
- [225] J. Rammensee, J. D. Urbina, and K. Richter, “Many-body quantum interference and the saturation of out-of-time-order correlators,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 121, no. 12, p. 124101, 2018.
- [226] I. García-Mata, M. Saraceno, R. A. Jalabert, A. J. Roncaglia, and D. A. Wisniacki, “Chaos signatures in the short and long time behavior of the Out-of-time ordered correlator,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 121, no. 21, 2018.
- [227] R. J. Lewis-Swan, A. Safavi-Naini, J. J. Bollinger, and A. M. Rey, “Unifying scrambling, thermalization and entanglement through measurement of fidelity out-of-time-order correlators in the Dicke model,” *Nat. Commun.*, vol. 10, p. 1581, 2019.

- [228] E. M. Fortes, I. García-Mata, R. A. Jalabert, and D. A. Wisniacki, “Gauging classical and quantum integrability through out-of-time-ordered correlators,” *Phys. Rev. E*, vol. 100, p. 042201, 2019.
- [229] G. A. Álvarez, E. P. Danieli, P. R. Levstein, and H. M. Pastawski, “Decoherence as attenuation of mesoscopic echoes in a spin-chain channel,” *Phys. Rev. A*, vol. 82, p. 012310, 2010.
- [230] A. D. Dente, C. S. Bederián, P. R. Zangara, and H. M. Pastawski, “GPU accelerated Trotter-Suzuki solver for quantum spin dynamics,” *arXiv preprint arXiv:1305.0036*, 2013.
- [231] R. Mondaini and M. Rigol, “Many-body localization and thermalization in disordered Hubbard chains,” *Phys. Rev. A*, vol. 92, p. 041601, 2015.
- [232] K. Agarwal, S. Gopalakrishnan, M. Knap, M. Müller, and E. Demler, “Anomalous diffusion and Griffiths effects near the many-body localization transition,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 114, p. 160401, 2015.
- [233] H. P. Lüschen, P. Bordia, S. Scherg, F. Alet, E. Altman, U. Schneider, and I. Bloch, “Observation of slow dynamics near the many-body localization transition in one-dimensional quasiperiodic systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 119, p. 260401, 2017.
- [234] G. A. Álvarez, M. Mishkovsky, E. P. Danieli, P. R. Levstein, H. M. Pastawski, and L. Frydman, “Perfect state transfer by selective quantum interferences within complex spin networks,” *Phys. Rev. A*, vol. 81, p. 060302, 2010.
- [235] A. M. Llois, N. V. Cohan, and M. Weissmann, “Localization in different models for one-dimensional incommensurate systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 29, pp. 3111–3116, 1984.
- [236] Y. B. Lev, D. M. Kennes, C. Klöckner, D. R. Reichman, and C. Karrasch, “Transport in quasiperiodic interacting systems: from superdiffusion to subdiffusion,” *EPL*, vol. 119, p. 37003, 2017.
- [237] R. B. Griffiths, “Nonanalytic behavior above the critical point in a random Ising ferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 23, p. 17, 1969.
- [238] S. Gopalakrishnan, K. Agarwal, E. A. Demler, D. A. Huse, and M. Knap, “Griffiths effects and slow dynamics in nearly many-body localized systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 93, p. 134206, 2016.
- [239] A. Chandran, C. R. Laumann, and V. Oganesyan, “Finite size scaling bounds on many-body localized phase transitions,” *arXiv preprint arXiv:1509.04285*, 2015.
- [240] F. M. Cucchietti and H. M. Pastawski, “Anomalous diffusion in quasi-one-dimensional systems,” *Phys. A*, vol. 283, pp. 302–305, 2000.

BIBLIOGRAFÍA

- [241] P. R. Levstein, G. Usaj, and H. M. Pastawski, “Attenuation of polarization echoes in nuclear magnetic resonance: A study of the emergence of dynamical irreversibility in many-body quantum systems,” *J. Chem. Phys.*, vol. 108, no. 7, pp. 2718–2724, 1998.
- [242] P. R. Zangara, D. Bendersky, and H. M. Pastawski, “Proliferation of effective interactions: Decoherence-induced equilibration in a closed many-body system,” *Phys. Rev. A*, vol. 91, p. 042112, 2015.
- [243] D. Vu, K. Huang, X. Li, and S. D. Sarma, “Fermionic many-body localization for random and quasiperiodic systems in the presence of short-and long-range interactions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 128, no. 14, p. 146601, 2022.
- [244] K. Huang, D. Vu, X. Li, and S. D. Sarma, “Incommensurate many-body localization in the presence of long-range hopping and single-particle mobility edge,” *Phys. Rev. B*, vol. 107, no. 3, p. 035129, 2023.
- [245] L. Faoro, M. V. Feigel’man, and L. Ioffe, “Non-ergodic extended phase of the quantum random energy model,” *Annals of Physics*, vol. 409, p. 167916, 2019.
- [246] B. Swingle and D. Chowdhury, “Slow scrambling in disordered quantum systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, no. 6, p. 060201, 2017.
- [247] M. Žnidarič, A. Scardicchio, and V. K. Varma, “Diffusive and subdiffusive spin transport in the ergodic phase of a many-body localizable system,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 117, p. 040601, 2016.
- [248] G. Usaj, H. M. Pastawski, and P. R. Levstein, “Gaussian to exponential crossover in the attenuation of polarization echoes in NMR,” *Mol. Phys.*, vol. 95, pp. 1229–1236, 1998.
- [249] J. Li, R. Fan, H. Wang, B. Ye, B. Zeng, H. Zhai, X. Peng, and J. Du, “Measuring out-of-time-order correlators on a Nuclear Magnetic Resonance quantum simulator,” *Phys. Rev. X*, vol. 7, p. 031011, 2017.
- [250] R. J. Lewis-Swan, A. Safavi-Naini, A. M. Kaufman, and A. M. Rey, “Dynamics of quantum information,” *Nat. Rev. Phys.*, vol. 1, pp. 627–634, oct 2019.
- [251] S. Xu and B. Swingle, “Scrambling dynamics and out-of-time-ordered correlators in quantum many-body systems,” *PRX quantum*, vol. 5, no. 1, p. 010201, 2024.
- [252] A. Kitaev, “A toy quantum black hole.” in Brown Physics Colloquium, March 6, 2017.
- [253] W.-K. Rhim, A. Pines, and J. S. Waugh, “Violation of the spin-temperature hypothesis,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 25, pp. 218–220, 1970.
- [254] H. Cho, T. D. Ladd, J. Baugh, D. G. Cory, and C. Ramanathan, “Multispin dynamics of the solid-state NMR free induction decay,” *Phys. Rev. B*, vol. 72, p. 054427, 2005.

- [255] P. R. Levstein, A. K. Chattah, H. M. Pastawski, J. Raya, and J. Hirschinger, “NMR polarization echoes in a nematic liquid crystal,” *J. Chem. Phys.*, vol. 121, pp. 7313–7319, 2004.
- [256] I. García-Mata, R. A. Jalabert, and D. A. Wisniacki, “Out-of-time-order correlations and quantum chaos,” *Scholarpedia*, vol. 18, no. 4, p. 55237, 2023.
- [257] E. B. Rozenbaum, S. Ganeshan, and V. Galitski, “Lyapunov exponent and Out-of-Time-Ordered correlator’s growth rate in a chaotic system,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 118, p. 086801, 2017.
- [258] C. Sánchez, H. Pastawski, and A. Chattah, “Low perturbation limit decoherence analyzed by scaling the double quantum hamiltonian,” *Journal of Magnetic Resonance Open*, vol. 16-17, p. 100104, 2023.
- [259] T. Schuster and N. Y. Yao, “Operator growth in open quantum systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 131, no. 16, p. 160402, 2023.
- [260] I. García-Mata, R. A. Jalabert, and D. A. Wisniacki, “Out-of-time-order correlators and quantum chaos,” *arXiv preprint arXiv:2209.07965*, 2022.
- [261] C. P. Slichter, *Principles of magnetic resonance*. Berlin; New York: Springer-Verlag, 1990.
- [262] W.-K. Rhim, A. Pines, and J. S. Waugh, “Time-reversal experiments in dipolar-coupled spin systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 3, pp. 684–696, 1971.
- [263] J. Baum and A. Pines, “NMR studies of clustering in solids,” *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 108, pp. 7447–7454, 1986.
- [264] U. Haeberlen, *High Resolution NMR in solids*. Academic Press, 1976.
- [265] R. R. Ernst, G. Bodenhausen, and A. Wokaun, *Principles of nuclear magnetic resonance in one and two dimensions*. Oxford: Oxford Univ. Press, 1987.
- [266] M. Munowitz and A. Pines, *Principles and applications of multiple-quantum NMR*. John Wiley and Sons, Inc., 1987.
- [267] A. K. Khitrin, “Growth of NMR multiple-quantum coherences in quasi-one-dimensional systems,” *Chem. Phys. Lett.*, vol. 274, pp. 217–220, 1997.
- [268] M. Suzuki, “Generalized trotter’s formula and systematic approximants of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 51, no. 2, pp. 183–190, 1976.
- [269] H. Raedt and K. Michielsen, *Computational Methods for Simulating Quantum Computers*. 2006. arXiv preprint quant-ph/0406210.
- [270] E. B. Fel’dman and S. Lacelle, “Multiple quantum nuclear magnetic resonance in one-dimensional quantum spin chains,” *J. Chem. Phys.*, vol. 107, no. 18, p. 7067, 1997.

BIBLIOGRAFÍA

- [271] P. Cappellaro, C. Ramanathan, and D. G. Cory, “Simulations of information transport in spin chains,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 250506, Dec 2007.
- [272] P. Cappellaro, C. Ramanathan, and D. G. Cory, “Dynamics and control of a quasi-one-dimensional spin system,” *Phys. Rev. A*, vol. 76, p. 032317, Sep 2007.
- [273] T. Zhou, S. Xu, X. Chen, A. Guo, and B. Swingle, “Operator lévy flight: Light cones in chaotic long-range interacting systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 124, no. 18, p. 180601, 2020.
- [274] O. Hallatschek and D. S. Fisher, “Acceleration of evolutionary spread by long-range dispersal,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 111, no. 46, pp. E4911–E4919, 2014.
- [275] S. Chatterjee and P. S. Dey, “Multiple phase transitions in long-range first-passage percolation on square lattices,” *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 69, no. 2, pp. 203–256, 2016.
- [276] M. Foss-Feig, Z.-X. Gong, C. W. Clark, and A. V. Gorshkov, “Nearly linear light cones in long-range interacting quantum systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 114, no. 15, p. 157201, 2015.
- [277] T. Botzung, D. Hagenmüller, S. Schütz, J. Dubail, G. Pupillo, and J. Schachenmayer, “Dark state semilocalization of quantum emitters in a cavity,” *Phys. Rev. B*, vol. **102**, no. 14, p. 144202, 2020.
- [278] Y. Zhang, G. L. Celardo, F. Borgonovi, and L. Kaplan, “Optimal dephasing for ballistic energy transfer in disordered linear chains,” *Phys. Rev. E*, vol. 96, p. 052103, 2017.
- [279] Y. Zhang, G. L. Celardo, F. Borgonovi, and L. Kaplan, “Opening-assisted coherent transport in the semiclassical regime,” *Phys. Rev. E*, vol. 95, p. 022122, Feb 2017.
- [280] C. Sanderson and R. Curtin, “Armadillo: a template-based c++ library for linear algebra,” *Journal of Open Source Software*, vol. 1, no. 2, p. 26, 2016.

Agradecimientos

A Horacio, quien desde el momento cero apostó por este doctorado, mostrando ser una persona extremadamente generosa, abierto a compartir sus conocimientos y discutir ideas no solo sobre física, sino también en otras ciencias, filosofía, religión, trekking y música.

Al Lanais, quien me dio la bienvenida a FAMAF, en particular: a Pablo Zangara por sus consejos y enseñanzas, al “grupo chico” (Claudia Sánchez y Karina Chattah), por su acompañamiento y miradas experimentales.

A todos nuestros colaboradores, particularmente a Lucas Fernandez-Alcazar, Luca Celardo, Fausto Borgonovi y Francesco Mattioli, por estar siempre disponibles para discutir ideas, trabajos, dar sugerencias y correcciones. A todos los que me abrieron sus puertas para conferencias y visitas científicas, destacando a Fausto, Brian Swingle, Jiansu Cao, Ilia Tutunnikov y Rodolfo Jalabert.

A los miembros del jurado, Hernan Calvo, Federico Pont y Diego Wisniacki, por las correcciones, sugerencias, y conexiones nuevas que ayudaron a mejorar esta tesis.

A la, históricamente considerada la mejor de FAMAF, Oficina 324. A todos los amigos y colegas que pasaron por la misma durante mi estancia, destacando a Santiago Fernandez-Bodin, Bruno Buffa, Joaquin Pelle y Matín Mendez. A la Tertulia del Café y el Club de los domingos por los empujones necesarios al final.

A mis amigos de Balseiro y de María Juana, quienes siempre están presentes a la distancia. Particularmente a Leandro Vallejos, quien a través de su interés en la ciencia y buena onda ayudó a mantener la motivación, y a Nacho Barrale, quien es la prueba de que la amistad no necesita frecuencia.

A Mundo Gardner, que dios y la patria nos perdonen.

A las instituciones que permitieron este proyecto, en particular a la Universidad Nacional de Córdoba y al CONICET, y a todas las personas que trabajan día a día para mantener este sistema funcionando, desde las que están directamente involucradas a las que ni siquiera saben de su existencia.

A mi familia, quien me apoya desde siempre. A mis padres, por ser la piedra fundacional de mi educación y un ejemplo a seguir, a mi hermana, porque no podría haber tenido una mejor.

A mi amore, Lourdecita, quien me acompañó ya el 38.7 % de mi vida (y contando!), por mucho más de lo que se puede enumerar en los agradecimientos de una tesis.