

TRANSICIONES DE FASE Y ENTROPIA CUANTICA

L. Arrachea, N. Canosa*, A. Plastino*, M. Portesi, R. Rossignoli**

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas,
Universidad Nacional de La Plata, CC 67, 1900 La Plata.

Se examina la posibilidad de predecir las transiciones de fase del estado fundamental de un sistema cuántico finito, conociendo la entropía cuántica de estos estados, definida en base a la Teoría de la Información.

INTRODUCCION

En el estudio de fenómenos críticos es usual recurrir a tratamientos tales como el campo medio, que permiten analizar el comportamiento de un sistema cuántico en el límite termodinámico. Sin embargo, para sistemas finitos, la descripción proporcionada en la vecindad de los puntos críticos, muchas veces resulta inadecuada. Las transiciones de fases para tales sistemas están caracterizadas por la existencia de una región de transición [1]. En contraste con lo que ocurre con un sistema infinito, no surgen cambios abruptos en las propiedades físicas cuando se modifica algún parámetro de control apropiado, sino que éstas varían en forma continua.

En este trabajo emplearemos una versión modificada del Principio de Máxima Entropía, la "entropía cuántica" [2, 3], para analizar este tipo de fenómenos cuando se dispone de información parcial sobre el sistema.

FORMALISMO

Consideremos un sistema cuántico en un estado puro y suongamos que la única información disponible sobre el mismo es la proporcionada por un conjunto incompleto de valores medios O_i correspondientes a m observables linealmente independientes \hat{O}_i .

Sea $\{|j\rangle = 1, \dots, L\}$ un conjunto ortonormal completo conocido por el observador. Definiremos, además del operador densidad usual $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, una densidad diagonal $\hat{\rho}_d$ dada por

$$\langle j | \hat{\rho}_d | k \rangle = \delta_{jk} \langle j | \hat{\rho} | j \rangle \quad (1)$$

Supongamos ahora que los operadores \hat{O}_i son diagonales en la base elegida, es decir

$$O_i \equiv \langle \hat{O}_i \rangle = \text{Tr} \hat{\rho}_d \hat{O}_i, \quad i=1, \dots, m. \quad (2)$$

Asociada con ρ_d , introducimos la "entropía cuántica" [2, 3]

$$S_c = -\text{Tr} \hat{\rho}_d \ln(\hat{\rho}_d) \quad (3)$$

que es una medida de la falta de información relacionada con la distribución sobre la base dada.

De todos los operadores $\hat{\rho}_d$ que satisfacen las restricciones (2), elegimos aquel que maximiza (3), verificando (2). Resulta, entonces, la expresión típica de la aproximación a la mecánica estadística proporcionada por la teoría de la información [4, 5],

$$\hat{\rho}_d = \exp \left\{ -\sum_{i=0}^m \lambda_i \hat{O}_i \right\}, \quad (4)$$

donde los λ_i son multiplicadores de Lagrange que se ajustan a partir de (2). Se ha incluido la condición de normalización como restricción adicional ($\hat{O}_0 \equiv \hat{1}$). Puede probarse que esta solución existe y es única [4].

A partir de la entropía (3), si los valores medios O_i dependen de ciertos parámetros z_k , $k=1, \dots, r$, la magnitud

$$\frac{\partial S_c}{\partial z_k} = \sum \lambda_i \frac{\partial O_i}{\partial z_k} \quad (5)$$

mide la modificación de la distribución en la base común en función de la variación de las cantidades z_k . De esta forma, es posible observar cambios en la función de onda exacta a partir de información parcial.

APLICACION

Consideraremos un sistema de $N=2\Omega$ fermiones interactuantes distribuidos entre n niveles (2Ω dege-

+ Becario CONICET

* Investigador CONICET

** Investigador CONICET

nerados) de partícula independiente (p. i.), descrito por el Hamiltoniano monopolar

$$\hat{H} = \sum_i \epsilon_i \hat{G}_{ii} + \sum_{i < j} v_{ij} (\hat{G}_{ij}^2 + \hat{G}_{ji}^2), \quad (6)$$

donde los operadores colectivos

$$\hat{G}_{ij} = \sum_p \hat{c}_{pi} + \hat{c}_{pj} \quad (7)$$

satisfacen un álgebra $U(n)$ bajo conmutación y $|p, i\rangle$, $p=1, \dots, 2\Omega$, $i=1, \dots, n$, identifican los estados de p.i. Partiremos del conocimiento de los valores medios de operadores de un cuerpo

$$g_i \equiv \text{Tr} \hat{\rho}_d \hat{G}_{ii} \quad i=2, \dots, n, \quad (8)$$

y de la correspondiente matriz de covarianza

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &\equiv \text{Tr} \hat{\rho}_d \hat{G}_{ii} \hat{G}_{jj} - \text{Tr} \hat{\rho}_d \hat{G}_{ii} \text{Tr} \hat{\rho}_d \hat{G}_{jj} \\ &\equiv g_{ij} - g_i g_j, \quad i, j=2, \dots, n. \end{aligned} \quad (9)$$

donde la traza ha sido calculada en el espacio proyectado.

En el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$), el tratamiento de Hartree-Fock (exacto para valores medios intensivos) predice $n-1$ transiciones de fase de segundo orden, en los puntos críticos

$$v_c^{(i)} = i\epsilon_i - \sum_{j=1}^i \epsilon_j, \quad i=2, \dots, n, \quad (10)$$

para el caso $v_{ij} = -(1-\delta_{ij})v$, $v > 0$, donde $v_{ij} = v_{ij}(n-1)$, asociados con singularidades del valor medio de la energía.

Para sistemas finitos, sin embargo, no se presentan dichas singularidades, sino que existen intervalos del parámetro de control v donde la entropía

$$S_c = \lambda_0 + \sum_{i \geq 2} \lambda_i g_i + \sum_{i, j \geq 2} \lambda_{ij} \sigma_{ij} \quad (11)$$

exhibe fuertes variaciones, indicando las zonas en las cuales existe una redistribución de la función de onda del sistema respecto a la base común. Esto puede interpretarse como una transición entre diferentes regímenes. Las regiones críticas pueden, entonces, localizarse a partir de la ubicación de los máximos del valor absoluto de

$$S' = \frac{\partial S}{\partial v} c. \quad (12)$$

Estos rasgos se evidencian en las figuras, donde se muestran resultados numéricos para S_c y S' en función de v en las versiones $n=2$ y $n=3$ del modelo descrito. Merece ser destacado el hecho de que, a medida que aumenta el número de partículas, los máximos de (12) se agudizan, tendiendo a localizarse en los valores (10) que predice el tratamiento de campo medio.

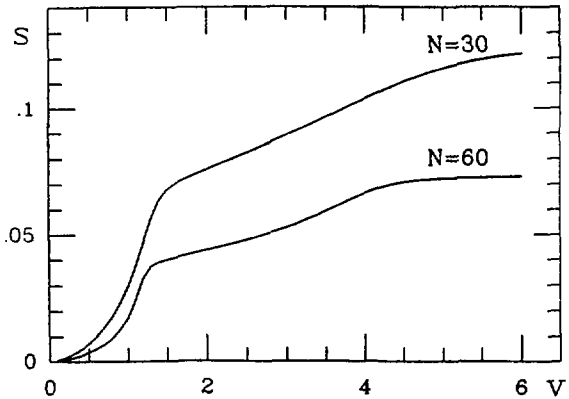


Figura 1: Las entropías exactas intensivas $s=S/N$, en función de la constante de acoplamiento $v=V/(N-1)$, en el caso de $n=3$ y para distintos valores de N .

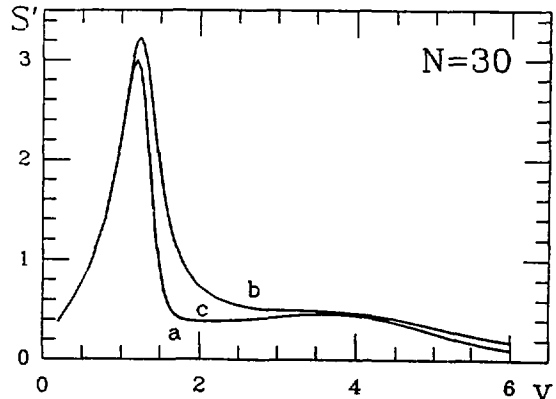


Figura 2: La cantidad S' (11) en el caso $n=3$. La curva (a) representa los resultados exactos, mientras que (c) representa los aproximados empleando operadores de uno y dos cuerpos, indistinguibles en la escala de la figura; (b) representa la aproximación empleando únicamente operadores de un cuerpo.

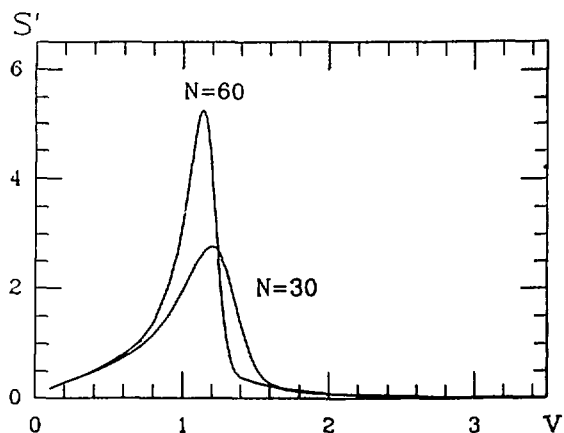


Figura 3: La cantidad S' (11) exacta, en el caso $n = 2$, para distintos valores de N .

CONCLUSIONES

En los dos casos estudiados ($n=2$ y $n=3$), el método empleado brinda una descripción razonable de las cantidades (3) y (12) cuando se dispone de información de operadores de un cuerpo, tornándose sumamente preciso cuando se incorpora información

de operadores de dos cuerpos. Esto puede observarse en los gráficos, donde se comparan dichos resultados con los valores exactos, que se obtienen en el caso en que se conocen los valores medios de un conjunto completo de operadores diagonales linealmente independientes. (3)

El esquema empleado resulta entonces adecuado para localizar las regiones de transición de un sistema finito a partir de información parcial sobre el mismo.

REFERENCIAS

1. W. D. Heiss and A. A. Kotzé, Z. Phys. A 331 (1988) 223 ; W. D. Heiss, Z. Phys. A 329 (1988) 133.
2. N. Canosa, A. Plastino and Rossignoli, Phys. Rev. A40, (1989) 516.
3. N. Canosa, A. Plastino and R. Rossignoli, Nucl. Phys. A512 (1990) 492.
4. A. Katz, "Principles of statistical mechanics" (Freeman, San Francisco, 1967).
5. A. Hobson, "Concepts in statistical mechanics" (Bordon and Breach, London, 1971) .
6. A. N. Meshkob, Phys. Rev. C3 (1971) 2214.