

Universidad Nacional de La Plata

Facultad de Ciencias Exactas
Departamento de Física

ENTRELAZAMIENTO CUÁNTICO EN SISTEMAS DE
MUCHOS CUERPOS

por Juan Mauricio Matera



Director de tesis: Dr. Raúl Rossignoli

Lugar de trabajo: IFLP Departamento de Física, FCE, UNLP - CONICET
Trabajo de tesis para optar por el título de Doctor en Ciencias Exactas, especialidad
Física, de la

Universidad Nacional de La Plata

19 de mayo de 2011

juan mauricio matera

ENTRELAZAMIENTO CUÁNTICO EN SISTEMAS DE MUCHOS
CUERPOS

A Laura y a Vera, mis dos amores

RESUMEN

En esta tesis estudiaremos diversos aspectos del entrelazamiento entre diferentes particiones de sistemas de muchos cuerpos, tanto para el estado fundamental como para estados térmicos. Consideraremos en general aquellos sistemas definidos por Hamiltonianos cuadráticos en operadores locales y en particular el caso de redes de espines. Con este fin se desarrollará en primer lugar una generalización de la aproximación denominada **CSPA** de la función de partición de sistemas cuánticos compuestos, así como del formalismo **RPA**, al que se reduce el primero en situaciones donde el sistema admite soluciones de campo medio estables. A partir de la función de partición aproximada se estimará la concurrencia de pares para redes de espines $1/2$ invariantes ante translaciones. Se mostrará también que en redes de espín $1/2$ invariantes traslacionales la función de partición en la aproximación **RPA** puede evaluarse en forma analítica.

En segundo lugar se presentará un mapeo bosónico consistente con **RPA**, que nos permitirá mapear el estado fundamental de un sistema general a un estado en el sistema de bosones que en primera aproximación pertenece a la clase de los estados Gaussianos. Esto nos permitirá estimar el entrelazamiento entre cualquier par de partes del sistema original en términos del entrelazamiento en estados Gaussianos, que puede ser evaluado exactamente. Luego se mostrarán resultados concretos en redes generales de espín s invariantes ante transformaciones de “paridad de espín z ”.

Veremos además como este tratamiento nos permite determinar las condiciones exactas para la existencia de un *campo factorizante* del sistema, esto es, configuraciones particulares del campo magnético externo para las que el sistema admite un (o en general varios) estado(s) fundamental(es) completamente separables. En los ejemplos estudiados, mostraremos cómo en el caso en que estos estados presenten ruptura espontánea de simetría el sistema desarrolla correlaciones cuánticas de largo alcance en la vecindad de ese punto, independientemente del alcance de las interacciones entre las partes. Finalmente se analizará en detalle el comportamiento exacto del sistema en esas condiciones.

RESUMEN

In this work we will study several aspects of the entanglement of different partitions of a many body system, both for the ground state as well as for the thermal equilibrium states. We will consider in general those defined by Hamiltonians which are quadratic in local observables and in particular, the case of spin arrays.

With this aim, we will first develop a generalization of the **CSPA** method for evaluating the partition function of a general composite quantum system, as well as of the **RPA** formalism, to which reduces the former in situations where the system admits stable mean field solutions. From these approximations to the partition function, the pairwise entanglement in spin $1/2$ translational-invariant arrays will be estimated. We will also show that in this kind of systems the **RPA** partition function can be evaluated in a fully analytical way. Secondly, we will show a bosonic map consistent with **RPA**, which allows us to map the ground state of a general composite quantum system to a boson state which, in first approximation, belongs to the class of Gaussian states. This allows us to estimate the entanglement between any pair of parts of the original system in terms of the entanglement of

Gaussian-states, which can be evaluated exactly. Later we will show explicit results for general, “Z Spin-Parity” invariant spin s arrays. We will also see that this treatment allows us to determine the exact conditions for the existence of a *factorizing field* in the system, i.e., particular configurations of the external magnetic field for which the system admits a (in general, several) fully separable ground state(s). In the analyzed examples, we show how the system develops, when these states present a spontaneous breaking of a Hamiltonian symmetry, long range quantum correlations in its immediate vicinity, independently of the interaction range. Finally, we will discuss in detail the exact behavior of the system in these conditions.

AGRADECIMIENTOS

A mi director, el Dr Rossignoli, y a mi codirectora de beca, la Dra Canosa, no sólo por todas las cosas que me enseñaron durante estos años, por la dedicación y el esmero que depositaron en nuestra labor diaria, y por la paciencia y el apoyo que me brindaron durante la redacción de este trabajo.

A mis compañeros y colegas, por compartir sus ideas y darme más cosas en que pensar: la investigación en solitario es mucho menos divertida.

A Laura y a Vera, a quienes dedico esta obra, por el cariño que me dan todos los días, ya que sin él, nada de esto tiene mucha importancia.

PUBLICACIONES

Las ideas discutidas en esta tesis dieron lugar a las siguientes publicaciones:

- R. Rossignoli, N. Canosa y J. M. Matera Even-odd entanglement in boson and spin systems *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, En prensa [1].
- J. M. Matera, R. Rossignoli, and N. Canosa. Evaluation of ground-state entanglement in spin systems with the random phase approximation *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 82 (5): 052332, 2010 [2].
- N. Canosa, R. Rossignoli, and J. M. Matera. Separability and entanglement in finite dimer-type chains in general transverse fields. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 81 (5): 054415, 2010 [3].
- R. Rossignoli, N. Canosa, and J. M. Matera. Factorization and entanglement in general xyz spin arrays in nonuniform transverse fields *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 80 (6): 062325, 2009 [4].
- J. M. Matera, R. Rossignoli, and N. Canosa. Evaluation of pairwise entanglement in translationally invariant systems with the random phase approximation *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 78 (4): 042319, 2008 [5].
- J. M. Matera, R. Rossignoli, and N. Canosa. Thermal entanglement in fully connected spin systems and its random-phase-approximation description. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 78 (1): 012316, 2008 [6].
- R. Rossignoli, N. Canosa, and J. M. Matera. Entanglement of finite cyclic chains at factorizing fields. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 77 (5): 052322, 2008 [7].
- N. Canosa, J. M. Matera, and R. Rossignoli. Description of thermal entanglement with the static path plus random-phase approximation. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 76 (2): 022310, 2007 [8].

ÍNDICE GENERAL

1	introducción	1	
1.1	Motivación	3	
1.2	Organización del texto	4	
I	Generalidades		7
2	medidas de entrelazamiento	9	
2.1	La descripción cuántica de los sistemas compuestos	10	
2.2	La descomposición de Schmidt	12	
2.3	El entrelazamiento como un recurso	13	
2.4	Medidas de entrelazamiento	15	
2.5	Entrelazamiento en estados Gaussianos	22	
3	estados de equilibrio térmico	27	
3.1	La transformación de Hubbard-Stratonovich	29	
II	Métodos funcionales y entrelazamiento de pares		35
4	la aproximación cspa	37	
4.1	$C[\phi]$ en la aproximación RPA	38	
4.2	Aproximación Gaussiana sobre las variables estáticas	40	
4.3	Sistemas con invarianza translacional	42	
5	aplicaciones de cspa a redes	45	
5.1	Tratamiento RPA para sistemas de espines con invarianza translacional	46	
5.2	SPA y CMFA para el modelo LMG	52	
5.3	CSPA para el caso XYZ	53	
5.4	Aproximaciones CSPA Y CMFA en el límite XXZ	65	
III	Bosonización RPA y entrelazamiento de bloques		71
6	bosonizaciones aproximadas y rpa	73	
6.0.1	Bosonización y entrelazamiento	78	
7	bosonización rpa en redes de espines	79	
7.1	El estado fundamental RPA	80	
7.2	Matrices densidad de espín en la aproximación RPA	82	

7.3	Aplicación	88	
IV	Campos factorizantes		97
8	el campo factorizante en sistemas de espines	99	
8.1	Campo factorizante en redes de espín generales	99	
8.1.1	Entrelazamiento en los estados de paridad definida	102	
8.1.2	La solución uniforme	105	
8.1.3	Solución alternante y entrelazamiento controlable en el campo factorizante	106	
8.2	Aplicaciones	107	
8.2.1	Cadenas abiertas de espín s	109	
V	Conclusiones		115
9	conclusiones y perspectivas	117	
VI	Apéndices		121
A	sistemas integrables exactamente	123	
A.1	El modelo de Lipkin-Meshkov-Glick	123	
A.2	Hamiltonianos fermiónicos cuadráticos	125	
A.3	La cadena de espín $1/2$ XY con interacciones a primeros vecinos	126	
B	algunas técnicas de aproximación	129	
B.1	Métodos perturbativos	129	
B.2	Métodos variacionales	130	
B.2.1	La aproximación de Campo Medio	132	
B.3	Quantum Monte Carlo	135	
	bibliografía	139	

ACRÓNIMOS

La siguiente es la lista de acrónimos utilizados en el texto. Se optó por la forma inglesa (indicada entre paréntesis) ya que es la forma típica en que aparece en los libros de texto y en las referencias (ya que en su mayoría están escritas en dicho idioma).

RPA	Aproximación de fases al azar (Random Phase Approximation)
MF	Campo Medio (Mean Field)
MFA	Aproximación de campo medio (Mean Field Approximation)
CMFA	Aproximación de campo medio corregida (Corrected Mean Field Approximation)
SPA	Aproximación de camino estático (Static Path Approximation)
CSPA	Aproximación de camino estático correlacionado (Correlated Static Path Approximation)
GS	Estado fundamental (Ground State)
QMC	Quantum Monte Carlo
LMG	Lipkin-Meshkov-Glick

NOTACIÓN Y CONVENCIONES

En el tema desarrollado en esta tesis se hace uso intensivo de diferentes estructuras lineales, por lo que la brevedad y claridad dependerán de una notación adecuada. Por esto, se propone la siguiente convención:

- \mathbb{F} representa un campo numérico (ej: $\mathbb{R}, \mathbb{C}, \dots$).
- Los vectores en un espacio de Hilbert se representan en notación de Dirac ($|\alpha\rangle$) mientras, que los vectores en \mathbb{F}^n por letras griegas mayúsculas (ej: Φ, Ψ, \dots , etc). La base canónica de un espacio vectorial \mathbb{F} se representa por \vec{e}_μ
- Para expresar las componentes de un vector en un espacio de Hilbert usamos simplemente el braket sobre los elementos de la base (Ej: $\langle i|\alpha\rangle$). Para expresar las componentes de un vector en \mathbb{F}^n lo hacemos mediante una letra griega minúscula (ej: $\Phi = \sum_\mu \phi^\mu \vec{e}_\mu$ en la base canónica \vec{e}_μ)

- Un índice entre paréntesis significa que en el contexto en que aparece debe entenderse como una “etiqueta”. Se usarán como índices tanto letras griegas como letras latinas, siempre en minúscula.
- Los operadores lineales son representados por letras mayúsculas (O, P, Q, \dots). Si actúan sobre un espacio de Hilbert, los elementos de matriz se representan en notación de Dirac: $\langle i|Q|j\rangle$. Las matrices en $\mathbb{F}^{n \times m}$ se representan por letras mayúsculas con índices covariantes (subíndices) y contravariantes (superíndices). El producto de dos matrices M y N se representa por MN y se escribe en componentes como $(MN)_j^i = \sum_k M_k^i M_j^k$.
- Si un índice aparece repetido en una expresión como subíndice y como superíndice, se sobreentiende la suma entre ellos (convención de Einstein). Esta convención no se aplica si 1) todas las veces aparece como subíndice o todas las veces como superíndice y 2) si el índice repetido aparece entre paréntesis (Ej: $\Psi_\mu \Psi^\mu = \sum_\mu \Psi_\mu \Psi^\mu = \sum_\mu \Psi_{(\mu)} \Psi^{(\mu)}$, pero $\Psi_{(\mu)} \Psi^{(\mu)} \neq \sum_\mu \Psi_{(\mu)} \Psi^{(\mu)}$ y $\Psi_\mu \Psi_\mu \neq \sum_\mu \Psi_\mu \Psi_\mu$). De esta manera, los elementos diagonales de M_μ^ν se expresan como $M_{(\mu)}^{(\mu)}$, y la matriz diagonal D con elementos diagonales d_α se puede expresar como $d_\alpha \mathbf{1}_\alpha^\beta$.
- Un vector producto tensorial de espacios de Hilbert A y B se escribe como $|\alpha_{(A)}\beta_{(B)}\rangle \equiv |\alpha\rangle_A |\beta\rangle_B$. En notación tensorial se utiliza un multi-índice (las componentes de $\Psi_{(AB)} = \Psi_{(A)} \otimes \Psi_{(B)}$ se escriben como $\Psi^{\mu\nu} = \Psi_{(A)}^\mu \Psi_{(B)}^\nu$). Nótese que los índices que denotan espacio aparecen entre paréntesis.

Los símbolos más usados en el texto se enumeran en el cuadro 1

$\mathbf{1}$	El operador identidad, con elementos de matriz $(\mathbf{1})_i^j = 0$ (1) si $i \neq j$ ($i = j$).
$\mathbf{0}$	El operador nulo, con elementos de matriz $(\mathbf{0})_i^j = 0$.
	Si hay ambigüedad respecto de a que espacio pertenece, se especificará como subíndice (ej: $\mathbf{1}_A$ es la identidad sobre el espacio A)
$\mathcal{O}(x^n)$	Representa términos proporcionales a potencias de x mayores o iguales a n
\sum	Representa una suma o una integral según el caso.
$\overline{\mathcal{A}}$	Si \mathcal{A} es un subsistema de \mathcal{S} , el complemento de \mathcal{A} en \mathcal{S}
$\text{tr}[Q]$	traza del operador Q
Q^t	El traspuesto del operador Q (en una base $ i\rangle$, $\langle i Q^t j\rangle = \langle j Q i\rangle$)
Q^*	El conjugado complejo del operador Q (en una base $ i\rangle$, $\langle i A^* j\rangle = (\langle i A j\rangle)^*$)
Q^\dagger	El operador adjunto de Q ($Q^\dagger = (Q^t)^*$)
$\text{tr}_{\mathcal{A}}[\rho]$	La traza parcial del estado ρ sobre el subsistema \mathcal{A}
Q^{ts}	El traspuesto parcial del operador Q sobre el subsistema \mathcal{S}
$\ln x$	Logaritmo natural de x
$\log_b x$	Logaritmo en base b de x .
	Si b se omite, se sobreentiende $b = 2$
$\mathcal{E}_{\mathcal{A}}(\rho)$	El entrelazamiento del estado ρ entre los sistemas \mathcal{A} y $\overline{\mathcal{A}}$
$\mathcal{N}_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\rho)$	La negatividad del estado ρ entre los subsistemas \mathcal{A} y \mathcal{B}
$\langle Q \rangle_\rho$	El valor medio del observable Q en el estado ρ .
$[A, B]_\pm$	El conmutador (anticonmutador) de los operadores A y B ($= AB \mp BA$). Si se omite, se sobreentiende el subíndice $+$.
\hbar	La constante reducida de Plank $1,054571628(53) \times 10^{-34} \text{J} \times \text{seg}$

Cuadro 1: Símbolos y expresiones usadas en el texto.

1

INTRODUCCIÓN

We do so in terms of the assumption that the properties of a given system exist, in general, only in an imprecisely defined form, and that on a more accurate level, they are not really well defined properties at all, but instead only potentialities, which are more definitely realized in interaction with an appropriate classical system, such as a measuring apparatus

David Bohm, "The Paradox of Einstein, Rosen, and Podolsky"

La mecánica cuántica fue introducida a principios del siglo XX con el fin de explicar el extraño comportamiento de la materia a escala microscópica. Cuando se intentaba utilizar la física clásica (fundamentalmente, la mecánica y la electrodinámica) para explicar los fenómenos en esa escala, se obtenían resultados que se encontraban en franca contradicción con la experiencia. Según estas teorías, era imposible un modelo de la materia a escala microscópica que diera cuenta de resultados experimentales tan diversos como el ordenamiento periódico de los elementos químicos, los experimentos de dispersión de Rutherford, el comportamiento del calor específico de los gases con la temperatura, etc.

La nueva teoría requirió reformular muchos de los conceptos en que se basaban las teorías físicas hasta entonces. Uno de los principales fue el concepto de partícula: en mecánica clásica, una partícula era una porción del mundo a la que se le podían atribuir ciertas propiedades medibles (fundamentalmente, su posición en el espacio, su velocidad y su masa), que caracterizan su estado. Los sistemas físicos se podían modelar así como conjuntos de partículas, de forma que el estado del sistema completo quedaba determinado por el estado de cada una de sus partículas. Si el sistema estaba "aislado", el estado del sistema en cualquier momento quedaba determinado por el estado de cada una de sus partes en un instante inicial. El estado del sistema podía ser entonces determinado con la precisión que se quisiera y en cualquier instante por medio un cierto número de mediciones suficientemente cuidadosas, que no alteraran apreciablemente el sistema.

La mecánica cuántica tiró por tierra esta construcción: en primer lugar, si bien se conserva la idea de que un sistema admite ser descrito en términos de partículas, no todas sus propiedades medibles son determinables simultáneamente. El principio de incerteza establece que no es posible determinar simultáneamente, y con precisión arbitraria, la posi-

ción y la velocidad de una partícula, y por lo tanto, el concepto de trayectoria definida pierde sentido. Una consecuencia inmediata es que dos partículas que sólo se diferencian entre sí por su posición en el espacio, pasan a ser completamente indistinguibles. En mecánica clásica, si conocemos la posición y velocidad de las dos partículas, podemos seguirlas en el tiempo y reconocer cuál es cuál en cualquier momento (a menos que se crucen). En mecánica cuántica eso no es posible, ya que al no haber trayectorias definidas, no es posible “seguir” a las partículas. Esto tiene un impacto sobre los posibles estados “distinguibiles” de un sistema, y por lo tanto, sobre la estadística.

Otra característica que distingue a la descripción cuántica es el hecho de que en general, el estado de un sistema cuántico no puede ser caracterizado a partir del estado de sus constituyentes. En 1935, Edwin Schrödinger, acuñó el término “entrelazamiento” [9] para referirse a esta propiedad, sin análogo clásico. Más específicamente, el entrelazamiento es una propiedad relacional del estado de dos partes de un sistema, que depende de cómo esas dos partes se encuentren correlacionadas en el estado dado.

Una primera consecuencia de la existencia de estados entrelazados está relacionada con *la cantidad de información* necesaria para caracterizar un estado. En un sistema clásico, el número de parámetros necesarios para caracterizar un estado (sus grados de libertad) es igual a la suma de los grados de libertad de cada una de sus partes. En un sistema cuántico, el número de grados de libertad crece exponencialmente con el número de constituyentes. Esto representa un problema a la hora de intentar *simular* un sistema cuántico: los recursos computacionales necesarios para simular sistemas cuánticos con un número reducido de constituyentes simples se vuelven rápidamente inalcanzables mediante técnicas de computación basadas en sistemas clásicos. Sin embargo, en 1982, Richard Feynman hizo notar que las limitaciones de cálculo que se tienen usando esquemas de computación clásica se podrían superar desarrollando computadoras basadas en sistemas cuánticos. Este tipo de computadoras no sólo permitirían resolver problemas de mecánica cuántica, sino posiblemente muchos otros problemas (no necesariamente de la física) intratables en un sistema clásico. En 1985 Deutsch [10] mostró por primera vez una tarea y un algoritmo cuántico para realizarla en forma más eficiente que cualquier algoritmo clásico.

Otra consecuencia de la mecánica cuántica es que el “entrelazamiento” da origen a un tipo de correlaciones que no pueden describirse clásicamente: aún conociendo perfectamente el estado, si dividimos al sistema en dos partes \mathcal{A} y $\overline{\mathcal{A}}$, existirán cantidades asociadas a \mathcal{A} y $\overline{\mathcal{A}}$ de manera que el resultado de una medida de cualquiera de estos observables sobre uno de los subsistemas estará completamente indeterminado, a la vez que existe una perfecta correlación entre los resultados de diferentes medidas en \mathcal{A} y $\overline{\mathcal{A}}$, aún cuando los observables no sean compatibles entre sí. Este tipo de correlaciones sólo podrían emerger de un modelo clásico dejando de lado el principio de *localidad*[11]. Esta demostración proponía una experiencia clave que permitiera corroborar la validez de la mecánica cuántica contra una teoría local de variables ocultas. Finalmente, a principios de los años '80 s, una serie de experimentos [12–14] confirmaron las predicciones de la mecánica cuántica.

Una tercera consecuencia está relacionada con la posibilidad de “copiar” un estado cuántico. En un sistema clásico, partiendo de un estado clásico desconocido, es posible, en primer lugar, determinarlo completamente y luego preparar una copia del sistema en el mismo estado. En un sistema cuántico, el primer paso no es posible: si no conocemos des-

de el principio el estado, no es posible realizar un conjunto de medidas que lo determinen sin alterarlo en el proceso. Se puede probar fácilmente que, según las leyes de la mecánica cuántica, no existe forma alguna de copiar un estado cuántico desconocido[15]. Por otro lado, es posible realizar una tarea que no es posible clásicamente: la teleportación de estados cuánticos[16]. En este tipo de procesos, es posible transferir el estado de un sistema C a un sistema distante B , sin necesidad de “conocer” el estado C de antemano. Esto tiene una aplicación práctica importante, la criptografía cuántica. Si se codifica información “clásica” en un estado cuántico, es posible transferirlo de forma segura a un destinatario sin riesgo de que un intermediario lo intercepte y decodifique. Esto es importante ya que las técnicas más seguras de encriptación clásicas se basan justamente en la imposibilidad de realizar tareas que una computadora cuántica sí puede realizar.

Como veremos en el capítulo 2, es posible dar medidas cuantitativas del entrelazamiento. Cuanto más entrelazado es un sistema (para una cierta partición), su simulación requiere más entrelazamiento en un procesador cuántico y una cantidad exponencialmente mayor de recursos clásicos en un procesador clásico. Por esto, poder estimar el entrelazamiento en un sistema bajo condiciones dadas es un importante problema de aplicación práctica.

Por otro lado, el entrelazamiento da una nueva perspectiva a problemas de índole teórico, como lo son caracterizar las correlaciones y fenómenos críticos en sistemas cuánticos o dar explicación a la emergencia del aspecto clásico de la realidad o de los ensambles estadísticos.

1.1 Motivación

La evaluación del entrelazamiento no es una tarea sencilla en general. En primer lugar, el entrelazamiento es una función muy sensible de los parámetros que caracterizan a un estado. Además, aún conociéndolos exactamente, la tarea de evaluar el entrelazamiento es en general un problema que se vuelve exponencialmente más difícil al aumentar el tamaño de los sistemas sobre los que se desea evaluar. Una clase especialmente importante de estados es aquella de los estados de equilibrio térmico en sistemas de partículas. Estos estados, caracterizados por un parámetro (la temperatura) son estados particularmente insensibles al entorno en que se encuentra sumergido el sistema, si la interacción con este es suficientemente débil¹. La temperatura es un parámetro relacionado con la energía media en el sistema considerado². De esta manera, un estado térmico es en general el estado de partida en que se encuentra un sistema cuántico antes de que tomemos algún control de él. Para temperaturas suficientemente altas, este tipo de estados carece de entrelazamiento alguno[18, 19], y por lo tanto es factible modelarlos correctamente con tecnología “clásica”.

¹ Cuando nos referimos a un entorno, estamos pensando en general en todos los grados de libertad que estamos ignorando, tanto aquellos asociados a sistemas localizados por fuera de la porción del universo que estudiamos, como aquellos grados de libertad internos que omitimos en el modelado.

² Desde el punto de vista de la teoría de la información, los estados térmicos son aquellos estados sobre los que ignoramos todo, salvo su energía media. En ese sentido, la temperatura es un parámetro monótono con la energía media del sistema[17]

Para algún valor de temperatura suficientemente bajo, el sistema generalmente adquiere entrelazamiento, y por lo tanto, deja de ser posible un modelado clásico. En un caso general, esto implicaría la necesidad de tecnología “cuántica” para estimar el comportamiento del sistema. Sin embargo, puede ocurrir que el estado del sistema aún sea aproximable (al menos, para algunos observables) dentro de una familia de estados (eventualmente entrelazados) suficientemente reducida. En otros casos, pueden existir representaciones (cambios de variables) que permitan reducir a una forma tratable el problema de calcular algunas cantidades, aunque no necesariamente sea factible evaluar otras.

El objetivo principal de esta tesis será desarrollar algunas técnicas de estimación del entrelazamiento entre subsistemas de sistemas de partículas interactuantes, tanto para el estado fundamental como para estados térmicos. Entre otras, destaca una familia de aproximaciones basadas en la transformación de Hubbard-Stratonovich, que permite representar el estado térmico de un sistema con interacciones como una integral funcional sobre estados de sistemas no interactuantes. Veremos como al tratar adecuadamente las diferentes contribuciones a la integral funcional, podemos obtener una aproximación robusta de los observables de entrelazamiento. Veremos además como estas aproximaciones pueden relacionarse con resultados en sistemas más simples, exactamente solubles, y para los que el entrelazamiento de sus estados térmicos es bien entendido: los sistemas de bosones con interacciones cuadráticas.

1.2 Organización del texto

Para mantener la claridad de las discusiones se definió organizar el texto en cuatro partes principales: La primera parte, formada por los capítulos 2 y 3, estará destinada a dar un marco general de trabajo, donde se darán las definiciones de muchos de los conceptos que se utilizarán en el resto de la tesis. En primer capítulo se presentará el concepto de Entrelazamiento cuántico [15], desde dos puntos de vista: por un lado, como una forma en que los sistemas cuánticos presentan correlaciones sin análogo clásico, y por otro, como un recurso necesario para la realización de ciertas tareas en el procesamiento de información cuántica. Se presentarán algunas de las medidas de entrelazamiento usuales para estados puros, y su extensión para estados mezcla. Se discutirá además el criterio de separabilidad PPT [20], y una medida de entrelazamiento relacionada: la negatividad[21]. Finalmente se presentará la evaluación exacta de esta medida en estados Gaussianos en sistemas de bosones. El entrelazamiento en esta clase de estados ha sido ampliamente estudiado, principalmente en la representación de Wigner[22, 23]. Aquí presentamos un nuevo formalismo para su tratamiento, basado en la matriz de contracciones de pares bosónicos, que, aunque equivalente a la formulación en variables continuas, resulta más adecuado en el contexto del análisis de correlaciones entre fluctuaciones cuánticas de pequeña amplitud, que se llevará a cabo en la tercera parte de la tesis. En el Cap. 3 se presentará la representación de Hubbard-Stratonovich para los estados térmicos, de la que partiremos para introducir las técnicas de aproximación que desarrollaremos en el resto de los capítulos.

La segunda parte (Cap. 4 y 5) está orientada a discutir un conjunto de técnicas dentro de lo que podríamos llamar “métodos funcionales” para la estimación de observables en estados térmicos. El énfasis se pondrá en la estimación de ciertas medidas de entrelazamiento de pares de partículas. En el Cap. 4 se discutirá en primer lugar la técnica conocida como Aproximación de camino estático correlacionado (Correlated Static Path Approximation). Originalmente esta técnica fue introducida para incluir correcciones cuánticas en sistemas de fermiones [24–26]. En esta tesis, extenderemos esta técnica para el tratamiento de sistemas cuánticos cuyos observables locales cierran álgebras generales. También se discutirá la aproximación Gaussiana completa (CMFA) y su relación con la formulación RPA [27]. Finalmente se mostrará cómo la evaluación de estas últimas pueden simplificarse enormemente en el caso de sistemas con invarianza traslacional. Vale mencionar que estos formalismos se habían aplicado hasta ahora sólo al caso de álgebras de bosones y fermiones. En este trabajo extenderemos la aplicabilidad de estas técnicas al caso de sistemas cuánticos compuestos de subsistemas con álgebras de observables generales. Estos conceptos se aplicarán en el Cap. 5 para la evaluación de la concurrencia de pares en redes de espines $1/2$ con invarianza traslacional.

En la tercera parte (Caps. 6 y 7) se desarrollará una extensión de la aproximación RPA que nos permitirá extender el método para la evaluación de correlaciones cuánticas de muchos cuerpos. Para eso, mostraremos en el Cap. 6 que RPA es equivalente a una bosonización aproximada del sistema, y como los estados térmicos de Hamiltonianos arbitrarios con interacciones de a pares se mapean en estados que, en primera aproximación, son estados Gaussianos. Se fundamentará cómo la evaluación del entrelazamiento en estos estados bosónicos se relaciona con la correspondiente al estado del sistema original, así como las condiciones bajo las cuales esta aproximación se aplica. En el Cap. 7 aplicará este desarrollo a la estimación del entrelazamiento de bloques en redes de espines con invarianza traslacional. Observaremos que en esta clase de sistemas, para ciertos valores del campo externo, el estado fundamental bosonizado es el vacío de los operadores bosónicos locales. Veremos que esto, en el caso de sistemas de espines, está relacionado con la existencia de un “campo factorizante” [4, 7, 28, 29]. En redes de espines en un campo magnético transversal, la existencia de un campo factorizante, junto con una ruptura espontánea de simetría origina la aparición de correlaciones cuánticas de largo alcance.

La cuarta parte de este trabajo (Cap. 8) estará dedicada a estudiar el comportamiento exacto del sistema en el entorno de un campo factorizante, y observaremos cómo efectivamente las condiciones de campo factorizante son equivalentes a la condición de que el vacío RPA sea no correlacionado. Veremos además que, en ciertas circunstancias, la existencia de un campo factorizante nos permite controlar el entrelazamiento del estado fundamental entre diferentes espines mediante la elección adecuada del campo externo [3, 4].

Finalmente, (en el Cap. 9) se presentarán las conclusiones generales.

Parte I
Generalidades

2

MEDIDAS DE ENTRELAZAMIENTO

Como mencionamos en la introducción, la aplicación a sistemas concretos de las leyes de la mecánica cuántica presenta un desafío a los sistemas de computación actuales, fundamentalmente originado por la presencia del entrelazamiento cuántico. Paralelamente, se espera que el control de procesos cuánticos y del entrelazamiento permita, en un futuro no muy distante, llevar a cabo diversas tareas irrealizables mediante herramientas de información clásica.

Una primera señal de las dificultades que implica el tratamiento exacto de un sistema cuántico surge a la vista al notar que cuando el número de componentes del sistema aumenta, el número de estados ortogonales posibles crece en forma exponencial.

Por ejemplo, en un sistema formado por 40 espines $s = 1/2$, el espacio de estados puros está formado por $2^{40} = 1,1 \times 10^{12}$ estados. Un vector arbitrario en ese espacio queda definido entonces por $1,1 \times 10^{12}$ coeficientes complejos, que en representación de coma flotante¹ a simple precisión representan $1,1 \times 10^{12} \times (2) \times (4\text{bytes}) = 8,8\text{TBytes}$, esto es, el almacenamiento de un tal estado supera ampliamente la capacidad de los discos rígidos actuales (típicamente, del orden del TByte). El espacio completo de estados mezcla requiere además almacenar 2^{40} de estos estados, con sus respectivos pesos, esto es, $1,1 \times 10^{12} \times 8,8\text{TB} \approx 9,68\text{Ybit}$. Si apiláramos los discos rígidos (de 8 TBytes) necesarios para almacenar esta información, formaríamos una columna de casi 40 veces la distancia Tierra-Luna.

Sin embargo, si supiéramos que los estados que nos interesan tienen una forma particular, como por ejemplo, si se trata de estados producto directo $|\alpha\rangle = \otimes_i |\alpha_i\rangle$, necesitaremos solamente tratar con los dos estados de cada espín, esto es, basta almacenar dos coeficientes complejos ($2 \times 2 \times 4\text{Bytes} = 16\text{Bytes}$) por cada espín, obteniéndose $40 \times 16\text{Bytes} = 640\text{Bytes} \approx 1/2\text{kByte}$, poco más de un 5% de la memoria central de una Apple II².

Esta clase de estados (los estados producto puros), son los que se obtienen luego de medir la componente del espín respecto de un eje en cada sitio. Sin embargo, como vimos en la sección anterior, si existen interacciones entre los espines, pasado un cierto tiempo el estado del sistema en general dejará de ser separable.

A pesar de lo gigantesco del espacio de estados, existen sistemas que admiten ser tratados exactamente en ciertas situaciones. Por ejemplo, es posible construir cualquier estado térmico de un sistema de bosones ó fermiones acoplados con interacciones cuadráticas mediante diagonalizaciones de matrices de tamaños proporcionales al número de componentes (por lo que el costo computacional es proporcional al cubo del tamaño del sistema [30]). Además, en los estados resultantes, es posible evaluar cualquier correlación en términos de las correlaciones de pares. En otros sistemas interactuantes, es posible encontrar soluciones exactas para el estado fundamental, e incluso para cualquier estado de equilibrio

¹ En el estándar IEEE 754 [30]

² una de las primeras computadoras de uso hogareño

térmico, pero con un enorme costo computacional para la evaluación de las correlaciones. Un ejemplo de esto es el caso de las cadenas con acoplamientos a primeros vecinos, que se resolverá exactamente en el apéndice A. En general, las soluciones exactas son posibles cuando somos capaces de reescribir el sistema en términos de ciertos observables respecto de los cuales los estados de interés no son entrelazados.

La mayoría de los sistemas de interés físico no disponen de soluciones exactas, por lo que su tratamiento se realiza por medio de diversas técnicas de aproximación (algunas de ellas serán desarrolladas en el apéndice B). Nuevamente, el éxito de estas técnicas dependerá de cuan entrelazado se encuentre el estado exacto del sistema respecto de los observables de interés.

De esta forma, el entrelazamiento resulta ser un obstáculo desde el punto de vista del tratamiento clásico de sistemas cuánticos, y un recurso desde el punto de vista de la computación cuántica, suponiendo que se disponga de sistemas cuánticos controlables.

El objetivo de este capítulo será presentar algunas medidas de entrelazamiento, que nos permitirán darle un sentido cuantitativo a estas afirmaciones. El plan será en primer lugar, mostrar cómo es posible expresar cualquier estado puro bipartito en una forma en que la separabilidad tome una forma explícita: la descomposición de Schmidt. Daremos entonces una definición para el entrelazamiento “bipartito” en un estado puro. Luego, presentaremos una aplicación en la que el entrelazamiento funciona como un recurso: el proceso de teleportación cuántica. Seguidamente, presentaremos la extensión de la definición de entrelazamiento para estados mezcla generales y analizaremos las dificultades que presenta aplicar esa definición en sistemas generales. Mostraremos entonces cómo se puede evaluar para el caso de un estado general de un sistema formado por dos subsistemas, cada uno de los cuales es un sistema de dos estados.

Finalmente, presentaremos el concepto de testigo de entrelazamiento, y analizaremos uno de los más importantes: el criterio de Peres[20]. Veremos cómo se puede construir un estimador de entrelazamiento basado en ese criterio.

2.1 La descripción cuántica de los sistemas compuestos

La estructura del espacio de Hilbert en un sistema compuesto viene dada por el producto directo de los espacios de Hilbert de cada una de sus partes constituyentes. Llamaremos subsistemas a cada una de estas partes. Los observables relacionados exclusivamente con un subsistema actuarán sólo sobre su espacio de Hilbert correspondiente. La estructura producto reproduce el hecho de que las observaciones sobre dos objetos *distintos* deben ser compatibles: En el espacio completo, un observable $Q(i)$ que sólo actúa sobre el espacio i -ésimo, vendrá dado por

$$Q(i) = \mathbf{1}_1 \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_{i-1} \otimes Q(i) \otimes \mathbf{1}_{i+1} \dots \otimes \mathbf{1}_n \quad (2.1)$$

donde $\mathbf{1}_k$ representa al operador identidad sobre el espacio k -ésimo. Luego, $Q(i)$ será compatible (conmutará) con cualquier otro operador $Q(j)$ que actúe sobre un espacio distinto

$$Q(i)Q(j) = \mathbf{1}_1 \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_{i-1} \otimes Q(i) \otimes \dots \otimes Q(j) \otimes \mathbf{1}_{i+1} \dots \otimes \mathbf{1}_n = Q(j)Q(i) \quad (2.2)$$

La estructura producto directo implica que no hace falta conocer el estado del sistema completo para hacer predicciones estadísticas sobre el valor de una parte del sistema: Si Q es un observable cualquiera de un subsistema \mathcal{A} del sistema $\mathcal{S} = \mathcal{A}|\bar{\mathcal{A}}$, cuando \mathcal{S} se encuentra en el estado $|i_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}}\rangle \equiv |i\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |j\rangle_{\bar{\mathcal{A}}} \equiv |i\rangle_{\mathcal{A}}|j\rangle_{\bar{\mathcal{A}}}$, el valor medio de Q es

$$\langle Q \rangle = \sum_{ii'} \sum_{jj'} \langle i_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}} | \rho | i'_{\mathcal{A}}j'_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \text{tr} \left[Q | i_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \langle i'_{\mathcal{A}}j'_{\bar{\mathcal{A}}} | \right] \quad (2.3)$$

con

$$\rho = \sum_{ii'} \sum_{jj'} \langle i_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}} | \rho | i'_{\mathcal{A}}j'_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle | i_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \langle i'_{\mathcal{A}}j'_{\bar{\mathcal{A}}} |$$

la matriz densidad del estado del sistema \mathcal{S} . Si $Q = Q_{\mathcal{A}} \otimes \mathbf{1}_{\bar{\mathcal{A}}}$, el valor medio se puede reescribir como

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle &= \sum_{ii'} \sum_{jj'} \langle i_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}} | \rho | i'_{\mathcal{A}}j'_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \text{tr} \left[Q_{\mathcal{A}} | i_{\mathcal{A}} \rangle \langle i'_{\mathcal{A}} | \otimes | j_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \langle j'_{\bar{\mathcal{A}}} | \right] \\ &= \sum_{ii'} \sum_{jj'} \langle i_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}} | \rho | i'_{\mathcal{A}}j'_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \text{tr} [Q_{\mathcal{A}} | i_{\mathcal{A}} \rangle \langle i'_{\mathcal{A}} |] \text{tr} [| j_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \langle j'_{\bar{\mathcal{A}}} |] \\ &= \sum_{ii'} \text{tr} [Q_{\mathcal{A}} | i_{\mathcal{A}} \rangle \langle i'_{\mathcal{A}} |] \sum_{jj'} \langle i_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}} | \rho | i'_{\mathcal{A}}j'_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \text{tr} [| j_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \langle j'_{\bar{\mathcal{A}}} |] \\ &= \sum_{ii'} \langle i'_{\mathcal{A}} | Q_{\mathcal{A}} | i_{\mathcal{A}} \rangle \left(\sum_j \langle i_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}} | \rho | i'_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \right) \\ &= \text{tr}_{\mathcal{A}} [Q_{\mathcal{A}} \rho_{\mathcal{A}}] \end{aligned}$$

donde definimos

$$\rho_{\mathcal{A}} = \text{tr}_{\bar{\mathcal{A}}} [\rho] \quad (2.4)$$

$$\text{tr}_{\bar{\mathcal{A}}} [\rho] = \sum_{ii'} | i_{\mathcal{A}} \rangle \langle i'_{\mathcal{A}} | \left(\sum_j \langle i_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}} | \rho | i'_{\mathcal{A}}j_{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \right) \quad (2.5)$$

Llamamos $\text{tr}_{\bar{\mathcal{A}}} [\rho]$ la *traza parcial* de ρ sobre el sistema $\bar{\mathcal{A}}$. Como $\rho_{\mathcal{A}}$ es independiente de Q , y juega el mismo papel que ρ en la determinación de los observables en el sistema completo (\mathcal{S}), decimos que $\rho_{\mathcal{A}}$ es el estado del subsistema \mathcal{A} .

2.2 La descomposición de Schmidt

Supongamos ahora que estamos interesados en algunos observables de un cierto subsistema \mathcal{A} de un sistema cerrado, que se encuentra en un estado *puro* $|\psi\rangle$. El estado puro más general del sistema será de la forma

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n_{\mathcal{A}}} \sum_{j=1}^{n_{\overline{\mathcal{A}}}} C_{ij}^j |i\rangle_{\mathcal{A}} |j\rangle_{\overline{\mathcal{A}}} \quad (2.6)$$

donde $\overline{\mathcal{A}}$ es el subsistema complementario a \mathcal{A} , y C_i^j es una matriz de $n_{\mathcal{A}} \times n_{\overline{\mathcal{A}}}$ a coeficientes complejos, tales que $(C_j^i)^* C_i^j = 1$. Por medio de una descomposición en valores singulares[15], es posible reescribir C_{ij} como

$$C_i^j = U_i^k D_k^{k'} V_{k'}^j \quad (2.7)$$

donde U_i^j y $V_{k'}^j$ son matrices unitarias de dimensión $n_{\mathcal{A}}$ y $n_{\overline{\mathcal{A}}}$ respectivamente, y $D_k^{k'}$ es una matriz de dimensión $n_{\mathcal{A}} \times n_{\overline{\mathcal{A}}}$ diagonal, semidefinida positiva, con elementos diagonales $\sqrt{p_k}$ de forma que $\sum_k p_k = D_k^{k'} D_{k'}^k = (C_i^j)^* C_j^i = 1$. Luego, es posible reescribir el estado en la forma

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{\chi} \sqrt{p_k} |k\rangle_{\mathcal{A}} |k\rangle_{\overline{\mathcal{A}}} \quad (2.8)$$

con $|k\rangle_{\mathcal{A}} = \sum_i U_i^k |i\rangle_{\mathcal{A}}$, $|k\rangle_{\overline{\mathcal{A}}} = \sum_j V_j^k |j\rangle_{\overline{\mathcal{A}}}$ y $\chi \leq n_{\mathcal{A}}, n_{\overline{\mathcal{A}}}$. A esta forma de reescribir un estado se la conoce como Descomposición de Schmidt[15] y al coeficiente χ el número de Schmidt de la descomposición. Naturalmente, si $\chi = 1$ el estado es un estado producto. Diremos entonces que un estado puro de un sistema está entrelazado respecto de una bipartición $\mathcal{A}|\overline{\mathcal{A}}$ si el número de Schmidt en esa bipartición $\chi > 1$.

Observemos qué ocurre al efectuar una medida de $Q_{\mathcal{A}} = \sum_m \lambda_m P_m$ en el sistema \mathcal{A} :

$$\langle Q_{\mathcal{A}} \rangle = \sum_{kk'} \sqrt{p_k p_{k'}} \langle k|Q_{\mathcal{A}}|k'\rangle_{\mathcal{A}} \langle k|k'\rangle_{\overline{\mathcal{A}}} = \sum_k p_k \langle k|Q_{\mathcal{A}}|k\rangle_{\mathcal{A}} = \text{tr}_{\mathcal{A}} [\rho_{\mathcal{A}} Q_{\mathcal{A}}] \quad (2.9)$$

donde $\langle i|\rho_{\mathcal{A}}|i'\rangle = U_i^k p_k (U_{k'}^i)^*$. Este operador $\rho_{\mathcal{A}}$ es naturalmente el *operador densidad del subsistema \mathcal{A}* (Ec. (2.4)).

Si $\chi = 1$, $\rho_{\mathcal{A}}$ tendrá un único autovalor no nulo, igual a 1, por lo que $\rho_{\mathcal{A}}$ también es un estado puro; en caso contrario, el resultado será un estado mezcla. De esta manera, el número de Schmidt es, para estados puros, una primera “medida” del entrelazamiento entre dos subsistemas complementarios. El problema de esta medida es que dos estados muy próximos entre si (en el sentido de la norma \mathcal{L}_2 definida en el espacio de matrices positivas) pueden tener números de Schmidt muy distintos. En las secciones siguientes discutiremos medidas menos singulares que esta, así como su extensión a estados mezcla. Antes de eso, analizaremos cómo podemos entender también el entrelazamiento como la medida de un “recurso”. Para eso, en la sección siguiente, se discutirá la implementación de un proceso cuántico sin análogo clásico: la teleportación de estados. Veremos cómo el entrelazamiento juega un papel fundamental en ese proceso.

2.3 El entrelazamiento como un recurso

Quizás la manera más simple de entender qué es lo que mide la cantidad de entrelazamiento (en tanto recurso) sea a través de un ejemplo en el que se implemente una tarea no-clásica. Uno de los ejemplos más simples es el de la “teleportación” de estados cuánticos [16].

En la versión más simple del protocolo de teleportación, tenemos dos sistemas: un primer sistema compuesto por dos espines 1/2, \mathcal{A} y \mathcal{B} , preparado en un estado puro $|\mathcal{AB}\rangle$ conocido y un sistema \mathcal{C} formado por un espín 1/2 en un estado puro $|\psi\rangle$ desconocido. Los sistemas \mathcal{A} y \mathcal{B} no pueden interactuar directamente entre ellos después de preparado el estado, ya que se encuentran a distancias grandes uno del otro.

Supongamos que el estado $|\mathcal{AB}\rangle$ es el estado

$$|\mathcal{AB}\rangle = |\text{singlete}\rangle = \frac{|\uparrow\rangle_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}} - |\downarrow\rangle_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}}{\sqrt{2}} \quad (2.10)$$

donde $|\uparrow\rangle_{\mathcal{S}}$ ($|\downarrow\rangle_{\mathcal{S}}$) es el autoestado del operador S_z en el sistema \mathcal{S} (para $\mathcal{S} = \mathcal{A}$ ó \mathcal{B}) con proyección positiva (negativa)³. El estado del sistema \mathcal{C} es de la forma $|\mathcal{C}\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$ con α y β dos coeficientes complejos desconocidos tales que $\alpha^*\alpha + \beta^*\beta = 1$

De esta manera, el estado inicial del sistema es

$$|\psi\rangle_0 = \alpha \frac{|\uparrow\rangle_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{C}} - |\downarrow\rangle_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{C}}}{\sqrt{2}} + \beta \frac{|\uparrow\rangle_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{C}} - |\downarrow\rangle_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{C}}}{\sqrt{2}} \quad (2.11)$$

Si ahora alteramos temporalmente el hamiltoniano del sistema de manera que por un cierto período de tiempo exista una interacción entre los espines \mathcal{B} y \mathcal{C} con hamiltoniano $H_{BC} = b(S_x^{(\mathcal{B})} - S_z^{(\mathcal{C})}) + \frac{v}{\hbar}S_x^{(\mathcal{B})}S_z^{(\mathcal{C})}$, donde b es un campo de magnitud $v/2$ aplicado en la dirección del eje x (z) sobre el espín \mathcal{B} (\mathcal{C}). Si la interacción y el campo magnético se aplican durante un tiempo $t_1 = \pi/v$, el correspondiente operador de evolución $U = \exp(-it_1H_{BC}/\hbar) = i^{-1/2}U_{CNot}$ tiene el efecto de (además de multiplicar el estado por una fase global irrelevante $i^{-1/2}$) invertir la orientación del espín en \mathcal{B} si el espín \mathcal{C} está orientado hacia arriba, y dejarlo en su estado original si se encuentra hacia abajo. Llamamos a esta operación “control not”, ya que el estado del espín \mathcal{C} “controla” la aplicación o no de la operación “Not” (cambio de estado)⁴. Luego de aplicada esta operación el estado del sistema será:

$$|\psi\rangle_1 = U_{CNot}|\psi\rangle_0 \quad (2.12)$$

$$= \alpha \frac{|\uparrow\rangle_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{C}} - |\downarrow\rangle_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{C}}}{\sqrt{2}} + \beta \frac{|\uparrow\rangle_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{C}} - |\downarrow\rangle_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{C}}}{\sqrt{2}} \quad (2.13)$$

³ Este estado es un autoestado del operador espín total del sistema $J^2 = (\vec{S}_{\mathcal{A}} + \vec{S}_{\mathcal{B}})^2$ con autovalor 0, esto es, el estado singlete del sistema.

⁴ Se ha demostrado que cualquier operación cuántica se puede simular en un sistema de espines 1/2 en el que se puedan construir la operación U_{CNot} junto con algunas operaciones locales (operaciones single-qubit). La forma concreta de la interacción que da lugar a la operación U_{CNot} en principio no es del todo relevante, ya que siempre podemos, mediante la aplicación de campos magnéticos adecuados, “rotar” los coeficientes de la interacción.

El siguiente paso consiste en aplicar a C un campo magnético en la dirección $(1, 0, 1)/\sqrt{2}$ de intensidad b durante un tiempo $t_H = 2\pi/b$. Esta operación implementa la transformación unitaria *local*

$$U_H = i \exp(-it_H b(S_x^{(C)} + S_z^{(C)})/\sqrt{2}/\hbar) = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}(S_x^{(C)} + S_z^{(C)}).$$

Aplicando esta operación a $|\psi\rangle_1$ obtenemos

$$|\psi\rangle_2 = U_H|\psi\rangle_1 \quad (2.14)$$

$$= \alpha \frac{|\uparrow\rangle_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{C}} - |\downarrow\rangle_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{C}} + |\uparrow\rangle_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{C}} - |\downarrow\rangle_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{C}}}{2} \quad (2.15)$$

$$+ \beta \frac{-|\uparrow\rangle_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{C}} + |\downarrow\rangle_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{C}} + |\uparrow\rangle_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{C}} - |\downarrow\rangle_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{C}}}{2} \quad (2.16)$$

$$= \frac{1}{2} [(\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle)_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{C}} - (\alpha|\downarrow\rangle - \beta|\uparrow\rangle)_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{C}} + \quad (2.17)$$

$$+ (\alpha|\uparrow\rangle - \beta|\downarrow\rangle)_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{C}} - (\alpha|\downarrow\rangle + \beta|\uparrow\rangle)_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}}|\downarrow\rangle_{\mathcal{C}}] \quad (2.18)$$

Si ahora se mide S_Z en \mathcal{B} y en \mathcal{C} , y el resultado de la medida en \mathcal{B} es que el espín está hacia abajo, se realiza una rotación de π en torno al eje x del sistema \mathcal{A} . Luego, si la medida en \mathcal{C} resulta ser hacia arriba, realizamos una rotación de π en torno al eje z . El estado final del sistema $\mathcal{A} + \mathcal{B} + \mathcal{C}$ será un estado producto, en el que el sistema \mathcal{A} se encuentra ahora en el estado en que se encontraba el sistema \mathcal{C} ⁵. Naturalmente, si el estado en que \mathcal{C} se encontraba al principio es una mezcla estadística de estados puros, ρ será una *combinación convexa* de estados puros⁶, el estado final de \mathcal{A} será esa misma combinación convexa.

Por otro lado, no tenemos la misma libertad para elegir el estado del sistema $\mathcal{A} + \mathcal{B}$ si queremos realizar esta operación exactamente. Más aún, sólo podemos realizar la teleportación si el estado de $\mathcal{A} + \mathcal{B}$ es un estado puro, que puede conseguirse aplicando transformaciones unitarias *locales* al estado $|\text{singlete}\rangle$ (Ec. (2.10)).

Existen además operaciones locales que llevan al sistema $\mathcal{A} + \mathcal{B}$ a un estado producto (por ejemplo, la medida de los espines locales). Es fácil ver que es imposible teleportar un estado desconocido $\rho_{\mathcal{C}}$ al subsistema \mathcal{A} si el estado de $\mathcal{A} + \mathcal{B}$ es un estado producto: lo mejor que podríamos hacer es “medir” directamente \mathcal{C} , y de acuerdo al resultado, fijar el

5 Como \mathcal{A} se encuentra en un lugar distante de donde se realizaron las medidas de los sistemas \mathcal{B} y \mathcal{C} , el procedimiento requiere “comunicación clásica” entre el sistema \mathcal{B} y \mathcal{A} .

6 Una combinación convexa de operadores semidefinidos positivos se define como una combinación lineal de dichos operadores, con pesos todos positivos:

$$\rho = \sum_i p_i \rho^{(i)}$$

con $0 \leq p_i \leq \dots \leq p_j \leq 1$ donde $\rho^{(i)}$ son operadores definidos positivos. Por lo que discutimos en las secciones anteriores, todo operador densidad puede expresarse como una combinación convexa de operadores densidad asociados a estados puros, esto es, $(\rho^{(i)})^2 = \rho^{(i)}$, interpretando a cada p_i como la probabilidad de tomar un sistema en el estado puro $\rho^{(i)}$ de un ensamble de sistemas preparados en alguno de los estados puros ρ^i . En la Sección siguiente se discutirá esta idea en más detalle.

estado de \mathcal{A} , pero en ese caso, no estaríamos “teleportando” el estado original, sino que estaríamos *preparando* un estado, en función de un resultado en principio aleatorio. Por otro lado, si quisiéramos teleportar el estado de un segundo sistema $|\mathcal{C}'\rangle$, necesitaríamos un nuevo par de espines $\mathcal{A}' + \mathcal{B}'$, ya que los que usamos antes están ahora en un estado producto. Esto muestra por qué el entrelazamiento se entiende como un recurso: al utilizarse para realizar una tarea, el entrelazamiento se “degrada” al igual que ocurre, por ejemplo, con la energía necesaria para realizar un trabajo. Veamos ahora cómo es posible “medir” la cantidad de este recurso respecto de un estado particular de un sistema.

2.4 Medidas de entrelazamiento

La entropía como medida de entrelazamiento en estados puros

En un sistema que se encuentra en un estado puro $|\Psi\rangle$, definimos la entropía de entrelazamiento entre un subsistema \mathcal{A} y su complemento $\bar{\mathcal{A}}$ por la entropía asociada al estado del subsistema \mathcal{A} :

$$S_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(|\Psi\rangle) = S(\rho_{\mathcal{A}}) = S(\rho_{\bar{\mathcal{A}}}) = -\text{tr}[\rho_{\mathcal{A}} \log \rho_{\mathcal{A}}] \quad (2.19)$$

donde $\rho_{\mathcal{A}} = \text{tr}_{\bar{\mathcal{A}}} [|\Psi\rangle\langle\Psi|]$ y $\rho_{\bar{\mathcal{A}}} = \text{tr}_{\mathcal{A}} [|\Psi\rangle\langle\Psi|]$, que son isoespectrales, lo que se hace evidente en la representación de Schmidt (Sec. 2.2). La entropía de subsistema es cero para un estado producto $|\Psi\rangle = |\Psi_{\mathcal{A}}\rangle \otimes |\Psi_{\bar{\mathcal{A}}}\rangle$ y 1 para un estado singlete

$$|\text{singlete}\rangle = \frac{|\uparrow\rangle_{\mathcal{A}}|\downarrow\rangle_{\bar{\mathcal{A}}} - |\downarrow\rangle_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\bar{\mathcal{A}}}}{\sqrt{2}} \quad (2.20)$$

La acción de ningún proceso físico local sobre \mathcal{A} puede aumentar *en media* el entrelazamiento del sistema. Por ejemplo, una medida de un observable sobre el sistema \mathcal{A} puede llevar al sistema a un estado separable, pero nunca aumentar su entrelazamiento. En particular, las operaciones unitarias locales no modifican el entrelazamiento. Si el subsistema \mathcal{A} ($\bar{\mathcal{A}}$) a su vez está compuesto de varias partes \mathcal{A}_i ($\bar{\mathcal{A}}_i$), es posible, por medio de operaciones locales sobre \mathcal{A} y $\bar{\mathcal{A}}$, llevar el estado puro

$$|\alpha\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |i\rangle_{\mathcal{A}} |i\rangle_{\bar{\mathcal{A}}}$$

a una forma arbitrariamente cercana a algún estado de la forma

$$|\alpha'\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2^m}} \sum_{i=1}^{2^m} |i\rangle_{\mathcal{A}^{(1)}} |i\rangle_{\bar{\mathcal{A}}^{(1)}} \right) \otimes |\beta\rangle_{\mathcal{A}^{(2)}} |\beta\rangle_{\bar{\mathcal{A}}^{(2)}} \quad (2.21)$$

con $m \leq S_{\mathcal{A}}(|\alpha\rangle)$. Suponiendo que se disponen de suficientes copias del estado $|\alpha\rangle$, el estado $|\Psi\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |\alpha\rangle$ en el límite de $N \rightarrow \infty$ copias, se podrá llevar a un estado de la

forma (2.21) con $m = \mathcal{E}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(|\Psi\rangle) = N\mathcal{E}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(|\alpha\rangle)$. El proceso cuántico que permite hacer esto se conoce como “destilación de entrelazamiento” [15]. Un estado de la forma

$$|\Omega\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2^m}} \sum_{i=1}^{2^m} |i\rangle_{\mathcal{A}^{(1)}} |i\rangle_{\bar{\mathcal{A}}^{(1)}} \right)$$

es equivalente (identificando adecuadamente los estados) a un producto directo de m estados singlete (Ec (2.10)). De esta manera, en un estado puro, la entropía de entrelazamiento mide cuantos “estados singlete” se pueden formar (en sentido asintótico) a partir de un cierto estado arbitrario, y de esta forma, cuantos qubits pueden teletransportarse usando el entrelazamiento de ese estado. También es posible el proceso inverso: la “dilución de entrelazamiento” [15], de manera que a partir de un estado puro con una cierta cantidad de entrelazamiento, siempre es posible (en un sentido asintótico) alcanzar cualquier otro estado con una cantidad igual o menor de entrelazamiento, por medio de operaciones locales.

Desde el punto de vista de la simulación de sistemas cuánticos, otra cantidad relevante relacionada es el “entrelazamiento de formación” [15]. El entrelazamiento de formación del estado de un sistema cuántico es la cantidad mínima de entrelazamiento necesaria para simularlo (o teleportarlo) en otro sistema. Para estados puros, esta cantidad coincide con el entrelazamiento destilable; sin embargo, para estados mixtos, o para sistemas con más de dos partes, las dos medidas ya no coinciden. Veremos más adelante como se estiman estas dos cantidades.

Entrelazamiento multipartito y entrelazamiento global

Cuando un sistema está compuesto de muchas partes, la descripción del entrelazamiento entre sus constituyentes se vuelve no trivial. Consideremos por ejemplo el caso de un sistema \mathcal{S} formado por tres partes \mathcal{A} , \mathcal{B} y \mathcal{C} , de forma que $\bar{\mathcal{A}} \equiv \mathcal{B} + \mathcal{C}$. Un estado puro puede ser no separable en diferentes formas. Naturalmente una de ellas corresponde a que una de las partes (por ejemplo, \mathcal{A}) esté entrelazada con el subsistema formado por las otras dos ($\bar{\mathcal{A}}$), entrelazamiento que puede medirse a partir de las herramientas discutidas en el apartado anterior. Si en esa partición del sistema ($\mathcal{A}|\bar{\mathcal{A}}$) el estado es un estado producto, podemos analizar el entrelazamiento interno del subsistema compuesto ($\mathcal{B} + \mathcal{C}$), también a partir de su entropía de entrelazamiento. Cuando el estado presenta entrelazamiento entre \mathcal{A} y $\bar{\mathcal{A}}$ existen otras formas en que el sistema puede presentar entrelazamiento. En particular, para un sistema de tres qubits, existen dos clases no equivalentes de estados que no son separables respecto de ninguna partición del tipo $\mathcal{A}|\bar{\mathcal{A}}$: los estados tipo “GHZ” (por Greenberger-Horne-Zeilinger) y los estados “W” [31]. Los estados “GHZ” son de la forma (a menos de operaciones locales unitarias)

$$|\text{GHZ}\rangle = \frac{|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad (2.22)$$

Este tipo de estados tienen la propiedad de que, luego de una medida local, el entrelazamiento se pierde por completo. De esta manera, cualquiera de los espines se encuentra

entrelazado con el resto del sistema, pero no existe entrelazamiento de pares: el estado reducido de cualquier par es una mezcla estadística de estados producto (ver sección siguiente).

Los estados tipo “W”, por otro lado, son de la forma

$$|W\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{3}} \quad (2.23)$$

esto es, se trata de un estado que, luego de una medida en cualquiera de los sitios, puede, dependiendo del resultado de la medida, resultar en un estado separable (en el ejemplo, para una medida en la dirección \uparrow) o en uno completamente entrelazado (si el resultado es \downarrow) del complemento ⁷. Previa la medida, el estado de un subsistema de dos de los qubits es de la forma

$$\rho_{23}^W = \frac{|\downarrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\downarrow|}{3} + \frac{2}{3} \frac{|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \frac{\langle\downarrow\uparrow| + \langle\uparrow\downarrow|}{\sqrt{2}} \quad (2.24)$$

Veremos en la sección siguiente que la preparación de este tipo de estados requiere una cantidad no nula de entrelazamiento.

Podemos concluir entonces que un estado puede tener entrelazamiento (en el sentido de no ser un estado separable) y a la vez no poseer entrelazamiento en ninguno de sus subsistemas (como en el estado GHZ). Además, vemos como la medida del entrelazamiento de subsistemas involucra extender las medidas para estados puros a medidas para estados mezcla. Veamos ahora una forma de extender nuestra definición de entrelazamiento para ese caso.

Extensión a estados mezcla: Entrelazamiento de formación

Todo estado mezcla ρ ($\rho^2 \neq \rho$), puede expresarse como una “combinación convexa” de estados puros $|\alpha_i\rangle$:

$$\rho = \sum_{i=1}^m p_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \quad \text{con } 0 \leq p_m \leq p_i \leq p_1 \leq 1 \text{ y } \sum_{i=1}^m p_i = 1. \quad (2.25)$$

Supongamos que contamos con m copias del sistema en estados puros conocidos, completamente entrelazados. Por medio de operaciones locales (y comunicación clásica) siempre es posible preparar este estado, primero transformando el estado puro de cada copia en uno de los estados $|\alpha_i\rangle$, y finalmente eligiendo una de las copias al azar, con probabilidades p_i . Sin embargo, en general podemos conseguir lo mismo con mucho menos entrelazamiento: Si contamos con un número $m' < m$ de copias en estados completamente entrelazados, por medio del proceso de “dilución de entrelazamiento” podemos preparar el mismo conjunto de estados $|\alpha_i\rangle$ con por lo menos $\sum_i \mathcal{E}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(|\alpha_i\rangle)$. Si ahora nos interesa preparar un gran

⁷ A partir del resultado de la medida de uno de los espines, el estado del sistema complementario puede, con probabilidad no nula, aumentar su entrelazamiento. Sin embargo, en promedio, el entrelazamiento siempre es menor que el del estado inicial.

número (n) de copias del estado ρ , observamos que en realidad nos alcanza con disponer de un estado con entrelazamiento $n \sum_i p_i \mathcal{E}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(|\alpha_i\rangle)$. De esta manera, por cada copia del estado ρ necesitamos $\sum_i p_i \mathcal{E}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(|\alpha_i\rangle)$. Esta sin embargo no es la mínima cantidad de entrelazamiento necesaria para fabricar el estado: consideremos el estado ρ_{23}^W (Ec. (2.24)) de la sección anterior correspondiente a un subsistema formado por dos espines, que pertenece a un sistema de tres espines en un estado W . El primer término en (2.24) corresponde a un estado producto, y por lo tanto, su entrelazamiento es cero, mientras que el segundo término es un estado puro, con entrelazamiento 1. De esta manera, si se cuenta con $2/3$ de unidades de entrelazamiento por copia, un estado equivalente a ρ_{23}^W puede ser preparado. Sin embargo, consideremos esta otra preparación:

$$\rho^W = \frac{1}{2}|+\rangle^W \langle +|^W + \frac{1}{2}|-\rangle^W \langle -|^W \quad \text{donde } |\pm\rangle^W = \frac{|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\downarrow\rangle}{\sqrt{3}} \quad (2.26)$$

El entrelazamiento de los estados $|\pm\rangle^W$ coincide y es⁸

$$\mathcal{E}_{23}(|\pm\rangle^W) = \sum_{\nu=\pm} -p_\nu \log p_\nu \quad p_\pm = \frac{3 \pm \sqrt{5}}{6} \quad (2.27)$$

de manera que $\mathcal{E}_{23}(\rho_{23}^W) \approx 0,55 < 2/3$. Veremos más adelante que esta es la descomposición óptima del estado ρ^W , en el sentido de que requiere la menor cantidad de entrelazamiento por copia. Definimos entonces el “entrelazamiento de formación de un estado ρ ” [32] como la menor cantidad de entrelazamiento necesaria para preparar un gran número de copias de ρ por cada copia del estado. Esto puede formularse matemáticamente introduciendo el concepto de “techo convexo”: Consideremos un estado ρ cualquiera y una cantidad \mathcal{W} , definida sobre los estados puros. Vamos a llamar $\mathcal{P}(\rho)$ al conjunto de las posibles “preparaciones” del estado ρ , esto es, al conjunto de las posibles colecciones ($\{p_i\}, \{|\alpha_i\rangle\}$) tales que

$$\rho = \sum_i p_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$$

con $0 \leq p_1 \leq \dots \leq p_i \leq \dots \leq 1$ con $\sum_i p_i = 1$. El “techo convexo” de \mathcal{W} , $\hat{\mathcal{W}}$ es la función definida por

$$\hat{\mathcal{W}}(\rho) = \min_{\mathcal{P}(\rho)} \sum_i p_i \mathcal{W}(|\alpha_i\rangle) \quad (2.28)$$

esto es, el techo convexo nos da el mínimo promedio de la cantidad \mathcal{W} respecto de las diferentes representaciones posibles para el estado ρ como mezcla de estados $|\alpha_i\rangle$. Si \mathcal{W} es una medida de entrelazamiento (una cantidad invariante ante transformaciones locales unitarias, y monótonamente decrecientes por aplicación de operaciones locales no-unitarias), su techo convexo también lo es. De esta manera, el techo convexo de $\mathcal{S}_{\mathcal{A}}(|\Psi\rangle)$ es efectivamente el “entrelazamiento de formación del estado ρ ” según se definió más arriba y lo representamos por $\mathcal{E}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(\rho)$:

$$\mathcal{E}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(\rho) = \min_{\mathcal{P}(\rho)} \sum_i p_i \mathcal{S}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(|\alpha_i\rangle) \quad (2.29)$$

⁸ El origen de esta expresión se aclarará más adelante.

A diferencia de lo que ocurre con estados puros, esta cantidad ya no representa la cantidad de “entrelazamiento destilable” del sistema, existiendo estados con “entrelazamiento de formación” no nulo y sin “entrelazamiento destilable”. Este tipo de entrelazamiento es conocido como “entrelazamiento ligado” (“bound entangled”)[33]. Algunos ejemplos de este tipo de estados pueden verse en las referencias [34–36]. Vale decir además que, en general, la complejidad computacional del proceso de minimización sobre representaciones (2.29) crece exponencialmente con el tamaño de los sistemas considerados [37], por lo que en la gran mayoría de los casos no es una medida calculable en forma práctica.

Concurrencia

La evaluación de la entropía de un estado es de por sí una tarea complicada, ya que implica diagonalizarlo. Una medida más simple de calcular es la entropía lineal

$$L(\rho) = 2(1 - \text{tr} [\rho^2]) \quad (2.30)$$

que da cuenta de cuan “no puro” es un estado. Para un singlete, la entropía lineal de subsistema será 1, mientras que para un estado puro y separable se reduce a 0.

Definimos la “Concurrencia” [38] $C_{\mathcal{A}}(\rho)$ del estado ρ respecto de la partición $\mathcal{A}|\bar{\mathcal{A}}$ como el techo convexo de $\sqrt{L(\text{tr}_{\mathcal{A}} [|\Psi\rangle\langle\Psi|])}$:

$$C_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(\rho) = \min_{\mathcal{P}(\rho)} \sum_i p_i \sqrt{L[\text{tr}_{\mathcal{A}} [|\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|]]} \quad (2.31)$$

Si los sistemas \mathcal{A} y \mathcal{B} son sistemas de dos estados, el entrelazamiento de formación puede expresarse en función de $C_{\mathcal{A}}$ como

$$\mathcal{E}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}} = - \sum_{\nu=\pm} q_{\nu} \log q_{\nu} \quad \text{con } q_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \sqrt{1 - C_{\mathcal{A}}^2}) \quad (2.32)$$

En ese caso, la concurrencia del estado ρ puede expresarse como

$$C_{\mathcal{A}}(\rho) = \text{máx}(0, 2\lambda_1 - \text{tr} [R(\rho)]) \quad \text{con } R(\rho) = \sqrt{\sqrt{\rho}\rho^*\sqrt{\rho}}, \quad (2.33)$$

y $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$ los autovalores de $R(\rho)$, para una representación de ρ respecto de una base producto.

Una simplificación importante en este tipo de sistemas se obtiene si además suponemos que el estado del sistema, en la base producto, es de la forma ⁹

$$\rho_{\mathcal{A}\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} p_{++} & 0 & 0 & \alpha_- \\ 0 & p_{+-} & \alpha_+ & 0 \\ 0 & \alpha_+^* & p_{-+} & 0 \\ \alpha_-^* & 0 & 0 & p_{--} \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

⁹ Esta clase de estados se obtienen cuando analizamos estados de equilibrio de pares de espines 1/2 en sistemas que presentan “simetría de paridad S_z ”, que discutiremos más adelante.

La concurrencia de esta clase de estados puede expresarse en términos de los coeficientes p_{\pm} y α_{\pm} como

$$C(\rho) = \max(0, C_+, C_-) \quad (2.35)$$

$$C_+ = 2|\alpha_-| - 2\sqrt{p_{-+}p_{-+}}, \quad (2.36)$$

$$C_- = 2|\alpha_+| - 2\sqrt{p_{++}p_{--}} \quad (2.37)$$

Llamamos a C_+ (C_-) la concurrencia “paralela” (“antiparalela”) del sistema [29, 39], nombres que resultan naturales si identificamos $|\uparrow\rangle_S$ y $|\downarrow\rangle_S$ con los respectivos estados $|0\rangle_S$ y $|1\rangle_S$ de cada subsistema: C_+ y C_- son las concurrencias asociadas a estados de la forma

$$\phi_+|\uparrow\uparrow\rangle + \phi_-|\downarrow\downarrow\rangle$$

y

$$\phi_+|\uparrow\downarrow\rangle + \phi_-|\downarrow\uparrow\rangle$$

respectivamente. Por ejemplo, para el estado ρ_{23}^W (Ec. (2.24)), la concurrencia es antiparalela y su valor es $2/3^{10}$.

La negatividad

Para sistemas generales, la complejidad computacional de la evaluación de $C_{AB}(\rho)$ es la misma que la asociada a $\mathcal{E}_{AB}(\rho)$, por lo que no es práctico su uso como medida de correlaciones en general. Por esto, es importante contar con criterios operacionales que nos permitan determinar si un estado mezcla presenta entrelazamiento. Uno de los más importantes es el *criterio de separabilidad de la traspuesta parcial* de Peres [20]: si un estado ρ_{AB} es separable, entonces su traspuesta parcial respecto de cualquier base producto es un operador definido positivo. Para un estado producto directo $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$, la traspuesta parcial $(\rho_{AB})^{\text{t}_A} = \rho_A^* \otimes \rho_B$ preserva el espectro. Consideremos ahora un estado combinación convexa de estados producto directo. Por linealidad, su traspuesta parcial será

$$\left(\sum_k p_k \rho_A^{(k)} \otimes \rho_B^{(k)} \right)^{\text{t}_A} = \sum_k p_k \left(\rho_A^{(k)} \right)^* \otimes \rho_B^{(k)}$$

Si los diferentes términos no conmutan, el espectro será diferente. Sin embargo, el nuevo operador será también positivo (ya que cada término lo es). Por otro lado, para estados entrelazados esto último no es cierto en general. Más aún, para estados puros, la positividad de la traspuesta parcial es condición necesaria y suficiente para la separabilidad del estado. Para verlo, primero vamos a probar que los autovalores de la traspuesta parcial son independientes de la base producto sobre la que se define la operación: la traspuesta

¹⁰ Vale notar que las representaciones $\{p_i, |\alpha_i\rangle\} \in \mathcal{P}(\rho)$ que minimizan el entrelazamiento de formación y la concurrencia no necesariamente coinciden, a pesar de que estas cantidades son monótonas entre sí. En particular, tanto la representación (2.24) como la (2.26) del estado ρ_{23}^W minimizan ambas la concurrencia (con valor $2/3$), pero sólo la segunda minimiza el entrelazamiento de formación (con valor 2.27)

parcial definida respecto de la base ortonormal $|i'_A|j'_B\rangle = (U_A \otimes U_B)|i_A|j_B\rangle$ se relaciona con la traspuesta parcial definida en la base ortonormal $|i\rangle|j\rangle$ por la relación

$$\rho_{AB}^{\prime t_A} = ((U_A U_A^t) \otimes \mathbf{1}_B) \rho_{AB}^{t_A} ((U_A U_A^t) \otimes \mathbf{1}_B)^\dagger$$

Demostración:

$$\begin{aligned} \rho_{AB}^{\prime t_A} &= (U_A \otimes U_B) \left((U_A \otimes U_B)^\dagger \rho_{AB} (U_A \otimes U_B) \right)^{t_A} (U_A \otimes U_B)^\dagger \\ &= (U_A \otimes U_B) \left((U_A^* \otimes U_B)^\dagger \rho_{AB}^{t_A} (U_A^* \otimes U_B) \right) (U_A \otimes U_B)^\dagger \\ &= ((U_A U_A^t) \otimes \mathbf{1}_B) \rho_{AB}^{t_A} ((U_A U_A^t) \otimes \mathbf{1}_B)^\dagger \end{aligned}$$

Como U_A^t es una transformación unitaria $((U_A^t)^\dagger U_A^t = (U_A U_A^t)^\dagger = \mathbf{1}_A = \mathbf{1}_A)$ $((U_A U_A^t) \otimes \mathbf{1}_B)$ también lo es. Por lo tanto, los autovalores de la traspuesta parcial de una matriz son independientes de la base en la que se definió la operación.

Consideremos ahora un estado puro arbitrario $|\psi\rangle$, que en la base de Schmidt es de la forma

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\chi} \sqrt{p_i} |i_A\rangle |i_{\bar{A}}\rangle \quad (2.38)$$

Por lo que se discutió antes, como la base de Schmidt es una base ortonormal, podemos evaluar la traspuesta parcial del estado puro $|\psi\rangle\langle\psi|$ respecto de la base de Schmidt

$$\begin{aligned} (|\psi\rangle\langle\psi|)^{t_A} &= \sum_{ij} \sqrt{p_i p_j} (|i_A i_{\bar{A}}\rangle \langle j_A j_{\bar{A}}|)^{t_A} \\ &= \sum_{ij} \sqrt{p_i p_j} (|j_A i_{\bar{A}}\rangle \langle i_A j_{\bar{A}}|) \\ &= \sum_i p_i (|i_A i_{\bar{A}}\rangle \langle i_A i_{\bar{A}}|) + \sum_{i \neq j} \sqrt{p_i p_j} |j_A i_{\bar{A}}\rangle \langle i_A j_{\bar{A}}|. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Los dos términos en la última línea actúan sobre dos espacios ortogonales entre si. El primero corresponde a un estado mezcla, pero el segundo es un operador de traza nula, con autovalores $\pm \sqrt{p_i p_j}$, que se reducen a cero sólo si el estado es un estado separable.

El criterio PPT nos provee además de una medida cuantitativa de entrelazamiento: la *Negatividad* $\mathcal{N}_A(\rho)$ [21, 40].

$$\mathcal{N}_{AB} = \frac{\text{tr} \left[\sqrt{(\rho^{t_A})^\dagger \rho^{t_A}} \right] - 1}{2} \quad (2.40)$$

que consiste en el valor absoluto de la suma de los autovalores negativos de la traspuesta parcial, que como vimos, son independientes de la base respecto de la que se definió la operación. Para un estado puro de dos qubits, la negatividad coincide a menos de una constante con la concurrencia:

$$C_{A\bar{A}} = 2\mathcal{N}_{A\bar{A}} \quad (2.41)$$

Por completitud, se mencionará una cantidad relacionada, la negatividad logarítmica

$$E_{\mathcal{N}}^{AB} = \ln \left(\text{tr} \left[\sqrt{(\rho^{t_A})^\dagger \rho^{t_A}} \right] \right) = \ln[1 + 2\mathcal{N}_{AB}] \quad (2.42)$$

Esta cantidad es obviamente una función monótona de \mathcal{N} , que no se reduce a la entropía de entrelazamiento para estados puros. Además se trata de una cantidad que es aditiva pero no convexa [41]. Además de ser fácil de calcular, tiene varias interpretaciones operacionales importantes: es cota superior al entrelazamiento destilable del sistema [42] y proporciona un límite a la capacidad de teleportación [21].

Si bien el criterio PPT no es una condición suficiente de separabilidad en un sistema general, si se sabe que lo es para cierta clase de estados. En particular, esto ocurre para cualquier estado de dos qubits o de uno formado por qubit y un qutrit (un sistema de tres estados). Esto también es cierto, en sistemas de bosones, para ciertas particiones de los “estados Gaussianos” [43–45]. Esta clase de estados tienen la particularidad de quedar completamente determinados por los valores medios locales y las correlaciones de pares; además, son estados de equilibrio exactos de los hamiltonianos cuadráticos bosónicos, que son el punto de partida de muchas aproximaciones. En la sección siguiente analizaremos en detalle esta clase de estados y cómo es posible la evaluación de la negatividad y la entropía de entrelazamiento (Ec. (2.19)) como función de sus correlaciones de pares.

2.5 Entrelazamiento en estados Gaussianos

En esta sección se discutirá el entrelazamiento en una clase especial de estados en sistemas de bosones, los llamados “estados Gaussianos” [2, 46, 47]¹¹. Esta clase de estados son de la forma

$$\rho^b = \frac{\exp(-\beta H^b)}{\text{tr} [\exp(-\beta H^b)]}, \quad (2.43)$$

donde H^b es un operador *positivo* de la forma

$$H^b = \frac{1}{2}(\mathcal{Z} + \Phi)_j^\dagger \mathcal{H}^{ij} (\mathcal{Z} + \Phi)_i \quad (2.44)$$

donde $\mathcal{Z} = \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix}$ es un “vector” de operadores bosónicos, $\Phi = \begin{pmatrix} \phi_i \\ \phi_i^* \end{pmatrix}$ es un “vector” de escalares y \mathcal{H} es la forma cuadrática dada por

$$\mathcal{H}^{ij} = \begin{pmatrix} \Delta^{+(ij)} & \Delta^{-(ij)} \\ (\Delta^{-(ij)})^* & (\Delta^{+(ij)})^* \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

¹¹ El tratamiento convencional de esta clase de estados se desarrolla generalmente en la representación de Wigner del operador densidad, en términos de la matriz de covarianza de las variables canónicas $p_i = (a_i - a_i^\dagger)/2$ y $q_i = (a_i + a_i^\dagger)/2$. El presente formalismo sigue las convenciones usadas en la referencia [2] donde en lugar de las matrices de covarianza se utilizarán las “matrices de contracciones generalizadas”. Este formalismo, más apropiado a los efectos de este trabajo, se relaciona con el usual por medio de la transformación lineal antes mencionada.

Podemos pensar a H^b como el Hamiltoniano del sistema de bosones considerado, aunque H^b en general no es necesariamente el Hamiltoniano del sistema; más aún, el sistema de bosones considerado podría bien no ser un sistema cerrado, y por lo tanto no tener un “Hamiltoniano”, en el sentido que su evolución no es necesariamente unitaria. En cualquier caso, este estado es diagonalizable exactamente a través de transformaciones canónicas. En el límite $\beta \rightarrow \infty$ los estados Gaussianos se reducen a estados puros, que se corresponden con el estado que minimiza H^b .

Por medio de operaciones locales, es posible reescribir el estado (2.43) como

$$\rho^b = T[\phi] \frac{\exp(-\beta H^b)}{\text{tr}[\exp(-\beta H^b)]} \Big|_{\phi=0} T^\dagger[\phi] \quad (2.46)$$

donde T es el operador unitario

$$T = \exp(\Phi^\dagger \mathcal{M} \mathcal{Z}) = \prod_i \exp(-b_i^\dagger \phi_i + \phi_i^* b_i) \quad (2.47)$$

y \mathcal{M} es la “métrica” simpléctica

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}^{ij} & \mathbf{0}^{ij} \\ \mathbf{0}^{ij} & -\mathbf{1}^{ij} \end{pmatrix} = [\mathcal{Z}, \mathcal{Z}^\dagger]. \quad (2.48)$$

De esta manera, a los efectos de estudiar el entrelazamiento entre los diferentes modos bosónicos, podemos asumir siempre que $\phi = 0$.

Los *estados Gaussianos* tienen la particularidad de estar completamente caracterizados por sus correspondientes valores medios locales $\langle b_i \rangle = \phi_i$ y las correlaciones de pares $\langle b_i b_j \rangle$ y $\langle b_i^\dagger b_j \rangle$. Para ver esto, definimos en primer lugar la “matriz de contracciones generalizada”[2]

$$\mathcal{D} \equiv \langle \mathcal{Z} \mathcal{Z}^\dagger \rangle_{\rho^b} - \mathcal{M} = \begin{pmatrix} F & G \\ G^* & I + F^* \end{pmatrix}, \quad (2.49)$$

donde

$$F_{ij} \equiv \langle b_j^\dagger b_i \rangle_{\rho^b}, \quad (2.50a)$$

$$G_{ij} \equiv \langle b_j b_i \rangle_{\rho^b}. \quad (2.50b)$$

Ante una transformación canónica ¹² ($\mathcal{Z} = \mathcal{W} \mathcal{Z}'$ con $\mathcal{W} \mathcal{M} \mathcal{W}^\dagger = \mathcal{M}$), la matriz \mathcal{D} transforma como

$$\mathcal{D} = \mathcal{W} \mathcal{D}' \mathcal{W}^\dagger. \quad (2.51)$$

con $\mathcal{D}' = \langle \mathcal{Z}' \mathcal{Z}'^\dagger \rangle - \mathcal{M}$. Definimos entonces la “diagonalización simpléctica” de la matriz \mathcal{D} como la diagonalización de

$$\mathcal{D} \mathcal{M} = \begin{pmatrix} F & -G \\ G^* & -I - F^* \end{pmatrix} = \mathcal{W} \mathcal{D}' \mathcal{M} \mathcal{W}^{-1} \quad (2.52)$$

¹² Una transformación canónica (o transformación de Bogoliubov) es una transformación lineal entre los operadores bosónicos que preserva el álgebra $[\mathcal{Z}, \mathcal{Z}^\dagger] = [\mathcal{Z}', \mathcal{Z}'^\dagger] = \mathcal{M}$

con \mathcal{D}' una matriz diagonal $\mathcal{D}' = \text{diag}(f_1, \dots, f_i, \dots, 1 + f_1, \dots, 1 + f_i, \dots)$ y \mathcal{W} satisfaciendo la normalización $\mathcal{W}\mathcal{M}\mathcal{W}^\dagger = \mathcal{M}$.

Por medio de la *misma* transformación canónica es posible reescribir el estado (2.43) en forma diagonal: basta con reescribir la forma cuadrática (2.44): Si \mathcal{W} diagonaliza $\mathcal{D}\mathcal{M}$ también diagonaliza $\mathcal{M}\mathcal{H}$

$$\mathcal{M}\mathcal{H} = \mathcal{W}^{-1}\mathcal{M}\mathcal{H}'\mathcal{W}, \quad (2.53)$$

y por lo tanto podemos reescribir H^b como

$$H^b = \mathcal{Z}^\dagger \mathcal{H} \mathcal{Z} = \mathcal{Z}^\dagger \mathcal{W}^\dagger \mathcal{H}' \mathcal{W} \mathcal{Z} = \mathcal{Z}'^\dagger \mathcal{H}' \mathcal{Z}'$$

En los nuevos bosones, el estado (2.43) se factoriza como

$$\rho = \bigotimes_i \rho_i \quad (2.54)$$

donde $\rho_i \propto \exp(-\lambda_\alpha b_i^\dagger b_i)$, donde λ_α son los autovalores simplécticos de $\mathcal{M}\mathcal{H}$. En estos operadores, la matriz de correlaciones generalizada (2.49) es diagonal, con autovalores simplécticos

$$f_\alpha = \frac{1}{\exp \beta \lambda_\alpha - 1}$$

de esta manera, podemos vincular a la matriz \mathcal{H} que define la forma cuadrática H^b con la matriz de contracciones (2.49):

$$\mathcal{D}\mathcal{M} = [\exp(\beta \mathcal{M}\mathcal{H}) - \mathbf{1}]^{-1} \quad (2.55)$$

lo que prueba que efectivamente todo estado Gaussiano queda completamente determinado por su matriz de contracciones generalizada. En el límite de $\beta \rightarrow \infty$, la matriz \mathcal{D} será de la forma $\mathcal{D} = \mathcal{W}(\frac{1-\mathcal{M}}{2})\mathcal{W}^\dagger$, con todos sus autovalores simplécticos f_α nulos. Este estado representa el “vacío” de las excitaciones \mathcal{Z}' al que llamaremos $|0'\rangle$. Existe una forma cerrada de expresar la conexión de este vacío con el vacío de los bosones b [2, 48]:

$$|0'_b\rangle = C_b \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{i,j} Z^{ij} b_i^\dagger b_j^\dagger\right] |0_b\rangle, \quad Z = V(U^*)^{-1}, \quad (2.56)$$

donde U y V son los bloques de la matriz \mathcal{W}

$$\mathcal{W} = \begin{pmatrix} U & V \\ V^* & U^* \end{pmatrix}$$

de forma que $b_i = U_j^i b_j + V_j^i b_j^\dagger$. $C_b = \langle 0_b | 0'_b \rangle = \text{Det}[U^*]^{-1/2}$ es un factor de normalización y Z es una matriz simétrica. De esta manera, la matriz de contracciones para el estado puro $|0'\rangle$ vendrá dada por

$$F_{ij} \equiv \langle b_j^\dagger b_i \rangle_{0'} = (VV^\dagger)_{ij}, \quad (2.57a)$$

$$G_{ij} \equiv \langle b_j b_i \rangle_{0'} = (VU^\dagger)_{ij}. \quad (2.57b)$$

Estado de un subsistema

Por el teorema de Wick [48], el estado de cualquier subsistema \mathcal{A} es a su vez un estado Gaussiano, caracterizado por la matriz de contracciones generalizadas truncada

$$\mathcal{D}_{\mathcal{A}} = \langle \mathcal{Z}_{\mathcal{A}} \mathcal{Z}_{\mathcal{A}}^{\dagger} \rangle_{0'_b} - \mathcal{M}_{\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} F_{\mathcal{A}} & G_{\mathcal{A}} \\ G_{\mathcal{A}}^* & I + F_{\mathcal{A}}^* \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

donde $\mathcal{Z}_{\mathcal{A}}$ contiene sólo los bosones de los sitios en \mathcal{A} . Una diagonalización simpléctica de la matriz $\mathcal{D}_{\mathcal{A}}$ nos llevará a

$$\mathcal{D}_{\mathcal{A}} = \mathcal{W}_{\mathcal{A}} \mathcal{D}'_{\mathcal{A}} \mathcal{W}_{\mathcal{A}}^{\dagger}, \quad \mathcal{D}'_{\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} f_{\mathcal{A}} & 0 \\ 0 & I + f_{\mathcal{A}} \end{pmatrix}, \quad (2.59)$$

donde $f_{\mathcal{A}}^{\alpha\alpha'} = f_{\mathcal{A}}^{\alpha} \mathbf{1}^{\alpha\alpha'}$ con $f_{\mathcal{A}}^{\alpha} = \langle b'_{\alpha\mathcal{A}}^{\dagger} b'_{\alpha\mathcal{A}} \rangle_{0'} \geq 0$ ($\mathcal{D}_{\mathcal{A}} \mathcal{M}_{\mathcal{A}}$ tiene autovalores $f_{\mathcal{A}}^{\alpha}$ y $-1 - f_{\mathcal{A}}^{\alpha}$) y $\mathcal{W}_{\mathcal{A}} \mathcal{M}_{\mathcal{A}} \mathcal{W}_{\mathcal{A}}^{\dagger} = \mathcal{M}_{\mathcal{A}}$, con $\mathcal{Z}_{\mathcal{A}} = \mathcal{W}_{\mathcal{A}} \mathcal{Z}'_{\mathcal{A}}$. Para un estado puro, el entrelazamiento entre \mathcal{A} y su complemento $\bar{\mathcal{A}}$ es dado entonces por la entropía bosónica asociada,

$$\mathcal{E}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(\rho^b) = S(\rho_{\mathcal{A}}^b) = -\text{tr} [\rho_{\mathcal{A}}^b \log_2 \rho_{\mathcal{A}}^b] \quad (2.60)$$

$$= -\sum_{\alpha} f_{\mathcal{A}}^{\alpha} \log_2 f_{\mathcal{A}}^{\alpha} - (1 + f_{\mathcal{A}}^{\alpha}) \log_2 (1 + f_{\mathcal{A}}^{\alpha}). \quad (2.61)$$

Aquí $\rho_{\mathcal{A}}^b \equiv \text{tr}_{\bar{\mathcal{A}}} [|0'_b\rangle \langle 0'_b|]$ es la matriz densidad bosónica reducida del subsistema \mathcal{A} , que puede ser explícitamente expresada como

$$\rho_{\mathcal{A}}^b = C \exp[-\frac{1}{2} \mathcal{Z}'_{\mathcal{A}} \mathcal{H}_{\mathcal{A}} \mathcal{Z}'_{\mathcal{A}}] = C \exp[-\sum_{\alpha} \omega_{\mathcal{A}}^{\alpha} b'_{\alpha\mathcal{A}}^{\dagger} b'_{\alpha\mathcal{A}}] \quad (2.62)$$

donde $C = \prod_{\alpha} (1 + f_{\mathcal{A}}^{\alpha})$ y $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$, $\mathcal{D}_{\mathcal{A}}$ están relacionados por

$$\mathcal{D}_{\mathcal{A}} \mathcal{M}_{\mathcal{A}} = [\exp(\mathcal{M}_{\mathcal{A}} \mathcal{H}_{\mathcal{A}}) - I]^{-1}. \quad (2.63)$$

Aquí $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ representa la matriz del "Hamiltoniano" efectivo del subsistema \mathcal{A} con autovalores simplécticos $\omega_{\mathcal{A}}^{\alpha}$, tales que $f_{\mathcal{A}}^{\alpha} = (e^{\omega_{\mathcal{A}}^{\alpha}} - 1)^{-1}$ (y entonces $-1 - f_{\mathcal{A}}^{\alpha} = (e^{-\omega_{\mathcal{A}}^{\alpha}} - 1)^{-1}$). La Ec. (2.62) lleva así a la matriz de contracciones (2.58), y por lo tanto a los mismos valores medios que los provenientes del vacío completo $|0'_b\rangle \langle 0'_b|$ para cualquier operador del subsistema \mathcal{A} .

Por otro lado, el entrelazamiento interno dentro del subsistema \mathcal{A} respecto de la partición $\mathcal{B}|\mathcal{C}$ (donde el complemento $\bar{\mathcal{A}}$ juega el rol de un entorno) puede ser medido a través de la correspondiente negatividad (definida en la sección anterior):

$$\mathcal{N}_{\mathcal{BC}} = \frac{\text{tr} \left[\sqrt{\left(\rho_{\mathcal{A}}^{\text{tc}} \right)^{\dagger} \rho_{\mathcal{A}}^{\text{tc}}} \right] - 1}{2} \quad (2.64)$$

Si el subsistema \mathcal{B} consiste de un único modo, se puede probar que bajo esa partición el sistema no presenta entrelazamiento de tipo ligado[43], y por lo tanto, un estado con

negatividad no nula será en ese caso un estado entrelazado. Como los valores esperados con respecto a $(\rho_{\mathcal{A}}^b)^{tc}$ de un observable $Q_{\mathcal{A}}^b$ se corresponden con aquellos de $(Q_{\mathcal{A}}^b)^{tc}$ con respecto a $\rho_{\mathcal{A}}^b$, por medio de los reemplazos $F_{ji} \leftrightarrow G_{ji}$, $F_{j'j} \leftrightarrow F_{jj'}^*$, $G_{j'j} \leftrightarrow G_{jj'}^*$ en la matriz de contracciones, para $j, j' \in C$, $i \in B$, podemos construir una matriz $\tilde{\mathcal{D}}_{\mathcal{A}}$ con autovalores simplécticos $\tilde{f}_{\mathcal{A}}^{\alpha}$. Estos últimos ahora pueden ser negativos. A partir de esta matriz es posible escribir $(\rho_{\mathcal{A}}^b)^{tc}$ como en la Ec. (2.62) en términos de la matriz efectiva $\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{A}}$ correspondiente, con autovalores simplécticos $\tilde{\omega}_{\mathcal{A}}^{\alpha}$ tales que $\tilde{f}_{\mathcal{A}}^{\alpha} = (e^{\tilde{\omega}_{\mathcal{A}}^{\alpha}} - 1)^{-1}$.

Como la traza permanece sin cambios ($\text{tr} [(\rho_{\mathcal{A}}^b)^{tc}] = 1$), $|e^{-\tilde{\omega}_{\mathcal{A}}^{\alpha}}| < 1$, implicando $\tilde{f}_{\mathcal{A}}^{\alpha} > -1/2$. Un $\tilde{f}_{\mathcal{A}}^{\alpha} > -1/2$ negativo corresponde a $e^{-\tilde{\omega}_{\mathcal{A}}^{\alpha}} < 0$ y así a una matriz $(\rho_{\mathcal{A}}^b)^{tc}$, no positiva, indicando una $\rho_{\mathcal{A}}^b$ entrelazada con respecto a esta bipartición. Obtenemos entonces, notando que $(1 + e^{-\tilde{\omega}_{\mathcal{A}}^{\alpha}})^{-1} = (1 + \tilde{f}_{\mathcal{A}}^{\alpha}) / (1 + 2\tilde{f}_{\mathcal{A}}^{\alpha})$, el resultado final[2, 21, 46, 47]:

$$\text{tr} [|(\rho_{\mathcal{A}}^b)^{tc}|] = \prod_{\tilde{f}_{\mathcal{A}}^{\alpha} < 0} \frac{1}{1 + 2\tilde{f}_{\mathcal{A}}^{\alpha}}, \quad (2.65)$$

que permite la evaluación de la negatividad (2.40) en la partición $\mathcal{B}|\mathcal{C}$ del subsistema \mathcal{A} .

En el caso de una bipartición global $\mathcal{A}|\overline{\mathcal{A}}$ de un estado puro, $N_{\mathcal{A}\overline{\mathcal{A}}}$ se vuelve función de la matriz densidad reducida $\rho_{\mathcal{A}}$, a saber [49]

$$N_{\mathcal{A}\overline{\mathcal{A}}} = \frac{1}{2} (\text{tr} [|0\rangle\langle 0|^{t\overline{\mathcal{A}}}] - 1) = \frac{1}{2} [(\text{tr} [\sqrt{\rho_{\mathcal{A}}}])^2 - 1]. \quad (2.66)$$

En un sistema de bosones, esto implica que $N_{\mathcal{A}\overline{\mathcal{A}}}$, un caso límite de las Ecs. (2.64)–(2.65), puede también ser expresado sólo en términos de los autovalores simplécticos $f_{\mathcal{A}}^{\alpha}$ de la matriz de contracciones $\mathcal{D}_{\mathcal{A}}$ [2]:

$$N_{\mathcal{A}\overline{\mathcal{A}}} = \frac{1}{2} [\prod_{\alpha} (\sqrt{f_{\mathcal{A}}^{\alpha}} + \sqrt{1 + f_{\mathcal{A}}^{\alpha}})^2 - 1]. \quad (2.67)$$

3

ESTADOS DE EQUILIBRIO TÉRMICO

En los capítulos anteriores discutimos algunas propiedades generales de los sistemas cuánticos y cómo el entrelazamiento - tanto en un sentido cuantitativo como cualitativo - se relaciona, por un lado, con el carácter no clásico de las correlaciones entre las partes de un sistema, y por otro, con la medida de un recurso que nos permite realizar tareas imposibles de llevar a cabo con sistemas en el régimen clásico.

En lo que sigue, nos vamos a concentrar en una familia de estados muy general: los estados de equilibrio térmico. Como se mencionó en la introducción, estos estados son importantes en dos sentidos: por un lado, se trata del estado en que encontramos cualquier sistema cuántico antes de realizar operaciones concretas sobre él; por otro, esta clase de estados se relaciona de forma muy simple con el hamiltoniano del sistema considerado, cuando las interacciones con el ambiente son lo suficientemente débiles.

Un estado de equilibrio es necesariamente estacionario. Por eso, debe satisfacer

$$[\rho, H] = 0$$

por lo que ρ será función de H y de cualquier observable compatible con H . Además, deben ser estables frente a pequeñas perturbaciones desde el exterior. Si no tenemos ninguna restricción, el estado más estable será el estado completamente mezclado: si no sabemos nada del sistema, una perturbación externa no cambiará este hecho.

Si por otro lado conocemos alguna cantidad compatible con H , el estado más estable será aquel estado más próximo al estado completamente mezclado, dentro de la clase de estados para los que el valor medio de tales cantidades sea el correcto. Una manera de formular esta "cercanía con la identidad" consiste en minimizar la entropía relativa [15] del estado respecto del estado completamente mezclado:

$$S_{rel}(\rho, \frac{1}{\text{tr}[\mathbf{1}]} \mathbf{1}) = \text{tr} \left[\rho \ln(\rho) - \rho \ln \left(\frac{1}{\text{tr}[\mathbf{1}]} \mathbf{1} \right) \right] = -S(\rho) + \ln(\text{tr}[\mathbf{1}]) . \quad (3.1)$$

De esta manera, el estado de equilibrio del sistema será aquél que maximice la entropía del sistema, con las correspondientes restricciones $\langle Q_i \rangle_{\text{conocido}} = \text{tr}[\rho Q_i]$.

Una condición muy general consiste en asumir que la única cantidad conocida exteriormente es $\langle H \rangle$. En ese caso, es muy fácil probar que

$$\begin{aligned} \rho &= Z^{-1} \exp(-\beta H) \\ Z &= \text{tr}[\exp(-\beta H)] \end{aligned}$$

con β un parámetro que determina la energía media del sistema. Llamamos *temperatura* (T) del sistema a una cantidad proporcional a $1/\beta$.¹ Los estados térmicos son en general

¹ Actualmente se está trabajando intensamente en dar una fundamentación de la forma de los estados de equilibrio, ya no en función de la ignorancia que se tiene sobre el sistema (que no nos permite saber cuál de

estados mezcla. Sin embargo, en el caso particular de que exista un único estado puro con energía mínima, en el límite en que $T \rightarrow 0$, obtenemos un estado puro: el Estado fundamental (Ground State) (GS) del sistema. El GS de un sistema es de gran importancia ya que contiene muchas de las características cualitativas de los sistemas a bajas temperaturas, a la vez de ser más fácilmente tratable tanto matemática como computacionalmente.

Una propiedad matemática muy importante de este tipo de estados consiste en que los valores medios de cualquier observable del sistema pueden obtenerse por medio del cálculo de la derivada de Z respecto de los parámetros del Hamiltoniano: Si definimos $H_\lambda = H + \lambda Q$, y construimos $Z(\lambda) = \text{tr} [\exp(-\beta H_\lambda)]$, es fácil ver que

$$\begin{aligned} -\beta^{-1} \frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0} &= \frac{-\beta^{-1}}{Z} \frac{\partial}{\partial \lambda} \text{tr} [\exp(-\beta H_\lambda)] \\ &= \frac{1}{Z} \text{tr} \left[\int_0^1 \exp(-(1-t)\beta H) Q \exp(-t\beta H) dt \right] \\ &= \frac{\text{tr} [Q \exp(-\beta H)]}{Z} = \text{tr} [Q\rho] = \langle Q \rangle \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde en la segunda línea se desarrolló Z a primer orden en λ (ver Apéndice B.1). Por esta propiedad, Z suele llamarse también la “función generatriz” del sistema en equilibrio térmico. Otra particularidad de este estado es que el operador densidad que lo representa puede verse como la continuación analítica (a menos de una constante multiplicativa) del operador evolución $U(t) = \exp(-itH/\hbar)$ si identificamos $\beta = it/\hbar$.

La construcción explícita del estado de equilibrio para un sistema de partículas en interacción es en general un problema intratable: en un sistema de n componentes, cada uno con un espacio asociado de dimensión d_i , implica encontrar tanto los autovectores como los autovalores de una matriz hermítica de $(\prod_i d_i) \times (\prod_i d_i)$ componentes complejas, por lo que la diagonalización directa, incluso en el caso de que H sea una matriz dispersa², se vuelve rápidamente intratable. Naturalmente, si las componentes del sistema no interactúan entre sí, el problema puede descomponerse en n problemas de dimensión d_i , volviéndose tratable.

En el límite de altas temperaturas, respecto de la energía de acoplamiento entre las partículas, es factible tratar a H perturbativamente en torno al estado de un sistema sin interacciones, (Ec. (B.8b)). Por otro lado, en el límite de temperatura cero, el problema se reduce a encontrar el GS del sistema, que eventualmente puede ser degenerado. En sistemas no demasiado grandes (por ejemplo, un sistema de 20 espines 1/2) y cuyos Hamiltonianos admitan una representación local dispersa (por ejemplo, los que se obtienen en sistemas con interacciones a primeros vecinos) el problema es tratable. Sin embargo, al aumentar el número de componentes, la conectividad de la interacción, o la dimensión de los espacios de Hilbert locales, el problema deja de ser tratable en forma directa.

los estados es el correcto), sino desde la perspectiva de la dinámica de sistemas cuánticos. Ver por ejemplo [50].

² Una matriz dispersa (sparse, en inglés) es una matriz para la que elementos no nulos es mucho menor al número total de elementos.

Por ello, ha sido necesario desarrollar diversos métodos de aproximación, cada uno de ellos con un alcance de aplicación diferente. En el Apéndice B se discutirán algunos de estos métodos.

En este capítulo, presentaremos una representación del estado de equilibrio ρ conocida como la representación de Hubbard-Stratonovich[51]. En esta representación, la exponencial del operador H con interacciones se reescribe como una integral sobre operadores producto directo. Esto nos permitirá, por un lado, hacer explícito el efecto de una manipulación local sobre el estado. Por otro, servirá como punto de partida para la construcción de varias aproximaciones al estado.

3.1 La transformación de Hubbard-Stratonovich

Consideremos un sistema con un Hamiltoniano de la forma

$$H = b^\mu Q_\mu - \frac{1}{2} Q_\mu^\dagger V^{\mu\nu} Q_\nu \quad (3.3)$$

donde Q_μ son en general operadores ($Q_\mu \equiv Q_{(\mu)i}^j |i\rangle\langle j|$) que no conmutan entre si. En general, el problema de construir el estado de equilibrio térmico de H es resoluble en el caso de que $V = 0$, esto es, de H lineal en los operadores³. Stratonovich [51] descubrió una forma elegante reducir el problema de construir el estado de equilibrio térmico (Ec. (3.2)) para hamiltonianos de la forma (3.3), en términos de una integral funcional de exponenciales de operadores lineales en los Q_μ . Veamos cómo se logra esto. Consideremos el operador $\exp(-\beta H)$, con H definido como en la Ec. (3.3). Vamos a probar que esta exponencial puede escribirse como la integral funcional

$$\exp(-\beta H) = \int \mathcal{D}[\Phi] U[\phi(\tau)] e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta \Phi(\tau) V^{-1} \Phi(\tau) d\tau} \quad (3.4)$$

sobre la medida $\mathcal{D}\Phi$, definida de manera que

$$\int e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta (\Phi(\tau) - x(\tau))^\dagger V^{-1} (\Phi(\tau) - x(\tau)) d\tau} \mathcal{D}\Phi = 1 \quad \forall x(\tau) \quad (3.5)$$

donde ϕ es un “campo auxiliar” sobre el que integraremos y

$$U[\phi] = \mathcal{T} \exp\left(-\int_0^\beta h[\phi(\tau)] d\tau\right) \quad (3.6)$$

$$h[\phi(\tau)] = b^\mu Q_\mu + Q_\mu^\dagger \phi^\mu(\tau) + (\phi^\mu(\tau))^* Q_\mu \quad (3.7)$$

siendo \mathcal{T} el operador de orden temporal.

³ Esto es cierto si Q_μ son formas cuadráticas en operadores bosónicos o fermiónicos, o en general, en el caso de que los operadores Q_μ sean todos operadores “locales”, ya que en este último caso, el estado del sistema se reduce a un producto directo de estados locales.

Demostración: En primer lugar, consideremos el caso en que V es una matriz hermítica positiva con coeficientes reales. En ese caso, podemos reescribir V en forma diagonal como $W\tilde{V}W^\dagger$ con W una matriz unitaria $WW^\dagger = \mathbf{1}$ y \tilde{V} una matriz diagonal. De esta manera, podemos reescribir H como

$$H = \frac{1}{2}C - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} v^{\alpha} \tilde{Q}_{\alpha}^{\dagger} \tilde{Q}_{\alpha}$$

con $\tilde{Q}_{\alpha} = (W^\dagger)_{\alpha}^{\mu} Q_{\mu} - W_{\mu}^{\alpha} b^{\mu}$ y $C = b^{\mu} V_{\mu\nu}^{-1} b^{\nu}$. Consideremos ahora la identidad

$$\iint \exp(-(x - \sigma\alpha)^*(x - \sigma\alpha)/2\sigma) dx dx^* = 2\pi\sigma \quad (3.8)$$

donde las integrales se realizan sobre un par arbitrario de curvas C y \tilde{C} sobre el plano complejo, de manera que $C = (\tilde{C})^*$

La identidad (3.8) es válida incluso en el caso de que α sea un operador acotado, que expresa simplemente la invarianza de la medida dx respecto a translaciones arbitrarias. Esta identidad nos permite reescribir

$$\exp(\sigma\alpha^2/2) = \frac{\iint \exp(-\alpha x) \exp(-x^*x/(2\sigma)) dx dx^*}{2\pi\sigma} \quad (3.9)$$

que también es válida en el caso de que α sea un operador.

En nuestro caso, nuestro operador a exponenciar es una suma de términos cuadráticos, que en general no conmutan. Podemos sin embargo reescribir $\exp(-\beta H)$ como

$$\exp(-\beta H) = \exp(-\beta H/n) \cdot \dots \cdot \exp(-\beta H/n) \quad (n \text{ factores}) \quad (3.10)$$

a orden β/n , podemos factorizar cada exponencial como

$\exp(-\beta H/n) \approx \prod_{\alpha} \exp(-\beta v^{\alpha} \tilde{Q}^2/n)$. Usando la identidad (3.9) en cada uno de esos factores, obtenemos, a orden $1/n$

$$\exp(-\beta H) \approx \prod_{i=1}^n \prod_{\alpha} \exp\left(\frac{\beta}{2n} v^{\alpha} \tilde{Q}_{\alpha}^{\dagger} \tilde{Q}_{\alpha}\right) \quad (3.11)$$

$$\approx \prod_{i=1}^n \frac{\int \exp\left(-\frac{\beta}{2n} \phi_i^{\alpha} \tilde{Q}_{\alpha} + h.c.\right) \exp\left(-\frac{\beta}{n} \frac{(\phi_i^{\alpha})^* \phi_i^{\alpha}}{2v_{\alpha}}\right) d\phi_i^{\alpha} d(\phi_i^{\alpha})^*}{\int \exp\left(-\frac{\beta}{n} \frac{(\phi_i^{\alpha})^* \phi_i^{\alpha}}{2v_{\alpha}}\right) d\phi_i^{\alpha} d(\phi_i^{\alpha})^*} \quad (3.12)$$

En el límite de $n \rightarrow \infty$ (para operadores \tilde{Q} acotados y $\beta < \infty$), la aproximación es exacta. Pero en ese límite, el miembro derecho define la integral funcional

$$\int \mathcal{T} e^{-\int_0^{\beta} \phi^{\alpha}(\tau) \tilde{Q}_{\alpha} d\tau} e^{-\int_0^{\beta} \frac{(\phi^{\alpha})^2}{2v^{\alpha}} d\tau} \mathcal{D}\phi \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^n \frac{\int \exp\left(-\frac{\beta}{n} \phi_i^{\alpha} \tilde{Q}_{\alpha}\right) \exp\left(-\frac{\beta}{n} \frac{\phi_i^{\alpha} \phi_i^{\alpha}}{2v_{\alpha}}\right) d\phi_i^{\alpha}}{\int \exp\left(-\frac{\beta}{n} \frac{\phi_i^{\alpha} \phi_i^{\alpha}}{2v_{\alpha}}\right) d\phi_i^{\alpha}}$$

(3.13)

donde se identifica $d\tau = \beta/n$ y $\tau = i\beta/n$, y la medida $\mathcal{D}\phi$ definida por

$$\mathcal{D}\Phi = \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^n (2\pi \det(V)/\beta)^{-1} d\phi_i^\alpha d(\phi_i^\alpha)^* \quad (3.14)$$

Es fácil ver que esta medida satisface la Ec. (3.5) y es invariante ante transformaciones ortogonales generales de ϕ_i .

Consideremos finalmente el caso en que V no es definida positiva. En ese caso, vamos a reescribir

$$\mathcal{D}\Phi \mathcal{D}\Phi^* = \mathcal{D}\Phi^{(+)} \mathcal{D}\Phi^{*(+)} \mathcal{D}\Phi^{(0)} \mathcal{D}\Phi^{*(0)} \mathcal{D}\Phi^{(-)} \mathcal{D}\Phi^{*(-)}$$

donde $\Phi^{(s)}$ y $\Phi^{*(s)}$ representan los campos asociados al subespacio positivo ($s = +$), nulo ($s = 0$) o negativo ($s = -$).

La medida $\mathcal{D}\Phi^{(0)} \mathcal{D}\Phi^{*(0)}$ está concentrada en $\Phi^* = \Phi = 0$, por lo que podemos evaluar la integral sobre estos campos directamente.

La medida $\mathcal{D}\Phi^{(-)} \mathcal{D}\Phi^{*(-)}$ debe redefinirse como $\mathcal{D}\bar{\Phi}^{(-)} \mathcal{D}\bar{\Phi}^{*(-)}$ de manera que $\bar{\Phi} = i\check{\Phi}$ y $\bar{\Phi}^* = i\check{\Phi}^*$ (observese que $(\bar{\Phi}^*)^* = -(\bar{\Phi})^*$)

Mediante este cambio en la medida, la integral funcional estará bien definida en general.

—o—

La “magia” de esta transformación consiste en que usualmente, los operadores Q_μ pueden agruparse dentro de sub-álgebras cerradas $Q_{\mu i}$, de manera que

$$[Q_{\mu i}, Q_{\nu j}] = \mathbf{1}_{ij} C_{\mu\nu}^\lambda Q_{\lambda j} \quad (3.15)$$

Esto ocurre cuando el espacio de Hilbert del sistema es un espacio producto, o sea, en un sistema de partículas. Cuando esto ocurre, el operador U (Ec. (3.6)) queda factorizado en un producto directo de operadores locales:

$$U[\Phi] = \bigotimes_i U_i[\Phi^{(i)}] \quad (3.16)$$

$$U_i[\Phi^{(i)}] = \mathcal{T} \exp \left(- \int_0^\beta h_i[\phi^i] d\tau \right) \quad (3.17)$$

$$h_i[\Phi^{(i)}] = b^{\mu i} Q_{\mu i} + Q_{\mu i}^\dagger \phi^{\mu i}(\tau) + (\phi^{\mu i}(\tau))^* Q_{\mu i} \quad (3.18)$$

De esta forma, logramos algo semejante a lo que se logra en la descomposición de Schmidt (2.8) discutida en el capítulo anterior, pero con un estado mezcla: esto es, escribir el estado del sistema compuesto como una combinación lineal de operadores producto directo. Sin embargo, a diferencia del caso de la descomposición de Schmidt, donde los términos de la descomposición eran estados puros, los U_i no son estados, ya que en general no serán siquiera operadores hermíticos. Sin embargo, esta representación nos habilita a realizar de forma transparente diversas operaciones locales, por ejemplo:

- Construir trazas parciales. El efecto de tomar la traza sobre ciertos subsistemas i se reduce a remplazar cada componente $U_i(\Phi^i)$ por su correspondiente traza. Una estimación de estas trazas puede usarse luego como función de peso para evaluar una estimación de ρ_i
- La operación “transpuesta parcial”, necesaria para calcular la negatividad del estado, se realiza en esta representación mediante la conjugación de los campos y observables locales, y la inversión del “orden temporal” local.

Este tipo de construcciones se encuentran actualmente bajo investigación. En esta tesis, usaremos esta representación integral para construir aproximaciones a los estados de los subsistemas. Si bien la evaluación de la integral en general no admite una forma exacta, podemos aproximarla mediante varios métodos. Mencionemos algunos de ellos en particular:

- Evaluación numérica mediante Quantum Monte Carlo [30, 52]. En esta representación, Quantum Monte Carlo se reduce a una simple integración Monte Carlo multidimensional. La forma Gaussiana de la función de peso permite implementar con facilidad y eficiencia este tipo de aproximaciones, si suponemos que los elementos de U_i (o al menos su traza) varían suavemente dentro del soporte efectivo de la integral.
- Evaluación en la “aproximación gaussiana”⁴ de la función de partición asociada. Tomando traza sobre todos los U_i construimos una representación de la función de partición Z , evaluándose la integral en la aproximación gaussiana. Esto da origen a varios métodos de aproximación que discutiremos más adelante. A partir de una aproximación de Z , podemos obtener estimaciones de los valores medios de observables locales y correlaciones usando las relaciones (3.2).
- Evaluación como una “integral de camino estático correlacionada”[26]: Esta aproximación consiste en separar las variables de integración en “estáticas” y “dinámicas”. Las variables dinámicas se integran en la aproximación gaussiana mientras que las “estáticas” se integran luego exactamente. De este modo se obtiene una aproximación que reúne algunas de las ventajas de una integración Monte Carlo (teniendo en cuenta diferentes configuraciones con peso similar) junto con las de la aproximación Gaussiana (simplicidad del tratamiento, reducción del costo computacional y aspecto evidente de algunas propiedades analíticas del sistema).
- Evaluación por medio de una “bosonización”. El operador U puede ser evaluado exactamente si los operadores $Q_{\mu i}$ cierran álgebras bosónicas $[Q_{\mu i}, Q_{\nu j}] = 0$, $[Q_{\mu i}, Q_{\nu j}^\dagger] = \mathbf{1}_{\mu\nu}\mathbf{1}_{ij}$. De esta manera, si podemos construir un mapeo aproximado del álgebra de los $Q_{\mu i}$ a un álgebra bosónica, la integral puede ser evaluada hasta segundo orden. Por medio de una bosonización, se pueden estimar tanto observables locales como correlaciones globales cualesquiera de forma eficiente, vía el teorema de Wick. Este esquema

⁴ La aproximación gaussiana consiste en estimar la integral $\int f(x)dx$ por $f(x_0)\det(M)^{-1/2}$, donde x_0 es un extremo de $f(x) < f(x_0)$ y M es (menos) la matriz “hessiana” de $\ln(f(x))$: $\ln(f(x)) = \ln(f(x_0)) - (x - x_0)^\dagger M(x - x_0) + \mathcal{O}((x - x_0)^3)$

tiene la ventaja de darnos un modelo tratable analíticamente del comportamiento del sistema.

El primero de estos caminos corresponde a una aproximación completamente numérica y no será estudiado en este trabajo. Sin embargo, a modo ilustrativo, en el Apéndice B, Sec. B.3 se analizará el caso sencillo de un par de espines $1/2$ a fin de comparar tanto resultados como aplicabilidad del método. En el Cap. siguiente discutiremos el segundo y tercero de estos caminos, que serán aplicados a sistemas de espines en el Cap 5. Finalmente, el tratamiento bosónico será discutido en los capítulos 6 y 7.

Parte II

Métodos funcionales y entrelazamiento de pares

4

LA APROXIMACIÓN CSPA

En el Capítulo anterior presentamos algunas de las técnicas posibles que se pueden desarrollar a partir de la representación de Hubbard-Stratonovich. En este capítulo analizaremos en detalle una de ellas: la Aproximación de camino estático correlacionado (Correlated Static Path Approximation) (CSPA).

Si sólo estamos interesados en evaluar algunas correlaciones de pares y observables locales, una posibilidad es tratar de aproximar la función de partición Z del sistema (Ec. (3.2)) y recuperar los observables de interés vía derivación respecto a ciertos acoplamientos en el Hamiltoniano, usando la Ec. (3.2). Una vez obtenidos los observables, es posible reconstruir el estado del subsistema por medio de técnicas de tomografía de estados [15]. Evaluando la traza de la expresión (3.4) obtenemos

$$Z = \int \mathcal{D}[\phi] Z[\phi(\tau)] e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta \phi(\tau) V^{-1} \phi(\tau) d\tau} \quad \text{con} \quad (4.1)$$

$$Z[\phi] = \prod_i Z_i[\phi^i] \quad (4.2)$$

Por medio del cambio de variables

$$\phi(\tau) = \phi_0 + \sum_{n \neq 0} e^{i\omega_n \tau} \phi_n \quad \omega_n = 2\pi n / \beta$$

que no modifica¹ la medida $\mathcal{D}\phi$, podemos reescribir la Ec. (4.1) como

$$Z = \det(2\pi V / \beta)^{-1/2} \int Z[\phi_0] C[\phi_0] e^{-\frac{1}{2} \beta \phi_0 V^{-1} \phi_0} d\phi_0 \quad (4.3)$$

$$C[\phi_0] = \int \frac{Z[\phi_0 + \sum_{n \neq 0} \phi_n e^{i\omega_n \tau}]}{Z[\phi_0]} e^{-\frac{1}{2} \beta \sum_n \phi_n V^{-1} \phi_n} \mathcal{D}' \phi_n \quad (4.4)$$

donde en la segunda línea, la medida $\mathcal{D}' \phi_n$ viene dada por

$$\prod_{n \neq 0} \det(2\pi V / \beta)^{-1/2} d\phi_n$$

A las frecuencias ω_n se las conoce como “frecuencias de Matsubara”. El integrando en la definición de $C(\phi_0)$ (Ec. (4.4)) puede desarrollarse en serie de potencias alrededor de una dada configuración estática de $\phi = \phi_0$.

Una primera aproximación consiste en este factor con valor 1 para cualquier configuración de los campos estáticos. En este límite obtenemos la llamada Aproximación de

¹ Los campos auxiliares $\phi(\tau)$ están definidos en el intervalo semiabierto $[0, \beta)$, por lo que pueden ser expandidos en cualquier base completa de funciones sobre ese dominio. En particular, podemos escoger una base completa de funciones periódicas en el intervalo cerrado $[0, \beta]$.

caminos estáticos (SPA), que es la función de partición asociada al estado separable de la forma

$$\rho_{sep} = \frac{(\det(2\pi\beta V))^{-1/2}}{Z_{SPA}} \int Z(\phi_0) \rho(\phi_0) d\phi_0 \quad (4.5)$$

$$Z_{SPA} = (\det(2\pi\beta V))^{-1/2} \int Z(\phi_0) d\phi_0 \quad (4.6)$$

donde $\rho(\phi_0) = \exp(-\beta\phi_0^\mu Q_\mu) / \text{tr} [\exp(-\beta\phi_0^\mu Q_\mu)]$ y $Z(\phi_0) = \exp(-\beta F[\phi_0])$, con

$$F[\phi_0] = \phi_0^\mu \langle Q_\mu \rangle_{\rho(\phi_0)} + \frac{1}{2} \phi_0^\mu V_{\mu\nu}^{-1} \phi_0^\nu + \beta^{-1} \text{tr} [\rho(\phi_0) \log \rho(\phi_0)] ,$$

la “energía libre de Hartree” del sistema. Para sistemas formados por muchas componentes y fuera de las zonas críticas del sistema considerado, $F[\phi_0]$ tiene un mínimo muy pronunciado si ϕ_0 es una solución de campo medio (Ver Sec. B.2.1). La evaluación directa de esta integral, cuando es posible, permite introducir correcciones a los observables de campo medio, que pueden ser importantes en sistemas pequeños, o dentro de una zona de transición de fase. Sin embargo, por ser esencialmente una mezcla estadística de estados separables, es incapaz de dar cuenta del entrelazamiento entre sus subsistemas².

4.1 $C[\phi]$ en la aproximación RPA

A partir del desarrollo perturbativo de la exponencial (Ec. (B.8b)) obtenemos, hasta segundo orden en los campos ϕ_n

$$\frac{Z[\phi]}{Z[\phi_0]} = \prod_i \prod_n \exp\left(-\frac{\beta}{2} \phi_n^\dagger R(\phi_0, i\omega_n) \phi_n + \mathcal{O}^2(\phi_n)\right) \quad (4.7)$$

donde $R(\phi_0, \omega)$ es la matriz de curvatura

$$R_{\mu i}^{j\nu}(\phi_0, \omega) = \mathbf{1}_i^j \sum_{|k_i\rangle \neq |k'_i\rangle} \frac{(p_{k_i} - p_{k'_i}) \langle k_i | Q_{\mu i} | k'_i \rangle \langle k'_i | Q_{\nu i} | k_i \rangle}{\lambda_{k_i} - \lambda_{k'_i} + \omega} \quad (4.8)$$

siendo $|k_i\rangle$ es el autovector del Hamiltoniano local $h_i[\phi_0] = \phi_0^{(i)\mu} Q_{(i)\mu}$ (Ec. (3.18)) con autovalor λ_{k_i} , y p_{k_i} es la probabilidad de ocupación de $|k_i\rangle$ en el sistema local, dada por ³

$$p_{k_i} = \langle k_i | \exp(-\beta h_i[\phi_0]) | k_i \rangle / \text{tr} [\exp(-\beta h_i[\phi_0])] .$$

² Eventualmente, bajo una partición del sistema distinta a la que elegimos para construir la aproximación, la expresión (4.6) e incluso campo medio, potencialmente podrían dar cuenta de algún grado de entrelazamiento. Otro caso en que la aproximación podría tener en cuenta el entrelazamiento del estado en alguna medida se da cuando tenemos en cuenta las integrales sobre modos repulsivos: en ese caso, el integrando ya no es necesariamente hermítico, aunque sí lo es la integral. En la aproximación de campo medio, esto se refleja en la aparición de soluciones complejas de las ecuaciones de campo medio, que naturalmente serían degeneradas. Sin embargo, estos efectos tienden a anularse con el tamaño del sistema.

³ En lo que sigue, vamos a asumir que $h_i[\phi_0]$ es siempre un Hamiltoniano hermítico, suponiendo que elegimos adecuadamente los contornos de integración, dentro de la zona “grande” respecto del soporte efectivo de las integrales estáticas. De esta manera, λ_{k_i} son siempre cantidades reales y $1 \geq p_{k_i} \geq 0$ son siempre probabilidades.

En esta aproximación, la integral en la Ec. (4.4) se reduce a una integral Gaussiana. Definimos entonces ⁴

$$C_{RPA}(\phi_0) = \prod_{n \neq 0} \det(\mathbf{1} - VR(\phi_0, i\omega_n))^{-1/2}. \quad (4.9)$$

Si en la Ec. (4.3) hacemos el reemplazo $C[\phi_0] \rightarrow C_{RPA}[\phi_0]$, obtenemos la aproximación conocida como **CSPA**, también conocida como **CSPA+RPA** [24, 25, 53, 54]:

$$Z_{CSPA} = \det(2\pi V/\beta)^{-1/2} \int Z[\phi_0] C_{RPA}[\phi_0] e^{-\frac{1}{2}\beta\phi_0 V^{-1}\phi_0} d\phi_0 \quad (4.10)$$

El rango de validez de esta aproximación está limitado a las situaciones en que $C_{RPA}(\phi_0) > 0$ para cualquier configuración de los campos estáticos. Generalmente, esta condición se satisface por encima de una “temperatura de ruptura” T^* , generalmente baja, tal que la Ec. (4.10) es aplicable a $T > T^*$. Normalmente, T^* es menor que la temperatura crítica de ciertas transiciones de fase, por lo que, en esos casos, esta aproximación nos permite obtener resultados muy precisos en torno a esas transiciones.

Para evaluar $C_{RPA}(\phi)$, observamos que el determinante en la Ec. (4.9) es un cociente de polinomios en $i\omega_n$ de igual grado (a lo sumo, igual a $\sum_i d_i(d_i - 1)$, con d_i la dimensión del espacio del i -ésimo espacio de estados), que puede escribirse en forma factorizada como

$$\det(\mathbf{1} - VR(\phi_0, \omega)) = \prod_{\alpha} \frac{\omega_{\alpha} - \omega}{\lambda_{\alpha} - \omega} \quad (4.11)$$

siendo α un índice que etiqueta pares de autoestados distintos de los diferentes Hamiltonianos locales ($|k_j\rangle, |k'_j\rangle$), λ_{α} la energía de la transición y ω_{α} las correspondientes raíces de la ecuación

$$\det(\mathbf{1} - VR(\phi_0, \omega_{\alpha})) = 0 \quad (4.12)$$

que se conocen como frecuencias **RPA** generalizadas⁵. Las ω_{α} serán entonces funciones implícitas de los campos ϕ_0 . En función de las ω_{α} , podemos reescribir $C_{RPA}(\phi_0)$ como

$$C_{RPA}(\phi_0) = \prod_{\alpha} \prod_{n>0} \frac{\lambda_{\alpha} - i2\pi N/\beta}{\omega_{\alpha} - i2\pi N/\beta} = \prod_{\alpha} \frac{\omega_{\alpha} \sinh(\beta\lambda_{\alpha}/2)}{\lambda_{\alpha} \sinh(\beta\omega_{\alpha}/2)} \quad (4.13)$$

donde usamos la identidad de Euler⁶. Estas expresiones son muy sugerentes: C_{RPA} puede expresarse como

$$C_{RPA} = \frac{Z_L}{Z_C} \prod_{\alpha} \frac{\lambda_{\alpha}}{\omega_{\alpha}}$$

4 El subíndice *RPA* hace referencia a que, como veremos después, esta aproximación está fuertemente relacionada con la Aproximación de fases al azar (Random Phase Approximation) (*RPA*) introducida por Bohm y Pines [27]. Conceptualmente, ambas aproximaciones están basadas en la idea física de “desacoplar” las fluctuaciones cuánticas de pequeña amplitud de las fluctuaciones estadísticas de cantidades “macroscópicas” asociadas al comportamiento térmico del sistema.

5 Estas frecuencias se reducen a las energías de excitación colectivas *RPA* del sistema cuando ϕ_0 es una solución estable a las ecuaciones de campo medio.

6 La identidad de Euler $\prod_{n=1}^{\infty} (1 - (a/(2\pi n))^2) = \frac{\sin(a/2)}{a/2}$ se prueba observando que ambos miembros son funciones enteras en el plano complejo, con los mismos ceros y que valen lo mismo para $a = 0$

donde Z_L y Z_C son las funciones de partición de dos sistemas bosónicos con Hamiltonianos cuadráticos, uno con energías de excitación λ_α y otro con energías de excitación ω_α . Volveremos a este punto más adelante. A temperaturas bajas, cuando ϕ_0 no es una configuración estacionaria para la energía libre, ω_α puede volverse eventualmente una cantidad compleja. Sin embargo, esto no compromete necesariamente la positividad de C_{RPA} . De hecho, C_{RPA} será siempre positiva en general si $\omega_\alpha^2 + 2\pi/\beta^2 > 0$. En el caso en que podamos suponer que todas las frecuencias son reales, es posible construir una representación integral de $C_{RPA}(\phi_0)$ [55], sin resolver explícitamente la Ec. (4.12):

$$\log(C_{RPA}) = \oint_{\mathcal{C}} \ln \sinh(\beta z/2) \frac{\partial}{\partial z} \ln \det(\mathbf{1} - R(\phi_0, z)) dz \quad (4.14)$$

para un contorno cerrado \mathcal{C} que separe en dos regiones distintas a los semiejes positivo real y negativo real. Para aplicaciones prácticas, esto nos puede ahorrar una gran cantidad de cálculo.

Si nos interesa encontrar explícitamente las frecuencias, es posible formular la Ec. (4.12) como un problema de autovalores. Si introducimos la notación

$$Q_{\mu i}^\alpha = \langle k_i | Q_{\mu i} | k'_i \rangle = (Q_\alpha^{\mu i})^* \quad (4.15)$$

$$\Lambda_\alpha^{\alpha'} = \mathbf{1}_\alpha^{\alpha'} (\lambda_{k_i} - \lambda_{k'_i}) \quad (4.16)$$

$$P_\alpha^{\alpha'} = \mathbf{1}_\alpha^{\alpha'} (p_{k_i} - p_{k'_i}) \quad (4.17)$$

$R(\phi_0, \omega)$ se escribe como el producto matricial $R(\phi_0, \omega) = Q(\Lambda - \omega)^{-1} P Q^\dagger$. Vía la identidad de Sylvester⁷, podemos reescribir la Ec. (4.12) como

$$\det \left(\mathcal{M} |\Lambda| - \omega + \mathcal{M} (Q|P|^{1/2})^\dagger V (Q|P|^{1/2}) \right) = 0 \quad (4.18)$$

donde, haciendo uso de que Λ y P son matrices reales codiagonales, y que $\Lambda_\alpha > 0 \Leftrightarrow P_\alpha > 0$, definimos \mathcal{M} de manera que $P = \mathcal{M}|P| = ((\mathcal{M}P)^{1/2})^\dagger \mathcal{M} (\mathcal{M}P)^{1/2}$ y $\Lambda = \mathcal{M}|\Lambda| \mathcal{M}$. La Ec. (4.18) es la ecuación que define los autovalores de la matriz

$$\mathcal{M} \mathcal{H} = \mathcal{M} \left(|\Lambda| + (Q|P|^{1/2})^\dagger V (Q|P|^{1/2}) \right) \quad (4.19)$$

Esta ecuación es completamente análoga a la que define el espectro de un Hamiltoniano bosónico cuadrático (ver Sec. 2.5). Veremos como esto motivará un esquema de bosonización aproximada en el Cap. 6.

4.2 Aproximación Gaussiana sobre las variables estáticas

Hasta ahora, asumimos que valía la pena evaluar las integrales sobre *todas* las configuraciones estáticas *exactamente*. En realidad, muchas de las configuraciones sólo aportan a

⁷ La identidad de Sylvester para determinantes establece que $\det(\mathbf{1} + AB^t) = \det(\mathbf{1} + B^t A)$ para cualquier par de matrices rectangulares de la misma dimensión.

nivel de la aproximación Gaussiana. Si todos los $h_i[\phi_0]$ son hermíticos sobre campos ϕ_0 a valores reales, la integral sobre $\mathcal{D}^-\phi$ puede evaluarse siempre en esta aproximación [56]. Además, si los extremos del integrando son aislados y bien definidos, podemos aproximar directamente todas las integrales por punto silla. El resultado de esta aproximación, que llamaremos Aproximación de campo medio corregida (Corrected Mean Field Approximation) (CMFA) resulta ser

$$Z_{\text{CMFA}} = \sum_i \exp\left(-\frac{\beta}{2}\phi_0^{(i)\dagger} V^{-1}\phi_0^{(i)}\right) Z(\phi_0^{(i)}) C_0(\phi_0^{(i)}) C_{\text{RPA}}(\phi_0^{(i)}), \quad (4.20)$$

donde $\phi_0^{(i)}$ son las (posiblemente múltiples) soluciones de las ecuaciones de campo medio

$$\frac{\delta F[\rho]}{\delta \Phi^\mu(i)} = \sum_\nu \frac{\delta \langle Q_\nu(i) \rangle}{\delta \Phi^\mu(i)} \left(\frac{\delta \langle H \rangle}{\delta \langle Q_\nu(i) \rangle} - \Phi^\nu(i) \right) = 0 \quad (4.21a)$$

que minimizan la energía libre $F[\phi] = -\beta^{-1} \log Z[\phi_0] + \phi^\dagger V^{-1} \phi / 2$. $C_0(\phi)$ es el factor debido a la curvatura en las direcciones estáticas, que viene dado por [5]

$$\begin{aligned} C_0(\phi) &= \det[V \frac{-\partial^2 \log F[\phi]}{\partial \phi^{vj} \partial \phi^{v'j'}}]^{-1/2} \\ &= \det[\mathbf{1} + V\tilde{R}]^{-1/2} \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} \tilde{R}_{\mu i}^{vj} &= R_{\mu i}^{vj}(\phi, 0) + \\ &+ \beta^2 \left(\sum_{k_i} p_{k_i} (\langle k_i | Q_{\mu i} | k_i \rangle \langle k_i | Q_{\nu i} | k_i \rangle) - \right. \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\left. - \sum_{k_i} \sum_{k'_i} p_{k_i} p_{k'_i} (\langle k_i | Q_{\mu i} | k_i \rangle \langle k'_i | Q_{\nu i} | k'_i \rangle) \right). \quad (4.24)$$

Las cantidades que intervienen en \tilde{R} tienen una interpretación simple: si ignoramos el término proporcional a β^2 , el determinante del término de la primera línea se reduce simplemente a $\prod_\alpha \frac{\omega_\alpha}{\lambda_\alpha}$, que está relacionado con las fluctuaciones cuánticas presentes en los modos estáticos. El término proporcional a β^2 está relacionado con la fluctuación de cantidades “clásicas”, en el sentido de aquellas que conmutan con el Hamiltoniano. A temperatura cero, los términos entre paréntesis se anulan exponencialmente con β (como lo hace la dispersión de un observable clásico), permaneciendo $R(\phi_0, 0)$ como única contribución. Cuando despreciamos estos términos, CMFA se reduce a la aproximación de campo medio con correcciones RPA (Campo Medio (Mean Field) (MF)+RPA) o, por brevedad, RPA.

Además de proveernos de expresiones que no involucran integrales, lo que simplifica la formulación de resultados analíticos, CMFA, a diferencia de CSPA es estable incluso a temperatura cero, lo que permite obtener resultados en ese régimen. En ese límite, la Ec. (4.22) se reduce a $\prod_\alpha \omega_\alpha / \lambda_\alpha$.

En la vecindad de una transición de fase, o cuando el estado de campo medio presenta una simetría continua rota, $C_0(\phi)$ se anula. En el caso de una transición de fase, lo que

ocurre es que $F[\phi_0 + \delta\phi] = F[\phi_0] + \mathcal{O}(\delta^3\phi)$ para ciertas variaciones de ϕ . Por medio de un cambio de variables (con jacobiano trivial) es posible separar las variaciones de los campos en esas direcciones problemáticas del resto. Luego, podemos construir C_0 sobre las segundas, e integrar exactamente sobre las primeras. De esta manera podemos tener en cuenta las fluctuaciones “estáticas” de gran amplitud, propias de una transición de fase. En el caso de la ruptura de una simetría continua, $F[\phi_0]$ es constante sobre una “superficie” definida implícitamente por la condición $\frac{\partial F[\phi]}{\partial \phi} = 0$. Por medio de un cambio de variables global, es posible desacoplar los modos cero de $\partial^2 F / \partial \phi^2$ de las “variables intrínsecas”. Podemos ahora integrar sobre las nuevas variables intrínsecas en aproximación de punto silla, teniendo en cuenta ahora la presencia de un jacobiano asociado a la transformación. Por la simetría subyacente, el resultado de estas integrales es constante, por lo que la integración exacta sobre los modos cero sólo contribuye con un factor constante. La presencia del jacobiano introduce además pequeñas correcciones a la aproximación de campo medio. Veremos más adelante que estas correcciones son relevantes sólo en sistemas pequeños. Tanto en el caso de simetrías continuas rotas como el una transición de fase, una o varias ω_α se anulan en la solución de campo medio. En el caso de simetrías continuas rotas, estas frecuencias representan los llamados “modos cero” o “modos de Goldstone” [25, 54]; dado que $C_{RPA}(\phi_0)$ se mantiene finito (y no trivial) aún en presencia de frecuencias ω_α nulas, la Ec. (4.20) sigue siendo aplicable asumiendo que se hayan desacoplado convenientemente esos modos de Goldstone.

4.3 Sistemas con invarianza translacional

Consideremos ahora el caso de un sistema cuyos componentes son idénticos, esto es, tanto los espacios de Hilbert ($d_i = d$) como los operadores ($Q_{\mu i} = Q_\mu$) en cada sitio admiten una misma representación, y cuyo Hamiltoniano sea de la forma [5]

$$H = \sum b^\mu Q_{\mu i} - \frac{1}{2} \sum Q_{\mu i} V^{\mu i \nu j} Q_{\nu j} \quad (4.25)$$

con una interacción invariante translacional

$$V^{\mu i \nu j} = v^{\mu \nu} (i - j), \quad (4.26)$$

donde $v^{\mu \nu} (N - j) = v^{\mu \nu} (-j)$ para una cadena finita. En esta situación puede ser conveniente reescribir la Ec. (4.25) como [5]

$$H = N [b^\mu \tilde{Q}_{\mu 0} - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{v}^{\mu \nu} (k) \tilde{Q}_{\mu k} \tilde{Q}_{\nu, -k}], \quad (4.27)$$

donde $\tilde{v}(k)$ son las componentes de la representación de Fourier (discreta) de $v(j)$,

$$\tilde{v}^{\mu \nu} (k) = \sum_{j=0}^{n-1} e^{-i2\pi k j / N} v^{\mu \nu} (j), \quad (4.28)$$

y similarmente, $\tilde{Q}_{\mu k} = n^{-1} \sum_{j=1}^N e^{i2\pi k j/N} Q_{\mu j}$ (tal que $Q_{\mu j} = \sum_k e^{-i2\pi k j/N} \tilde{Q}_{\mu k}$). Así, $V^{\mu k \nu k'} = N \mathbf{1}_{k,-k'} \tilde{v}^{\mu \nu}(k)$ en la representación de Fourier. Vamos a asumir que la solución del correspondiente problema de campo medio resulta en un *campo medio uniforme* $\phi^{\mu i} = \phi^{\mu}$, tal que $\langle Q_{\mu i} \rangle_{\phi} = \langle Q_{\mu} \rangle_{\phi}$ (Ec. (4.21)), que se reduce a

$$\phi^{\mu} = \tilde{v}^{\mu \nu}(0) \langle Q_{\nu} \rangle_{\phi}, \quad (4.29)$$

una ecuación de campo medio *local* efectiva, y que depende sólo del acoplamiento total $\tilde{v}^{\mu \nu}(0) = \sum_j v^{\mu \nu}(j)$. Nótese que en el espacio de Fourier las Ecs. (4.21) se vuelven $\phi^{\mu k} = N \tilde{v}^{\mu \nu}(k) \langle \tilde{Q}_{\nu,-k} \rangle_{\phi}$, correspondiendo la solución uniforme $\tilde{\phi}^{\mu k} = N \phi^{\mu} \mathbf{1}^{k0}$ de manera que $\langle H \rangle_{\rho[\phi]} = N [b^{\mu} \langle Q_{\mu} \rangle_{\phi} - \frac{1}{2} \tilde{v}^{\mu \nu}(0) \langle Q_{\mu} \rangle_{\phi} \langle Q_{\nu} \rangle_{\phi}]$. De esta manera, la matriz de curvatura RPA (Ec. (4.8)) pasa a estar compuesta de bloques diagonales idénticos entre sí, $R_{\mu i}^{\nu j} = R_{\mu}^{\nu} \mathbf{1}_i^j$, implicando que en los nuevos operadores $\tilde{R}_{\mu k}^{\nu k'} = N^{-1} R_{\mu}^{\nu} \mathbf{1}_i^j$ y entonces, $(VR)_{\mu k}^{\nu k'} = \mathbf{1}_k^{-k'} \tilde{v}^{\mu \rho}(k) R_{\nu}^{\rho}$, diagonal en k . Así, la Ec. (4.22) se factoriza como

$$C(\phi) = \prod_k \left[\det[\mathbf{1}_v^{\mu} + \tilde{v}^{\mu \rho}(k) r_{\rho \nu}^0]^{-\frac{1}{2}} \prod_{\alpha > 0} \frac{\omega_{\alpha}(k) \sinh \frac{\beta \lambda_{\alpha}}{2}}{\lambda_{\alpha} \sinh \frac{\beta \omega_{\alpha}(k)}{2}} \right], \quad (4.30)$$

con $\omega_{\alpha}(k)$ las raíces de la ecuación RPA local

$$\det[\mathbf{1}_v^{\mu} + \tilde{v}^{\mu \rho}(k) R_{\mu}^{\nu}(\omega)] = 0$$

o equivalentemente, los autovalores de la matriz RPA local efectiva

$$A_{\alpha \alpha'}(k) = \lambda_{\alpha} \mathbf{1}_{\alpha \alpha'} + f_{\alpha} Q_{\mu,-\alpha} \tilde{v}^{\mu \nu}(k) Q_{\nu \alpha'},$$

de dimensión $d(d-1)$. $C(\phi)$ se reduce entonces al producto de n factores de corrección de sitio individual con acoplamientos $\tilde{v}^{\mu \nu}(k)$.

Este resultado se mantiene para sistemas cíclicos D -dimensionales (por ejemplo, espines sobre un toro), donde dado $V^{\mu i \nu j} = v^{\mu \nu}(i-j)$, debemos reemplazar las matrices $\tilde{v}(k)$ (Ec. (4.28)) por $\tilde{v}(\mathbf{k}) = \sum_j e^{-i2\pi \sum_{l=1}^D k_l j_l / N_l} v(j)$. Las correlaciones pueden obtenerse mediante la Ec. (3.2), que dependerá sólo de la separación $i-j$:

$$\langle Q_{\mu i} Q_{\nu, i+j} \rangle = \langle Q_{\mu} \rangle_{\phi} \langle Q_{\nu} \rangle_{\phi} + \frac{2}{N\beta} \sum_k e^{i2\pi k j / N} \frac{\partial \ln C(\phi)}{\partial \tilde{v}^{\mu \nu}(k)}. \quad (4.31)$$

De esta manera, el problema de evaluar los valores medios de un sistema con invarianza translacional se redujo a resolver una serie de problemas RPA locales. En el capítulo siguiente veremos algunas aplicaciones a sistemas de espines.

5 | ESTIMACIÓN DEL ENTRELAZAMIENTO DE PARES EN REDES DE ESPINES

Hasta aquí los desarrollos se plantearon en forma completamente general. Vamos ahora a aplicar lo discutido anteriormente a la evaluación del entrelazamiento en estados de equilibrio térmico en “redes de espín”. En este trabajo una red de espín consiste en un sistema de espines (representaciones de $SU(2)$), cada uno con espín total s_i , acoplados entre ellos por interacciones de dos cuerpos, en un campo externo. Las redes de espines constituyen una atractiva representación escalable de qubits para explorar e implementar esquemas de procesamiento cuántico de información [57–59] y pueden ser realizadas en diversos sistemas físicos. El Hamiltoniano de un sistema de esta clase será de la forma

$$H = b^{\mu i} S_{\mu i} + \frac{1}{2\hbar s} S_{\mu i} V^{\mu i \nu j} S_{\nu j} \quad (5.1)$$

donde $S_{\mu i}$ son los operadores asociados a las componentes x, y, z del i -ésimo espín, $s = \frac{1}{N} \sum_i s_i$ es el “espín medio”, $b^{\mu i}$ es un campo magnético externo y $V^{\mu i \nu j}$ es, sin pérdida de generalidad, una matriz simétrica de cantidades expresadas en las unidades del campo magnético¹.

Los formalismos [CSPA](#) y [CMFA](#) discutidos en la sección anterior pueden aplicarse fácilmente a esta clase de sistemas, involucrando diagonalizaciones de matrices cuyo tamaño escala linealmente con el número de sitios en la red. Sin embargo, a fin de simplificar la discusión, nos restringiremos a sistemas que además dos propiedades extra:

- Invarianza translacional: $s_i = s$ y $V^{\mu i \nu j} = v^{\mu \nu}(i - j) = v^{\mu \nu}(N - (i - j))$, $b^{\mu i} = b^{\mu} = cte$ respecto de un conjunto adecuado de ejes. Veremos más adelante como esta simetría permite reducir enormemente la complejidad de las aproximaciones discutidas, llevandonos en muchos casos a un tratamiento completamente analítico.
- El campo externo es “transverso” a los acoplamientos. Esto significa que b^{μ} es un autovector de $v^{\mu \nu}(i)$ para todo i . De esta forma, mediante una rotación adecuada es posible expresar estas cantidades como $b^{\mu} = b \mathbf{1}^{3\mu}$ y $v^{\mu \nu}(i) = v^{\mu}(i) \mathbf{1}^{\mu \nu}$.

El Hamiltoniano de esta clase de redes será de la forma

$$H = b \sum_i S_{zi} + \frac{1}{2\hbar s} \sum_{i,j} S_{\mu i} v^{\mu}(i - j) S_{\mu j} \quad (5.2)$$

Esta amplia clase de sistemas comprende modelos bien conocidos como el modelo de Ising 1 – D y modelos XY con interacciones de primeros vecinos [60, 61], así como el modelo

¹ Se introdujo el factor $\frac{1}{s}$ de manera que la interacción no se anule en el “límite clásico” independientemente de la representación de espín considerada.

de Lipkin [8, 48, 62, 63], donde *todos* los pares se encuentran idénticamente acoplados. Por simplicidad, vamos a considerar sólo el caso en que los espines locales son todos de magnitud $s = s_i = 1/2$, de manera que $S_{\mu i} = \hbar\sigma_{\mu}/2$, siendo σ_{μ} las matrices de Pauli definidas en (B.25). Esto nos permitirá evaluar el entrelazamiento de formación entre pares a temperatura finita en forma exacta. Además, en este caso la matriz densidad reducida de pares es función de las correlaciones de pares y de los valores medios locales. Más adelante veremos cómo es posible extender estos resultados al caso de representaciones arbitrarias del espín local.

La transversalidad del campo implica en general una simetría discreta en este tipo de hamiltonianos: La simetría de “Paridad-Z”. Esta simetría expresa el hecho de que el sistema es invariante ante el cambio simultáneo en los signos de S_x y S_y en todos los sitios. Esta simetría es generada por $P_z = \prod_j e^{i\pi(S_{zj}/\hbar+1/2)}$, implicando $\langle S_{\mu i} \rangle = 0$, $\langle S_{\mu i} S_{zj} \rangle = 0$ para $\mu = x, y$ y $j \neq i$ a cualquier temperatura $T > 0$ y para cualquier autoestado no degenerado de H . Un rasgo importante de esta clase de simetría es que se preserva en general para cualquier subsistema de la red.

Nos interesa estudiar además sistemas con un número moderado o grande de componentes, de manera que el tratamiento completo CSPA se vuelve innecesariamente costoso ya que, salvo en las zonas de transición de fase, la integral exacta sobre los coeficientes estáticos difiere muy poco de su aproximación gaussiana. La formulación CMFA permitirá, a la vez de mantener los costos computacionales al mínimo, obtener una serie de expresiones cerradas para el comportamiento del entrelazamiento en estos sistemas. Al final del capítulo, analizaremos con detalle el caso del modelo de Lipkin, donde mediante una aproximación adecuada es posible además, reducir el número de campos relevantes a integrar en CSPA a una cantidad fácilmente manejable, lo que nos permitirá comparar los resultados con la aproximación CMFA.

5.1 Tratamiento RPA para sistemas de espines con invarianza translacional

Cuando el Hamiltoniano (5.2) admite una solución de campo medio uniforme, las Ecs. (4.29) que lo determinan se reducen a

$$\phi^{\mu} = \tilde{v}_0^{\mu} \frac{\phi^{\mu} - b^{\mu}}{\lambda} \tanh \frac{1}{2} \beta \hbar \lambda, \quad (5.3)$$

donde $\tilde{v}_k^{\mu} = \sum_j v^{\mu}(j) e^{-i2\pi k j/n}$, $\lambda = \sqrt{\sum_{\mu} (\phi^{\mu} - b^{\mu})^2}$ y $b^{\mu} = (0, 0, b)$. Vamos a enfocarnos en el caso anisótropo atractivo $\tilde{v}_0^x > |\tilde{v}_0^y|$, $\tilde{v}_0^z \geq 0$, donde la solución de mínima energía corresponde a $\phi^y = 0$ y

1. $\phi^x = 0$ (solución normal), válida para $|b| > b_c = \tilde{v}_0^x - \tilde{v}_0^z$ o $T > T_c = \hbar|b| / \ln \frac{b_c + |b|}{b_c - |b|}$ si $|b| < b_c$, donde $\phi^z = -\tilde{v}_0^z \tanh \frac{1}{2} \beta \hbar \lambda$, o, en otro caso
2. $\phi^x = \pm |\phi^x| \neq 0$ (solución degenerada de simetría rota), donde $\lambda = \tilde{v}_0^x \tanh \frac{1}{2} \beta \hbar \lambda$, $\phi^z = -\tilde{v}_0^z b / b_c$.

El tratamiento **CMFA** involucra aquí sólo diagonalizaciones de 2×2 con una *única* energía **RPA** para cada valor de k , de manera que el tratamiento se vuelve *completamente analítico*:

$$Z_{\text{CMF}} = e^{-N\beta\hbar^{-1}\sum_{\mu}\tilde{v}_0^{\mu}\langle S_{\mu}\rangle_{\phi}^2}(2\cosh\frac{1}{2}\beta\hbar\lambda)^N\prod_k c_k^0\frac{\sinh\frac{\beta\hbar\lambda}{2}}{\sinh\frac{\beta\hbar\omega_k}{2}}, \quad (5.4)$$

donde, definiendo $\gamma_{\mu} = \frac{\phi^{\mu}-b^{\mu}}{\lambda}$ y $f = \tanh\frac{1}{2}\beta\hbar\lambda$,

$$\omega_k = \lambda\sqrt{(1-f\tilde{v}_k^y/\lambda)[1-f(\gamma_z^2\tilde{v}_k^x+\gamma_x^2\tilde{v}_k^z)/\lambda]}, \quad (5.5)$$

$$c_k^0 = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{1}{2}\beta(1-f^2)\frac{\lambda(\gamma_z^2\tilde{v}_k^z+\gamma_x^2\tilde{v}_k^x)-f\tilde{v}_k^x\tilde{v}_k^z}{\lambda-f(\gamma_z^2\tilde{v}_k^x+\gamma_x^2\tilde{v}_k^z)}}}. \quad (5.6)$$

La correlación de espín $\alpha_{\mu j} \equiv \langle S_{\mu i}S_{\mu, i+j}\rangle\hbar^{-2}$ puede evaluarse como

$$\alpha_{\mu j} = \frac{1}{N\hbar\beta}\frac{\partial\ln Z_{\text{CMF}}}{\partial v^{\mu}(j)} = \langle S_{\mu}\rangle_{\phi}^2\hbar^{-2} + \alpha_{\mu j}^c, \quad (5.7)$$

donde $\langle S_{\mu}\rangle_{\phi} = \frac{\hbar}{2}\gamma_{\mu}f$ y $\alpha_{\mu j}^c = \frac{1}{N\beta\hbar}\sum_k e^{i2\pi kj/N}\frac{\partial\ln C(\phi)}{\partial\tilde{v}_k^{\mu}}$. La matriz densidad reducida de dos sitios en la base estándar puede recuperarse entonces como

$$\rho_{i, i+j} = \begin{pmatrix} p_j^+ & 0 & 0 & \alpha_{xj} - \alpha_{yj} \\ 0 & \frac{1}{4} - \alpha_{zj} & \alpha_{xj} + \alpha_{yj} & 0 \\ 0 & \alpha_{xj} + \alpha_{yj} & \frac{1}{4} - \alpha_{zj} & 0 \\ \alpha_{xj} - \alpha_{yj} & 0 & 0 & p_j^- \end{pmatrix},$$

donde $p_j^{\pm} = \frac{1}{4} + \alpha_{zj} \pm \langle S_z\rangle/\hbar$ y $\langle S_z\rangle = -\beta^{-1}\partial\ln Z/\partial b$. Este estado es precisamente de la forma (2.34), por lo que el entrelazamiento de pares puede ser evaluado en forma cerrada en términos de concurrencias C^{\pm} , que a su vez son funciones de los coeficientes de $\rho_{i, i+j}$. Nótese que $C_j^{\pm} \leq 0$ (Ecs. (2.36)–(2.37)) a nivel campo medio ($\alpha_{\mu j} = \langle S_{\mu}\rangle_{\phi}^2/\hbar^2$).

Concurrencia para campos intensos

Examinemos primero la concurrencia para campos intensos $b \gg b_c$, donde la solución de campo medio es siempre normal (y uniforme) y el estado fundamental es el estado completamente alineado, más pequeñas correcciones. La Ec. (5.5) se vuelve

$$\omega_k = \lambda\left[1 - f\frac{\tilde{v}_k^+}{\lambda} - \frac{1}{2}f^2\frac{(\tilde{v}_k^-)^2}{\lambda^2} - \frac{1}{2}f^3\frac{(\tilde{v}_k^-)^2\tilde{v}_k^+}{\lambda^3} + \mathcal{O}((f\frac{v}{\lambda})^4)\right] \quad (5.8)$$

donde $\lambda = b + fv_z$, $\tilde{v}_k^{\pm} = \frac{1}{2}(\tilde{v}_k^x \pm \tilde{v}_k^y)$, y hemos asumido que $v^{\mu}(j) = \mathcal{O}(v)$. En este régimen la concurrencia exacta del estado fundamental puede ser sólo paralela. Hasta orden $\mathcal{O}((v/\lambda)^2)$, las Ecs. (5.7)–(5.8) a temperatura $T = 0$ llevan entonces a

$$C_j^+ \approx \left| \frac{v_-(j)}{\lambda} + \frac{\sum_{i=1}^{n-1} v_+(j-i)v_-(i)}{\lambda^2} \right| - \frac{\sum_{i=1}^{n-1} v_-^2(i)}{2\lambda^2}, \quad (5.9)$$

donde $v_{\pm}(j) = (v^x(j) \pm v^y(j))/2$. Así, los pares conectados por $v_-(j)$ exhibirán en este límite una *conurrencia paralela de primer orden* en v/λ , mientras que aquellos no conectados pueden aún exhibir *conurrencia paralela de segundo orden* en v/λ si están conectados por la *convolución* de v_+ con v_- . Esto implica que para una interacción anisotrópica de alcance L ($v_{\pm}(j) = 0$ para $j > L$ y $v_-(L) \neq 0$) el alcance de entrelazamiento a $T = 0$ para $|b| \gg b_c$ puede ser a lo sumo dos veces el alcance de interacción. Una comparación con la teoría de perturbaciones exacta indica que para campos intensos, la Ec. (5.9) es en realidad *exacta* para cualquier N hasta el *primer orden no nulo*. Por ejemplo, en el caso de primeros vecinos XY $v^{\mu}(j) = v^{\mu}(\delta_{j1} + \delta_{j,n-1})/2$, con $v^z = 0$, la Ec. (5.9) lleva a $C_j^+ = 0$ si $j \geq 2$ y

$$C_1^+ \approx \frac{|v_-|}{2b}, \quad C_2^+ \approx \frac{|v_-|(|v_+| - |v_-|)}{4b^2}, \quad (5.10)$$

con $v_{\pm} = (v^x \pm v^y)/2$, lo cual coincide, hasta orden $\mathcal{O}(v/b)$ y $\mathcal{O}(v/b)^2$ respectivamente, con el resultado exacto de la *conurrencia* obtenido a través de la transformación de Jordan-Wigner (ver Apéndice A). Así, en este límite habrá *conurrencia* $\mathcal{O}(v/b)^2$ entre segundos vecinos si $|v_+| > |v_-|$.

Para $T > 0$, las principales correcciones térmicas a (5.9) vendrán de la reducción en la contribución de campo medio de $\langle S_{\mu} \rangle_{\phi}^2$ a $\alpha_{\mu j}$, llevando a

$$C_j^+(T) \approx C_j^+(0) - 2e^{-\beta\hbar\lambda}, \quad (5.11)$$

para temperaturas suficientemente bajas tales que $C_j^+(T) \geq 0$, donde $\lambda = b + v_z$ y $C_j^+(0)$ es el valor a $T = 0$ (5.9). Hemos despreciado en (5.11) las correcciones térmicas a $\alpha_{\mu j}^c$, las que llevarán a términos de orden más alto en v/λ . De (5.11) podemos estimar la temperatura límite para *conurrencia* de pares a campos intensos,

$$T_j^+ \approx \hbar\lambda / \ln[2/C_j^+(0)], \quad (5.12)$$

la cual *crecerá* a lo sumo linealmente al aumentar b ($T_j^+ \approx \mathcal{O}(\frac{\hbar b}{\ln(b/v)})$).

Campo factorizante

Asumamos ahora un alcance de interacción común tal que $v^{\mu}(j) = r(j)v^{\mu}$, con $\sum_j r(j) = 1$ ($\tilde{v}_0^{\mu} = v^{\mu}$). Las cadenas anisotrópicas con $v^z < v^y < v^x$ y $r(j) \geq 0$ exhibirán un *campo factorizante* [4, 7, 28, 29]

$$b_s = \sqrt{(v^x - v^z)(v^y - v^z)} < b_c \quad (5.13)$$

donde el estado de campo medio degenerado con simetría rota se vuelve un estado fundamental *exacto* y C_j se anula para valores grandes de N [7], cambiando de antiparalelo ($|b| < b_s$) a paralelo ($|b| > b_s$). Se verifica que a $T = 0$ y $b = b_s$, $\alpha_{\mu j}^c = 0$ para $j \neq 0$ en (5.7),

implicando $C_j^\pm = 0 \forall j > 0$ también en CMFA. La expansión de ω_k alrededor de b_s llevan a $T = 0$ en realidad a

$$\omega_k = v^x \left[1 - r_k \frac{v^y}{v^x} + r_k \frac{b_s}{b_c} \frac{b - b_s}{v^x} + \mathcal{O} \left(\left(\frac{b - b_s}{v^x} \right)^2 \right) \right],$$

donde $r_k = \sum_j e^{-i2\pi jk} r(j)$, implicando, hasta términos $\mathcal{O}(\frac{b-b_s}{v^x})$,

$$C_j^\pm \approx \pm \gamma_j \frac{b_s}{b_c} \frac{b - b_s}{v^x}, \quad (5.14)$$

$$\gamma_j = \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{i2\pi kj} r_k}{1 - r_k v^y / v^x} = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{v^y}{v^x} \right)^m r^{m+1}(j), \quad (5.15)$$

donde $r^m(j) \equiv \sum_i r(j-i) r^{m-1}(i)$ ($m \geq 2$) denota la m -ésima convolución de $r(j)$. Para cualquier acoplamiento de alcance finito satisfaciendo $r(j) > 0$ para $1 \leq j \leq L$ y 0 si no, la Ec. (5.15) produce $\gamma_j > 0$ para $j = 1, \dots, n$. Por lo tanto, CMFA predecirá en este caso *entrelazamiento de alcance completo en la vecindad inmediata a b_s* , con C_j cambiando de antiparalela a paralela cuando b cruza b_s , lo cual está de acuerdo con el resultado general exacto [7]. La pendiente de $C_j^\pm(b)$ a $b = b_s$ no es, sin embargo, exacta necesariamente en CMFA. En el capítulo 8 se analizará con detalle el comportamiento exacto del entrelazamiento en torno al campo factorizante, de forma que podremos confirmar estas predicciones.

Comparación con resultados exactos en cadenas finitas

En las Figs. 1-2 se muestran algunos resultados ilustrativos para acoplamientos anisotrópicos XY ($v^z(j) = 0$) con diferentes alcances en función del campo transversal. Consideramos primero en la Fig. 1 un acoplamiento de largo alcance de la forma $v^\mu(j) \propto v^\mu / |j|^\alpha$ para $1 \leq |j| \leq N/2$, con $\tilde{v}_0^\mu = v^\mu \geq 0$, donde los resultados para el estado fundamental exacto para $N = 18$ espines fueron obtenidos por diagonalización directa. Hemos seleccionado una anisotropía $\chi \equiv v^y / v^x = 1/2$, caso en el cual el campo factorizante es $b_s = \sqrt{\chi} b_c \approx 0,71 b_c$, siendo $b_c = v^x$. Como es predicho por la CMFA, en $b = b_s$ se ve que la concurrencia exacta desaparece para todo α , alcanzando siempre un *alcance completo* en su vecindad (para N finito el resultado exacto es en realidad exponencialmente pequeño en el límite $T = 0$, con límites laterales finitos independientes de α y j dados por [7] $C^\pm = (1 - \chi) \frac{\chi^{(N/2-1)}}{1 \pm \chi^{N/2}}$ en $b = b_s$, con $C^\pm \approx 0,002$ para $N = 18$ y $\chi = 1/2$, no predicho por CMF). El caso $\alpha = 0$ corresponde al modelo de Lipkin [63], donde $v^\mu(j) = v^\mu / (n-1)$ y $\tilde{v}_k^\mu = v^\mu (n \delta_{k0} - 1) / (n-1)$. En este caso $C_j^\pm = C^\pm \forall j$, con $C^\pm < 2/n$ [64] debido a la propiedad de monogamia [65]. El resultado CMFA es aquí es muy preciso para todos los valores de campo lejos de b_c , dando el resultado exacto para la concurrencia reescalada $c = NC$ para grandes valores de N [8].

Al aumentar α , CMFA se mantiene preciso para campos intensos $b \gtrsim 1,5 b_c$, donde la concurrencia es descrita correctamente por la Ec. (5.9), esto es, $C_j \propto (v_- / b) / |j|^\alpha$. Para α suficientemente grande, la Ec. (5.9) predice en realidad una débil *reentrada* de la concurrencia C_j para campos intensos y separaciones j grandes, ya que el último término de segundo

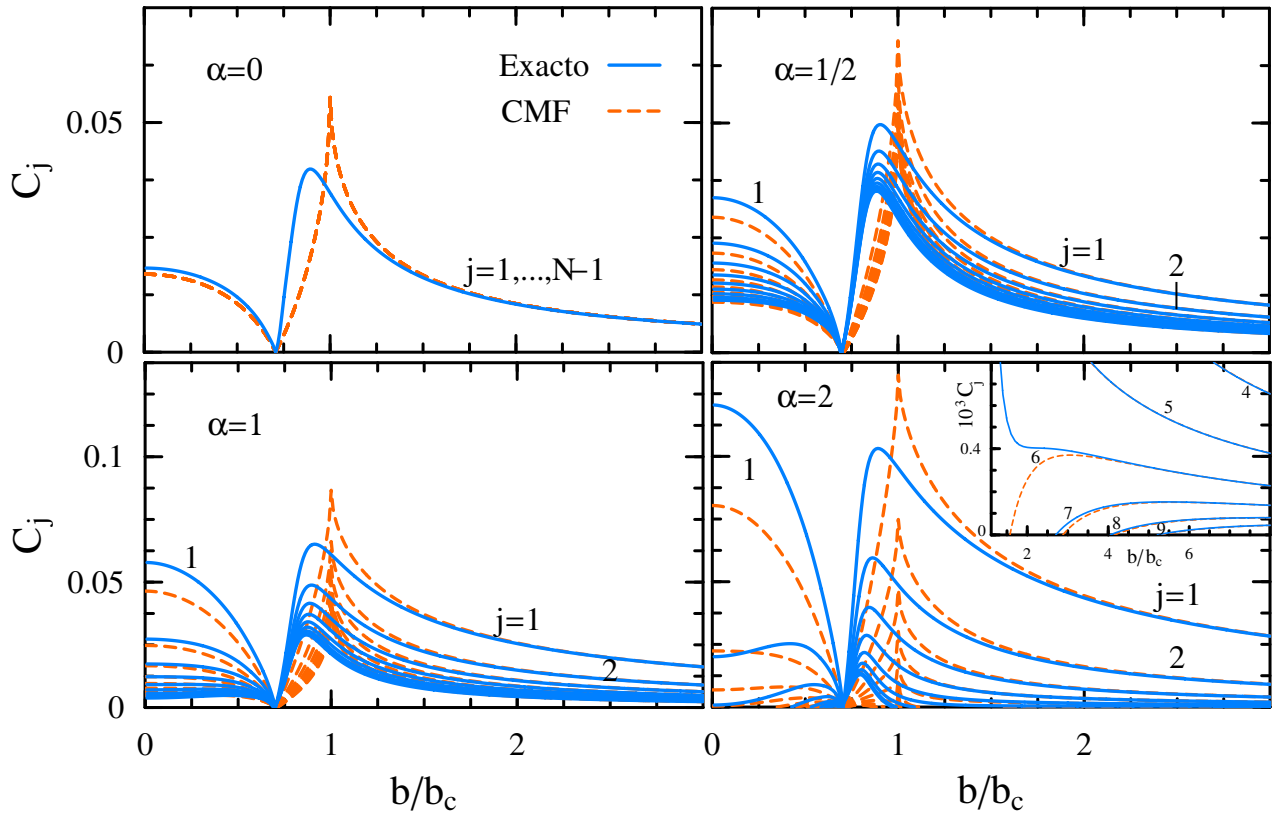


Figura 1: Comparación entre los resultados exactos (líneas azules) y aquellos obtenidos por CMFA (líneas naranjas) para la concurrencia C_j entre pares de espines con separación j , en función del campo magnético transversal b , para acoplamientos de largo alcance XY $v^{\mu}(i-j) \propto v^{\mu}/|i-j|^{\alpha}$, con $\chi = v_y/v_x = \frac{1}{2}$ y $N = 18$ espines. Las concurrencias se anulan en el campo factorizante $b_s = \sqrt{\chi}b_c$, donde $b_c = v_x$ denota el campo crítico de campo medio. El recuadro representa la reentrada para campos intensos de la concurrencia de pares distantes en el caso $\alpha = 2$.

orden en (5.9) será negativo y mayor que el término de primer orden para campos no tan intensos si j es suficientemente grande. Esta reentrada es confirmada para separaciones grandes, como se ve aquí para $\alpha = 2$ (recuadro del panel inferior derecho de la Fig. 1). CMFA pierde precisión para campos bajos $|b| \lesssim b_c$, aunque el resultado para $\alpha \leq 1$ sigue siendo cualitativamente correcto para $|b| < b_s$, donde su precisión aumenta con la separación j . Nótese también que para $\alpha \leq 1$ obtenemos para $N = 18$ concurrencia de alcance completo para *todo* valor del campo, mientras que para $\alpha = 2$, la concurrencia se vuelve de muy corto alcance ($j \leq 3$) para campos bajos, siendo no nula para j grande sólo en la vecindad de b_s o a campos muy intensos, esto es, donde la concurrencia entre primeros vecinos se vuelve pequeña, de acuerdo con la propiedad de monogamia. Este comportamiento es cualitativamente reproducido por CMFA. Finalmente mencionemos que para $\alpha = 2$, los resultados para los primeros pocos C_j se mantendrán estables al aumentar N (ya que la serie $\sum_j 1/j^{\alpha}$

es en este caso convergente), manteniéndose aquellos de **CMFA** cercanos a los mostrados para $N = 18$.

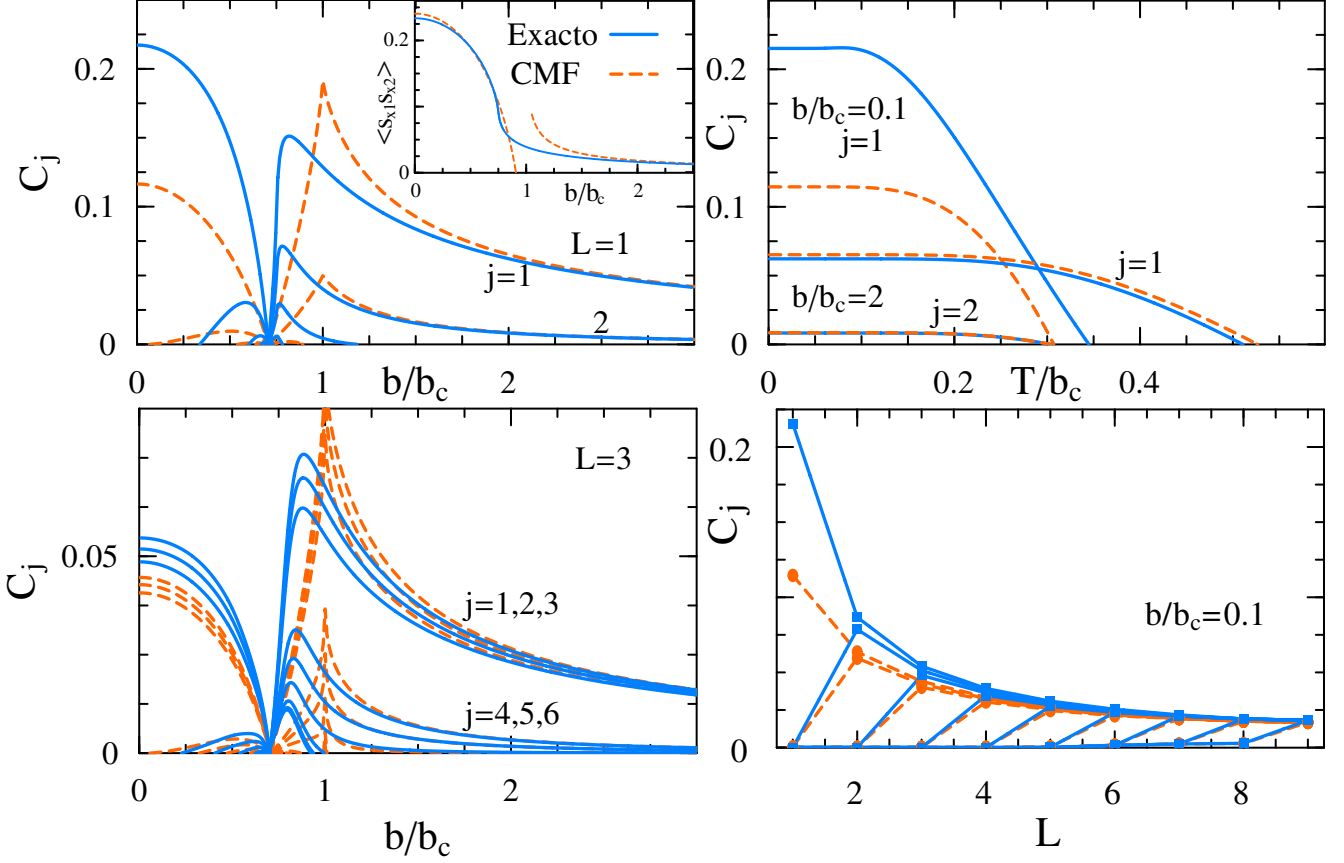


Figura 2: Resultados para acoplamiento XY de alcance finito para la misma anisotropía $\chi = 1/2$. Los paneles superiores representan las concurrencias para el caso de acoplamiento de primeros vecinos ($L = 1$) y $N = 100$ espines, en función del campo magnético transversal a $T = 0$ (izquierda) y como función de la temperatura a diferentes campos fijos (derecha). El recuadro representa la correlación de espín $\langle S_{x1}S_{x2} \rangle$ (en unidades \hbar^2) a $T = 0$. Abajo: Resultados para alcance de interacción L y acoplamiento constante ($v^\mu(i-j) \propto v^\mu$ si $|i-j| \leq L$ y 0 si no) para $N = 18$ espines a $T = 0$. El panel de la izquierda corresponde a $L = 3$ (acoplamiento hasta terceros vecinos) mientras que el panel de la derecha representa la concurrencia C_j en función del alcance de la interacción L a campos débiles fijos.

La Fig. 2 representa algunos resultados para acoplamiento de alcance finito, es decir, $v^\mu(j) = \frac{1}{2}v^\mu/L$ para $|j| \leq L$ y anulándose en caso contrario (tales que $\tilde{v}_0^\mu = v^\mu$), con la misma anisotropía. Para acoplamiento de primeros vecinos, que corresponde al límite $\alpha \rightarrow \infty$ del caso anterior, los resultados exactos para N y T finitos pueden ser obtenidos con la transformación de Jordan-Wigner [60] más la proyección de paridad [7]. Se confirma nuevamente que **CMFA** es preciso para campos grandes tanto para $j = 1$ como para $j = 2$ (Ec. (5.10)), mientras que para $|b| < b_c$ presenta sólo un acuerdo cualitativo (aunque con predicciones correctas como el alcance completo de entrelazamiento en la vecindad de b_s),

siendo aún confiable para observables estándar como las correlaciones de espín α_{x1} lejos de b_c (recuadro en el panel superior izquierdo). El comportamiento térmico de C_j es también correctamente descrito por CMFA lejos de b_c , como se ve en el panel superior derecho, donde los resultados exactos confirman el incremento en las temperaturas límites T_1 y T_2 para campos grandes, como es predicho por la Ec. (5.12).

Sin embargo, la exactitud de CMFA a campos bajos mejora tan pronto como el alcance L de la interacción aumenta, esto es, como el cociente $v^\mu(j)/v^\mu$ disminuye. Por ejemplo, los resultados para $b/b_c = 0,1$ mejoran significativamente ya para $L \geq 2$, como se ve en el panel inferior derecho, mientras que para $L = 3$, CMFA parece proporcionar una imagen general correcta excepto en la vecindad de b_c (panel inferior izquierdo). En particular, se ve que el alcance de la concurrencia para campos grandes es nuevamente el doble del alcance de la interacción, en acuerdo con la Ec. (5.9) (en realidad, para $j = 6$ tanto el primer como el segundo orden en la Ec. (5.9) se anulan para $\chi = 1/2$ y $L = 3$, y la expansión hasta orden $\mathcal{O}(v^x/b)^3$ es requerida, $C_6(b)$ siendo aún positiva tanto en CMFA como en los resultados exactos). La separación de las concurrencias C_j para $j = 1, 2, 3$ es también un efecto de segundo orden.

5.2 SPA y CMFA para el modelo LMG

En esta sección veremos el resultado de implementar la CSPA completa en un caso en que la complejidad computacional es mínima: el caso del modelo de Lipkin-Meshkov-Glick (LMG), caracterizado por la invarianza ante permutaciones de los espines, a fin de comparar estos resultados con los obtenidos mediante la CMFA. Este modelo es particularmente importante por varios motivos. A los efectos de discutir la aplicación de CSPA, el principal motivo es que es tratable en forma exacta, de manera que se pueden obtener expresiones *analíticas simples*, tanto para su función de partición como para la concurrencia de pares, que se presentarán en el Apéndice A. Además, como veremos luego, esta clase de sistemas presenta una rica estructura de fases, que incluye un comportamiento no trivial del entrelazamiento con la temperatura: para ciertos valores de los parámetros, el entrelazamiento del estado *aumenta* con la temperatura.

El modelo LMG consiste de un arreglo simétrico de N espines completamente conectados (simplex) con acoplamientos en general anisotrópicos XYZ sumergido en un campo magnético transversal. Este es un modelo resoluble aunque no trivial, que exhibe una transición de fase cuántica a $T = 0$. Este ha atraído un renovado interés en años recientes, habiéndose utilizado para describir diversos sistemas físicos como arreglos de juntas Josephson [66] y condensados de Bose Einstein de dos modos [67]. Sus propiedades de entrelazamiento a temperatura cero fueron analizadas con detalle en las referencias [63, 68–70], donde fue mostrado en particular que la concurrencia de pares exhibe un rico comportamiento cuando es escaleado apropiadamente, con un máximo en el campo crítico en el caso ferromagnético y un decrecimiento suave para campos grandes [70]. En lo que sigue describiremos la solución general del caso XYZ, así como el comportamiento del entrelazamiento de pares a temperatura cero y temperatura finita, para el caso de un sistema de N espines $1/2$.

El Hamiltoniano es

$$H = b \sum_{i=1}^N S_{iz} - \frac{1}{N\hbar} \sum_{i \neq j}^N (v^x S_{ix} S_{jx} + v^y S_{iy} S_{jy} + v^z S_{iz} S_{jz}) \quad (5.16)$$

donde S_{μ}^i denota la componente μ del espín en el sitio i (en unidades \hbar). El escaleo $1/N$ de las constantes de acoplamiento asegura que todas las energías intensivas se mantengan finitas en el límite $N \rightarrow \infty$ y v_{μ} finito. Se asume además, sin pérdida de generalidad, que $|v_y| \leq |v_x|$ y $b \geq 0$. Vamos a considerar aquí el caso atractivo $v_x > 0$ (con $|v_y| \leq v_x$). La matriz de interacción V es en este modelo una matriz constante, salvo por los elementos diagonales, que, según la prescripción de la sección anterior, deberían ser cero, a fin de reducir la norma L^2 de la matriz de interacción, y así optimizar la aproximación. De esta manera, V tendría dos modos distintos: uno asociado a $k = 0$, $v_0^{\mu}(N-1)/N$, y $N-1$ modos degenerados $v_k^{\mu} = -v_0^{\mu}/N$. En el presente caso, $v_0 > 0$ y los modos degenerados corresponden a modos repulsivos. En el caso de espín $1/2$, es posible incluir términos de auto interacción arbitrarios que sólo modifican al Hamiltoniano en una constante aditiva. Esto nos permite completar V de forma de que sea una matriz verdaderamente constante, compensando estos términos con un término constante $\hbar \sum_{\mu} v_0^{\mu}/(4N)$. De esta manera, V es corregida en términos $\mathcal{O}(1/N)$, respecto de la elección óptima (en el sentido de la convergencia de la serie perturbativa de $\mathcal{T} \exp(-\int h(\tau) d\tau)$). Esto no tiene mayores consecuencias en el límite de N grande, y nos da un estupendo beneficio: Todos los acoplamientos asociados a los modos repulsivos se anulan. De esta manera, el tratamiento CSPA requerirá integrar sólo sobre las configuraciones uniformes estáticas, asociadas al modo colectivo atractivo.

5.3 CSPA para el caso XYZ

La función de partición en la aproximación CSPA es en este caso de la forma

$$Z_{\text{CSPA}} = \sqrt{\prod_{\mu} \frac{N\beta}{4\pi v_{\mu}}} \int_{-\infty}^{\infty} Z(\mathbf{r}) \frac{\omega(\mathbf{r}) \sinh[\frac{1}{2}\beta\hbar\lambda(\mathbf{r})]}{\lambda(\mathbf{r}) \sinh[\frac{1}{2}\beta\hbar\omega(\mathbf{r})]} d^3\mathbf{r}, \quad (5.17)$$

donde, definiendo $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{r} - \mathbf{b} = (x, y, z - b)$,

$$H(\mathbf{r}) = (\mathbf{r}^{\mu} + b\mathbf{1}_z^{\mu}) \sum_i S_{i\mu} \quad (5.18)$$

$$\begin{aligned} Z(\mathbf{r}) &= \text{tr} [\exp[-\beta H(\mathbf{r})]] \\ &= e^{-\frac{\hbar}{4}\beta \sum_{\mu} (Nr_{\mu}^2/v_{\mu} + v_{\mu})} [2 \cosh \frac{1}{2}\beta\hbar\lambda(\mathbf{r})]^N, \end{aligned} \quad (5.19)$$

$$\lambda(\mathbf{r}) = [\sum_{\mu} \lambda_{\mu}^2]^{1/2}, \quad (5.20)$$

$$\omega(\mathbf{r}) = [\sum_{\mu} \lambda_{\mu}^2 (1 - f_{\mu'}) (1 - f_{\mu''})]^{1/2}, \quad (5.21)$$

$$f_{\mu} = v_{\mu} \tanh[\frac{1}{2}\beta\hbar\lambda(\mathbf{r})] / \lambda(\mathbf{r}), \quad (5.22)$$

con $\mu' < \mu''$, $\mu', \mu'' \neq \mu$. En (5.17) $Z(\mathbf{r})$ es una función de partición de tipo Hartree mientras que los restantes factores tienen en cuenta las correcciones cuánticas de pequeña amplitud, con $\omega(\mathbf{r})$ la única energía de RPA generalizada existente en el presente sistema.

En lo que resta del capítulo vamos a usar como medida de entrelazamiento la concurrencia de pares, que evaluaremos según las expresiones (2.35-2.37), pero evaluando las correlaciones α_μ a partir de la función de partición CSPA (Ec. (5.17)). Mencionemos además que, como todos los pares son igualmente entrelazados, el máximo valor que pueden alcanzar C_\pm (Ec. (2.35)) en el presente sistema es $2/N$ [64] (por ejemplo, en el estado tipo W , $|SM\rangle = |\frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1\rangle$) lo que implica que sólo la concurrencia escaleada $c = NC$ puede mantenerse finita en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$.

Campo medio + RPA

Para N suficientemente grande y lejos de las zonas críticas, vamos a integrar sobre todas las variables \mathbf{r}_k , incluyendo a \mathbf{r}_0 , en la aproximación de punto silla alrededor del mínimo del potencial de energía libre $-T \ln Z(\mathbf{r})$, determinado por las ecuaciones autoconsistentes

$$r_\mu = f_\mu(r_\mu - b_\mu), \quad \mu = x, y, z. \quad (5.23)$$

Esto lleva a la CMFA. Para un mínimo aislado en $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$, obtenemos

$$Z_{\text{CMFA}} = \frac{Z(\mathbf{r}_0)}{\sqrt{1-\zeta}} \frac{\sinh \frac{1}{2} \beta \hbar \lambda}{\sinh \frac{1}{2} \beta \hbar \omega}, \quad (5.24)$$

donde $\zeta = 1 - \det \left(\frac{\lambda^2}{\omega^2} \left[-\frac{2v_\mu}{N\beta\hbar} \frac{\partial^2 \ln Z(\mathbf{r})}{\partial r_\mu \partial r_{\mu'}} \right]_{\mathbf{r}_0} \right)$ tiene en cuenta las fluctuaciones Gaussianas estáticas, $\lambda \equiv \lambda(\mathbf{r}_0)$ y $\omega \equiv \omega(\mathbf{r}_0)$. En (5.24), $Z(\mathbf{r}_0)$ es la función de partición de campo medio mientras que el último factor es la corrección RPA propiamente dicha, la cual representa la razón de dos funciones de partición de bosones independientes: la de bosones con energías ω y la de bosones de energías λ .

Para el presente Hamiltoniano Ecs. (5.23) implican que $r_\mu = 0$ o que $f_\mu = 1$ para $\mu = x, y$. Para $|v_y| < v_x$ y $v_z < v_x$, obtenemos entonces los siguientes mínimos:

1. Si $|b| < b_c$ y $T < T_c(b)$, donde

$$b_c = v_x - v_z, \quad T_c(b) = \hbar \frac{v_x b / b_c}{\ln \frac{1+b/b_c}{1-b/b_c}}, \quad (5.25)$$

el mínimo corresponde a la solución degenerada con simetría de paridad rota $\mathbf{r} = (\pm x, 0, z)$, para $x \neq 0$. En este caso λ es determinada por la ecuación $f_x = 1$, esto es,

$$\lambda = v_x \tanh \frac{1}{2} \beta \hbar \lambda, \quad (5.26)$$

la cual depende sólo de v_x y T ($\lambda = v_x$ a $T = 0$), mientras que $z = -v_z b / b_c$ (independiente de T) y $x = \sqrt{\lambda^2 - v_x^2 b^2 / b_c^2}$, el vínculo $\lambda > v_x b / b_c$ lleva a la Ec. (5.25). Sobre esta solución, la frecuencia RPA (5.21) es

$$\omega = x \sqrt{(1 - f_y)(1 - f_z)}, \quad (5.27)$$

con $f_\mu = v_\mu / v_x$, y $\zeta = \frac{1}{2} \beta \hbar v_x / \cosh^2 \frac{1}{2} \beta \hbar \lambda$. Nótese que $\omega \rightarrow 0$ para $T \rightarrow T_c(b)$ (cuando $x \rightarrow 0$) o $v_y \rightarrow v_x$ (ya que $f_y \rightarrow 1$), implicando la divergencia de (5.24) en esos límites. El caso XXZ, que presenta una degeneración continua será discutido más adelante.

2. Para $|b| > b_c$ ó $T > T_c(b)$, el mínimo corresponde a la solución en la fase *normal* $\mathbf{r} = (0, 0, z)$. En este caso $\lambda = b - z$ es la raíz positiva de la ecuación

$$\lambda = b + v_z \tanh[\frac{1}{2} \beta \hbar \lambda] \quad (5.28)$$

con $\lambda = b + v_z$ a $T = 0$. La frecuencia RPA será

$$\omega = \lambda \sqrt{(1 - f_x)(1 - f_y)}. \quad (5.29)$$

con $f_\mu = (1 - b/\lambda) v_\mu / v_z$, y $\zeta = \frac{1}{2} \beta \hbar v_z / \cosh^2 \frac{1}{2} \beta \hbar \lambda$. Aquí $\omega \rightarrow 0$ para $T \rightarrow T_c(b)$ (pues $f_x \rightarrow 1$) pero se mantiene finita para $v_y \rightarrow v_x$. Esta es también la única solución si $v_z > v_x$.

La correspondientes expresiones para los elementos de matriz (A.3)-(A.4) son

$$\alpha_\mu = \frac{1}{2(N-1)} \left(\frac{N r_\mu^2}{2v_\mu^2} - \frac{1}{2} + \delta_{v_\mu} \right), \quad \langle s_z \rangle = \frac{\hbar}{2N} \left(\frac{z}{v_z} + \delta_b \right),$$

$$\delta_\eta \equiv \frac{\partial \lambda}{\partial \eta} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \lambda - \frac{\partial \omega}{\partial \eta} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega + \frac{T \hbar^{-1} \partial \zeta}{1 - \zeta \partial \eta},$$

con $\eta = v_\mu, b$. El primer término en $\alpha_\mu, \langle s_z \rangle$ es la contribución $\mathcal{O}(1)$ de Hartree, mientras que δ_η provee la corrección RPA que es de orden $\mathcal{O}(1/N)$, esencial para describir el entrelazamiento.

Concurrencia CMFA

Las expresiones completas para la concurrencia (que en este caso es independiente del par de sitios considerados) en la aproximación RPA derivadas de las Ecs. (A.3)-(2.36) y (5.24)

vienen dadas en la fase de simetría rota por las siguientes expresiones, en términos del campo escaleado $\tilde{b} \equiv b/b_c$,

$$C_+ = -\frac{1 - \lambda^2/v_x^2}{2} + \frac{1}{N-1} \left\{ 1 - \frac{\omega}{v_x - v_y} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \left[1 + \frac{\zeta}{1-\zeta} \frac{(1 - v_y/v_x) \lambda^2}{\lambda^2 - v_x^2 \tilde{b}^2} \right] - \left(\frac{\zeta}{1-\zeta} \right)^2 \left[1 - (3-\zeta) \frac{T}{\hbar v_x} \right] \right\}, \quad (5.30)$$

$$C_- = \frac{\lambda^2/v_x^2 - \tilde{b}^2}{2} + \frac{1}{N-1} \left\{ \frac{1 - \tilde{b}^2}{2} - \frac{v_x - v_y}{\omega} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \left[\frac{\lambda^2/v_x^2 + \tilde{b}^2}{2} + \frac{\zeta}{1-\zeta} \lambda^2 (1 - v_z/v_x) \right] - \frac{\zeta^2}{(1-\zeta)^2} \left[1 - (3-\zeta) \frac{T}{\hbar v_x} \right] \right\} - \left\{ \left[\frac{1 + \tilde{b}^2}{2} + \frac{1}{N-1} \left(\frac{v_x - v_y}{\omega} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \frac{\lambda^2/v_x^2 + \tilde{b}^2}{2} - \frac{1 - \tilde{b}^2}{2} \right) \right]^2 - \tilde{b}^2 \left(1 + \frac{1 - v_y/v_x}{N\omega} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \right)^2 \right\}^{1/2}, \quad (5.31)$$

donde $\zeta = \frac{1}{2} \beta \hbar b_c (1 - \frac{\lambda^2}{v_x^2})$ y $\lambda = \tanh \frac{1}{2} \beta \hbar \lambda$. Si \tilde{b} no es muy cercano a 1, podemos expandir la Ec. (5.31) hasta orden $\mathcal{O}(1/N)$ como

$$C_- \approx -\frac{1 - \lambda^2/v_x^2}{2} + \frac{1}{N-1} \left\{ 1 - \frac{v_x - v_y}{\omega} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \left[\frac{\lambda^2/v_x^2 - \tilde{b}^2}{1 - \tilde{b}^2} + \frac{\zeta}{1-\zeta} (1 - v_z/v_x) \frac{\lambda^2}{v_x^2} \right] - \frac{\zeta^2}{(1-\zeta)^2} \left[1 - (3-\zeta) \frac{T}{\hbar v_x} \right] \right\}. \quad (5.32)$$

Para $\beta \hbar \lambda \ll 1$, $\lambda/v_x \approx 1 - 2e^{-\beta \hbar \lambda}$, con $1 - \frac{\lambda^2}{v_x^2} \approx 4e^{-\beta \hbar \lambda}$.

Similarmente, en la fase normal obtenemos

$$C_+ = -\frac{1 - \tanh^2 \frac{1}{2} \beta \hbar \lambda}{2} + \frac{1}{N-1} \left\{ 1 - \frac{f_x \omega / v_x}{1 - f_y} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega + \frac{1}{2} \zeta \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \sum_{\mu=x,y} \frac{f_x \omega / v_x}{1 - f_\mu} \left(\frac{v_\mu}{v_z} - \frac{1}{1-\zeta} \right) - \frac{\zeta}{(1-\zeta)} \frac{3T}{\hbar v_z} \right\} \quad (5.33)$$

donde $f_\mu = v_\mu \tanh(\frac{1}{2} \beta \hbar \lambda) / \lambda$, $\zeta = \frac{1}{2} \beta \hbar v_z (1 - \tanh^2 \frac{1}{2} \beta \hbar \lambda)$ y λ son determinadas por la Ec. (5.28).

Expresiones asintóticas para la concurrencia

Las expresiones completas para la concurrencia en la aproximación CMFA son muy extensas, lo que oscurece su interpretación. Sin embargo, hasta términos de orden $\mathcal{O}(1/N)$ y para temperaturas T suficientemente bajas, obtenemos

$$C_+ \approx \frac{1}{N-1} \left(1 - \frac{\omega}{v_x - v_y} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \right) - 2e^{-\beta \hbar v_x}, \quad (5.34)$$

$$C_- \approx \frac{1}{N-1} \left(1 - \frac{v_x - v_y}{\omega} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \right) - 2e^{-\beta \hbar v_x} \quad (5.35)$$

en la fase con simetría rota ($|b| < b_c$), donde

$$\frac{\omega}{v_x - v_y} = \sqrt{\frac{1 - (b/b_c)^2}{1 - \chi}}, \quad \chi = \frac{v_y - v_z}{v_x - v_z}, \quad (5.36)$$

mientras que para la fase normal ($b > b_c$), $C_- \leq 0$ y

$$C_+ = \frac{1}{N-1} \left(1 - \frac{\omega}{b + v_z - v_y} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \right) - 2e^{-\beta \hbar (b + v_z)}, \quad (5.37)$$

con

$$\frac{\omega}{b + v_z - v_y} = \sqrt{\frac{b/b_c - 1}{b/b_c - \chi}}. \quad (5.38)$$

Hemos usado en (5.34)–(5.38) los valores a $T = 0$ para λ y ω , siendo las correspondientes correcciones térmicas de orden $e^{-\beta \hbar \lambda} = \mathcal{O}(1/N)$ para temperaturas donde (5.34), (5.35) y (5.37) son positivas, originando entonces términos $\mathcal{O}(1/N^2)$ en C . Las Ecs. (5.34)–(5.37) se vuelven cada vez más precisas al aumentar N (coincidiendo en el límite de $T \rightarrow 0$ y $v_z = 0$ con las expresiones de la ref [70]) y pueden resumirse como

$$C_{\pm} \approx \frac{1 - \left(\frac{\omega}{\lambda - v_y}\right)^{\pm 1} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega}{N-1} - 2e^{-\beta \hbar \lambda}, \quad (5.39)$$

con $\lambda = v_x$, $\omega = \sqrt{(1 - b^2/b_c^2)(\lambda - v_y)(\lambda - v_z)}$ para $|b| < b_c$ y $\lambda = b + v_z$, $\omega = \sqrt{(\lambda - v_x)(\lambda - v_y)}$ para $b > b_c$, aplicándose el resultado para $b > b_c$ sólo para C_+ .

Para $T \rightarrow 0$ ($e^{-\beta \hbar \lambda} \rightarrow 0$, $\coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \rightarrow 1$) C_{\pm} es completamente determinado para valores grandes de N por el campo escaleado b/b_c y la anisotropía χ . Para $0 < \chi < 1$ (esto es, $v_z < v_y < v_x$), C_- (C_+) será positiva para $|b| < b_s$ ($> b_s$), donde

$$b_s = b_c \sqrt{\chi}, \quad (5.40)$$

es el *campo factorizante* (ver Cap. 8). Por lo tanto, a $T = 0$ ambas C_{\pm} se anulan en $b = b_s$, siendo C antiparalela para $|b| < b_s$ y paralela para $|b| > b_s$. Por otro lado, si $\chi \leq 0$ ($v_y \leq v_z < v_x$) o $\chi > 1$ ($v_y < v_x < v_z$, no existiendo en tal caso una fase con simetría rota) C es siempre paralela en el caso de $T = 0$. Se ve también en (5.37)–(5.38) que a $T = 0$, C_+ se mantiene positiva para campos arbitrariamente grandes, con $(N-1)C_+ \approx \frac{1}{2}(1-\chi)b_c/b$ para $b \gg b_c$.

Efectos térmicos

Lejos de b_c y del límite XXZ , el principal efecto térmico en las Ecs. (5.34)–(5.37) provendrá del término exponencial $-2e^{-\beta\hbar\lambda}$, que proviene de la contribución de Hartree en CMFA a α_μ y $\langle s_z \rangle$ ($\approx \frac{1}{4}r_\mu^2/v_\mu^2$ y $\frac{1}{2}z/v_z$); si sólo esta contribución se conserva, las Ecs. (2.36)–(2.37) llevan a $C_\pm = \frac{1}{2}(\tanh^2 \frac{1}{2}\beta\hbar\lambda - 1) \approx -2e^{-\beta\hbar\lambda}$ para $\beta\hbar\lambda \gg 1$). Estas representan el efecto de la disminución inducida por la temperatura del valor medio del espín total $\langle S^2 \rangle \approx \frac{\hbar^2}{4}N^2 \tanh^2 \beta\hbar\lambda/2$. En el resultado exacto (Sec. A.1 del Apéndice A) la concurrencia proviene del estado más bajo del multiplete $S = N/2 - 1$, que tiene energía de excitación $\approx \lambda$ (ver Fig. 6 en la sección siguiente) y multiplicidad $N - 1$ (Ec. (A.2)). El factor RPA térmico $\coth \frac{1}{2}\beta\hbar\omega$ no puede despreciarse (esto es, remplazarlo por 1) en (5.34)–(5.37), particularmente para b cercano a b_c o χ cercano a 1, ya que ω es menor que λ (para $v_\mu > 0$) y se anula para $b \rightarrow b_c$ o $v_y \rightarrow v_x$. En el resultado exacto esto representa esencialmente el efecto del estado excitado *dentro* del multiplete $S = N/2$, cuya energía de excitación tiene un comportamiento aproximadamente armónico (esto es, $\Delta E \approx k\omega$, $k = 0, 1, \dots$; ver Fig. 3). Con este factor, la Ec. (5.35) se reduce correctamente para $v_y \rightarrow v_x$ y hasta términos de orden $\mathcal{O}(1/N)$, al resultado asintótico para el caso XXZ (ver más abajo),

$$C_- \approx \frac{1}{N-1} \left(1 - \frac{2T/(\hbar b_c)}{1 - (b/b_c)^2} \right) - 2e^{-\beta\hbar v_x}, \quad (v_x = v_y) \quad (5.41)$$

mientras que para $b \rightarrow b_c$, las Ecs. (5.34) y (5.37) convergen a

$$C_+ \approx \frac{1}{N-1} \left(1 - \frac{2T/\hbar}{v_x - v_y} \right) - 2e^{-\beta\hbar v_x}, \quad (b = b_c). \quad (5.42)$$

Así, en estas regiones la concurrencia exhibirá inicialmente un decrecimiento a lo sumo *lineal* al aumentar T antes de que el término exponencial se vuelva apreciable, como consecuencia de la baja energía de excitación de los estados $S = N/2$.

De todos modos, para valores de N lo suficientemente grandes, la concurrencia decrecerá monótonamente al aumentar T , con C_\pm anulándose a una temperatura límite T_L^\pm que decrecerá *logarítmicamente* al aumentar N , como lo implica la Ec. (5.39):

$$T_L^\pm \approx \hbar \frac{\lambda}{\ln \frac{2(N-1)}{1 - (\frac{\omega}{\lambda - v_y})^{\pm 1} \coth \frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}, \quad (5.43)$$

la cual es una ecuación trascendente para T_L^\pm . Ambas T_L^\pm se anulan (logarítmicamente) para $b \rightarrow b_s^\pm$, con T_L^- decreciendo y T_L^+ aumentando al crecer la intensidad del campo (y $T_L^+(b)$ desarrollando una discontinuidad en su pendiente en b_c). El incremento de T_L^+ con el campo b *persiste para* $b \gg b_c$, donde

$$T_L^+ \approx \hbar \frac{b + v_z}{\ln \frac{4(N-1)b/b_c}{1-\chi}}, \quad (5.44)$$

implicando que a cualquier temperatura fija T el entrelazamiento paralelo puede ser inducido por un aumento del campo (para $b \gg b_c$, λ y ω se vuelven proporcionales a b , y

el sistema se aproxima entonces a su estado fundamental cuando b aumenta). El mismo comportamiento fue observado en las temperaturas límite para el entrelazamiento global no nulo en sistemas anisotrópicos pequeños [71].

A una temperatura T fija, el principal efecto térmico para $0 < \chi < 1$ es así la aparición de una *ventana de separabilidad* $b_L^- \leq |b| \leq b_L^+$ (en vez de un punto de separabilidad) donde $C_{\pm} = 0$, con

$$b_L^{\pm} \approx b_c \sqrt{1 - (1 - \chi) [\tanh \frac{1}{2} \beta \hbar \omega (1 - 2(N - 1) e^{-\beta \hbar v_x})]^{\pm 2}} \quad (5.45)$$

(válida para $T < T_L^+(b_c)$ para b_L^+ y $T < T_L^-(0)$ para b_L^-). Su ancho crece entonces al aumentar N o T , con $b_L^{\pm} \approx b_s [1 \pm 2(\chi^{-1} - 1)(N - 1)e^{-\beta \hbar v_x}]$ para $Ne^{-\beta \hbar v_x} \ll 1$. Para $T > T_L^-(0)$ la ventana de separabilidad se extiende desde $b = 0$ ($C_{\pm} = 0$ para $|b| < b_L^+$).

Comparación con resultados exactos para N finito

En la Fig. 3 se muestran algunos resultados típicos para el comportamiento magnético de la concurrencia a temperatura finita, para el caso XY ($v_z = 0$) con $N = 100$ espines y diferentes anisotropías. Se ve en primer lugar que los resultados CMFA obtenidos de las expresiones asintóticas (5.34)–(5.37) son muy precisos excepto en la vecindad del campo crítico, mejorando al aumentar T . Los resultados del tratamiento CSPA completo mejoran aquellos de CMFA en la región crítica para temperaturas T no demasiado bajas, siendo prácticamente indistinguibles de los exactos a las temperaturas consideradas.

El panel superior corresponde al caso de Ising $v_y = 0$, donde la concurrencia es siempre paralela. A $T = 0$ crece suavemente desde 0 al aumentar b , alcanzando su máximo cerca de b_c , mientras que para $T > 0$ se vuelve no nula sólo sobre un campo *umbral* b_L^+ (Ec. (5.45) para $T < T_L^+(b_c)$). En el panel central ($\chi = 0,5$) podemos apreciar la anulación de la concurrencia en el campo factorizante $b_s \approx 0,71v_x$ a $T = 0$, donde cambia de antiparalela a paralela. Este punto se transforma en una ventana al aumentar T , la cual se extiende desde $b = 0$ para $T > T_L^-(0) \approx 0,15v_x$.

El panel inferior representa el comportamiento cercano al límite XXZ. En este caso la concurrencia exacta C_- a $T = 0$ muestra un comportamiento oscilatorio al acercarse a $b \rightarrow b_s$ desde abajo, lo que refleja las transiciones de paridad de espín del estado fundamental. Estas transiciones, que desaparecen en el límite de $N \rightarrow \infty$ y por lo tanto no son predichas por CMFA ya que esta aproximación representa el comportamiento asintótico en ese límite (ver también la discusión en la Fig. 7). Sin embargo, al aumentar T las oscilaciones son rápidamente borradas y las expresiones asintóticas CMFA se vuelven nuevamente precisas. El factor térmico RPA $\coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega$ es aquí esencial para la alcanzar exactitud cuando $\beta \hbar \omega$ es pequeño ($\omega/v_x \lesssim 0,14$ para $b < b_c$).

Mencionemos que para $\chi \in (0, 1]$, el estado fundamental, que tiene paridad de espín definida $P = \pm 1$, exhibe $N/2$ transiciones de paridad $\pm \rightarrow \mp$ al crecer b desde 0, ocurriendo la última en el campo factorizante b_s . La concurrencia del estado fundamental cambia de paralela a antiparalela sólo en esta última transición. Estas transiciones son, sin embargo, apreciables sólo para χ cercano a 1 (y por lo tanto b_s cercano a b_c) o para tamaños pequeños, ya que en cualquier otro caso los estados fundamentales para ambas paridades

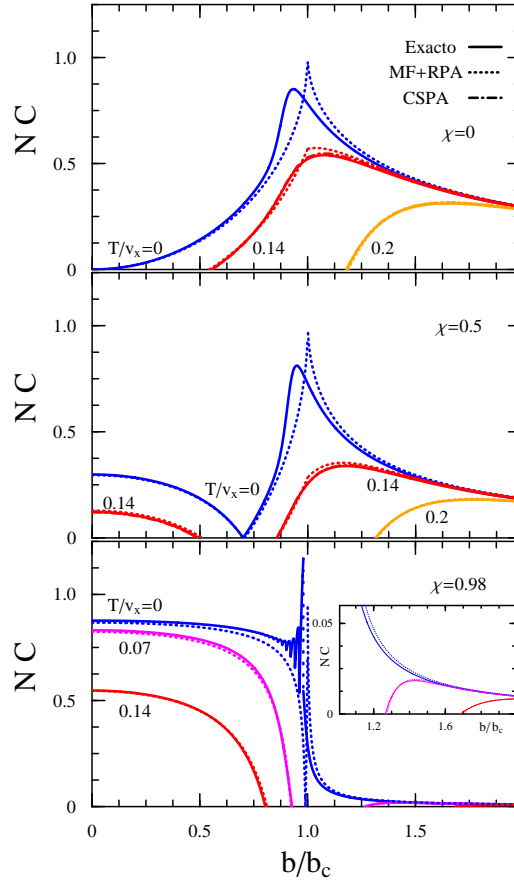


Figura 3: Concurrencia escalada en función del campo magnético b para $N = 100$ espines acoplados a través de una interacción XY de rango completo con anisotropías $\chi = v_y/v_x = 0$ (arriba), $0,5$ (centro) y $0,98$ (abajo), a diferentes temperaturas. Se representan los resultados exactos y los obtenidos con la estimación asintótica de CMFA (Ecs. (5.34)–(5.37)), junto con los de CSPA (Ec. (5.17)) para $T > 0$ (casi indistinguibles de los resultados exactos). C es paralela (antiparalela) para $b > b_s$ ($< b_s$), con b_s el campo factorizante (5.40). El recuadro muestra la reentrada de la concurrencia (paralela) para $b > b_c$ a $\chi = 0,98$.

son prácticamente degenerados y sus concurrencias son aproximadamente las mismas al igual que la de su mezcla (ver Fig. 6). Otra consecuencia de la conservación de paridad es que los límites laterales exactos de C_{\pm} a $b = b_s$ son en realidad distintos de cero y diferentes en cadenas finitas ($NC_{\pm} \rightarrow \delta/(e^{\delta/2} \pm 1)$, con $\delta = N(1 - \chi)$; vease [7] y el Cap. 8), siendo entonces apreciables para δ finitos pequeños. En el panel inferior obtenemos los límites laterales de $NC_{-} \approx 1,16$, $NC_{+} \approx 0,54$ para el resultado exacto a $b_s \approx 0,99b_c$, con C_{\pm} siendo de hecho *máximo* en $b = b_s$.

La Fig. 4 muestra las correspondientes temperaturas límite T_L^{\pm} , las cuales, notablemente, son también reproducidas con precisión por las expresiones asintóticas del resultado CMFA obtenido de la Ec. (5.43). T_L se anula a $b = b_s$ pero crece $\forall b > b_s$, desarrollando así una ventana de separabilidad entre las concurrencias antiparalela y paralela. El panel inferior muestra el decrecimiento *logarítmico* de T_L con el aumento de n en todas las regiones.

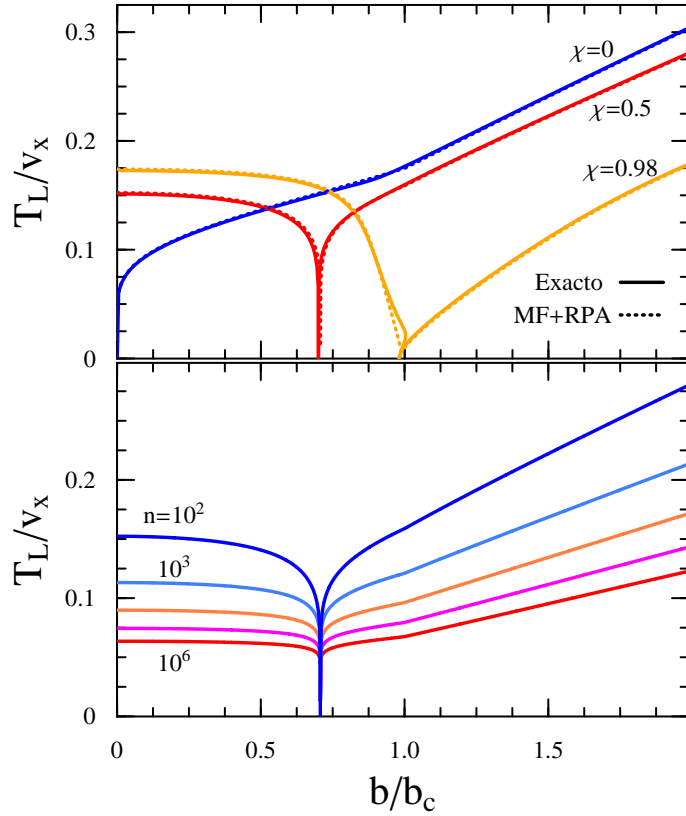


Figura 4: Arriba: Temperaturas límites T_L para el entrelazamiento de pares en función del campo magnético b para $N = 100$ espines y para las mismas anisotropías que en la Fig. 3, según los resultados exactos y de CMFA (Ec. (5.43)). Ambas se anulan en el campo factorizante b_s . Las regiones por debajo de la temperatura límite tienen entrelazamiento de pares finito, de tipo antiparalelo (paralelo) si $b < b_s$ ($> b_s$). Abajo: Temperaturas límite para un número creciente de espines para $\chi = 0,5$ ($N = 10^k$, $k = 2, \dots, 6$).

Remarquemos también que el comportamiento de T_L no guarda relación alguna con la temperatura crítica de campo medio, Ec. (5.25), la cual no depende de la anisotropía χ y se anula para $b > b_c$. Para $|b| < b_c$ es esencialmente mayor que T_L (excepto para n muy bajo [71]), decreciendo monótonamente desde $\frac{1}{2}v_x$ a $b = 0$ hasta 0 a $b = b_c$.

Para $\chi = 0,98$, la temperatura límite exacta T_L^- exhibe en realidad una pequeña *pendiente positiva* cercana a b_s , como vemos en el panel superior (no reproducida por CMFA). esto implica que a T bajas pero finitas, la concurrencia antiparalela persistirá en una delgada región *por encima* de b_s , mientras que a b fijo dentro de esta región, el comportamiento térmico de la concurrencia *no será monótono*, siendo primero paralela, anulándose y volviéndose entonces antiparalela antes de extinguirse a la T_L^- final, como se representa en el recuadro de la Fig. 5. Aproximadamente, para $b - b_s > 0$ pequeño, es posible mostrar que $T_L^\pm \approx \alpha^{-1}(b - b_s)\delta e^{-\delta/2}/(1 - e^{-\delta})$, con $\alpha = \ln \coth \delta/4$, lo que muestra que este efecto comienza entonces a notarse para $\delta = N(1 - \chi)$ finito.

La respuesta diferente de C para campos bajos, alrededor y por encima del campo crítico b_c puede ser observada en el panel principal de la Fig. 5 para $\chi = 0,5$.

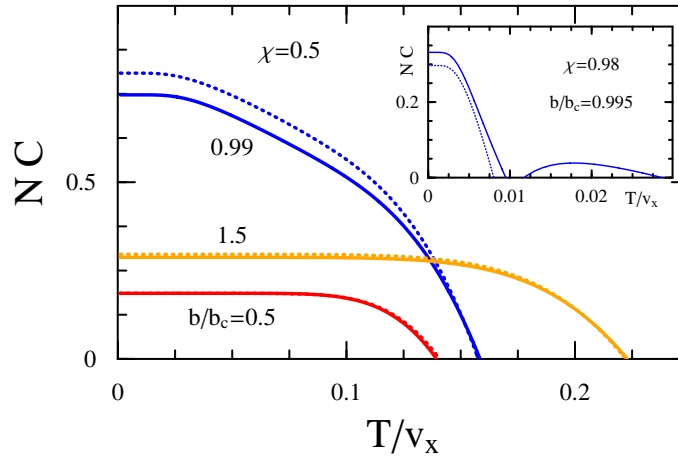


Figura 5: Comportamiento térmico de la concurrencia para $\chi = 0,5$ y $N = 100$ en los campos indicados. El recuadro representa el comportamiento no monótono justo por encima de b_s para $\chi = 0,98$ y $N = 100$. Las líneas sólidas representan los resultados exactos, y las punteadas aquellos obtenidos mediante CMFA, Ecs. (5.34)–(5.37).

La disminución más rápida con el aumento de T para $b \approx b_c$ está de acuerdo con la Ec. (5.42), mientras que los resultados a $b/b_c = 0,5$ y $1,5$ reflejan una tasa de decrecimiento diferente (Ecs. (5.35)–(5.37)). El origen de los distintos factores térmicos en las Ecs. (5.34)–(5.37) puede ser visto en la Fig. 6, que representa las energías de excitación de los niveles más bajos (S, k^\pm) para $\chi = 0,5$. Para $|b| < b_c$, los niveles correspondientes de paridad opuesta son prácticamente degenerados. La energía de excitación no nula dentro del multiplete de espín total máximo es cercanamente armónica, el nivel más bajo coincide prácticamente con la energía RPA (5.27), mientras que la energía de excitación del estado más bajo con $S = N/2 - 1$ es casi independiente de b y coincidente con $\lambda = v_x$. La degeneración de paridad se rompe en todos los niveles cuando b se aproxima a b_c , donde las excitaciones de espín máximo se vuelven bajas y dan origen a la creciente sensibilidad térmica (Ec. (5.42)). Para $|b| > b_c$ la energía RPA representa de nuevo la energía de excitación más baja en el multiplete de espín total máximo, que ahora tiene paridad negativa, mientras que $\lambda = b + v_z$ es nuevamente la energía de excitación del nivel más bajo de estados con $S = N/2 - 1$, que tiene ahora paridad positiva.

La correspondiente concurrencia es mostrada en el panel inferior. Para $|b| < b_c$ y $\chi = 0,5$, C es no nula sólo en el estado fundamental degenerado, siendo casi coincidentes excepto para b cercano a b_c y cambiando ambas de antiparalela a paralela en b_s . Sin embargo, para $b > b_c$ C es no nula en todos los estados del espín máximo, siendo paralela en el estado fundamental y en el estado más alto, pero antiparalela en el resto. Estos son esencialmente los estados básicos $|S = N/2, S_z = M\rangle$ más correcciones perturbativas. Para $|M| < N/2$ ellos ya están entrelazados y exhiben entonces concurrencia antiparalela [8], mientras que para $|M| = N/2$ la concurrencia proviene sólo de las correcciones y es así paralela. También notamos que la mezcla de $N - 1$ estados con espín más bajo $S = N/2 - 1$ tiene concurrencia cero para todo campo (lo mismo ocurre con las mezclas de espín mínimo) por lo que la concurrencia térmica, la cual proviene esencialmente del estado fundamental, sólo puede

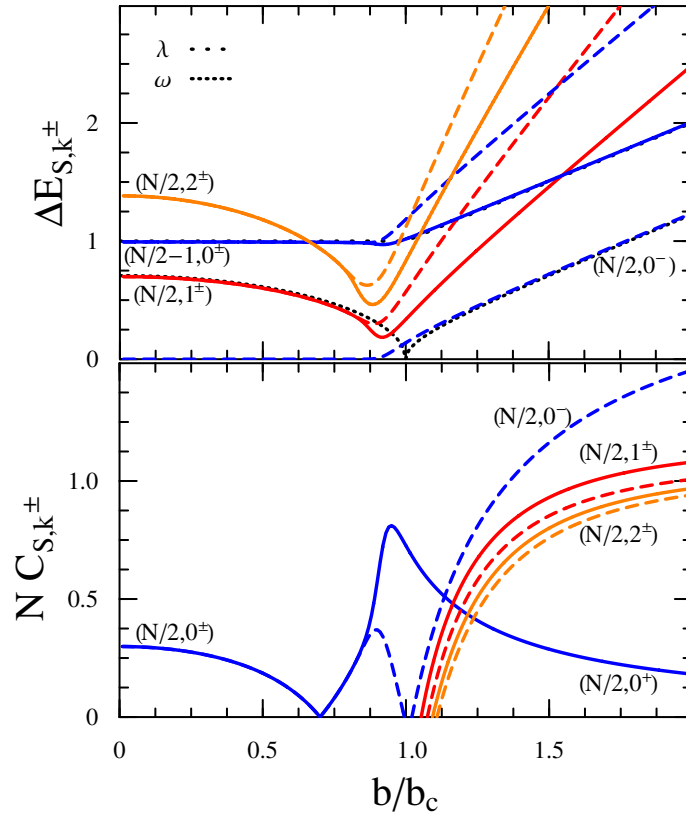


Figura 6: Arriba: Energías de excitación más baja $\Delta E_{S,k\pm} \equiv (E_{S,k\pm} - E_0)/v_x$ para $\chi = 0,5$ y $N = 100$, en función del campo magnético b . $E_{S,k\nu}$ denota la energía del nivel k con espín total S y paridad ν , mientras que $E_0 = E_{n/2,0^+}$. Las líneas sólidas (punteadas) representan los niveles con paridad positiva (negativa), prácticamente degenerados para $b < b_c$. La línea de puntos representa las energías de campo medio y RPA λ y ω respectivamente. Abajo: Las concurrencias correspondientes, incluyendo la del estado fundamental. Para $b < b_c$ C es antiparalela (paralela) si $b < b_s$ ($> b_s$) en ambos estados $(N/2, 0^\pm)$, mientras que para $b > b_c$, es paralela en el estado fundamental $(N/2, 0^+)$ pero antiparalela en el resto de los niveles representados.

decrecer excepto en regiones anómalas (la reentrada antiparalela en el recuadro de la figura Fig. 5 surge del primer estado excitado). Finalmente, la Fig. 7 muestra resultados para una red pequeña ($N = 10$), donde los efectos de tamaño finito se vuelven extremadamente importantes. El comportamiento discontinuo de la concurrencia exacta a $T = 0$ es ahora visible ya para $\chi = 0,5$ (panel superior), y los límites laterales en el campo factorizante exacto $b_s^{ex} = (1 - N^{-1})b_s$ se vuelven no nulos. El resultado CMFA es ahora menos preciso a $T = 0$, y lleva a la anulación de C_- para campos menores y cercanos al campo factorizante exacto b_s , si la expresión completa (5.31) es usada para C_- . Este error está relacionado con el término de autointeracción que, aunque en el resultado exacto no afecta los resultados, modifica ligeramente el tratamiento CMFA, según lo discutido en la sección anterior; sin embargo, los resultados de CMFA rápidamente mejoran al aumentar T , mientras que el

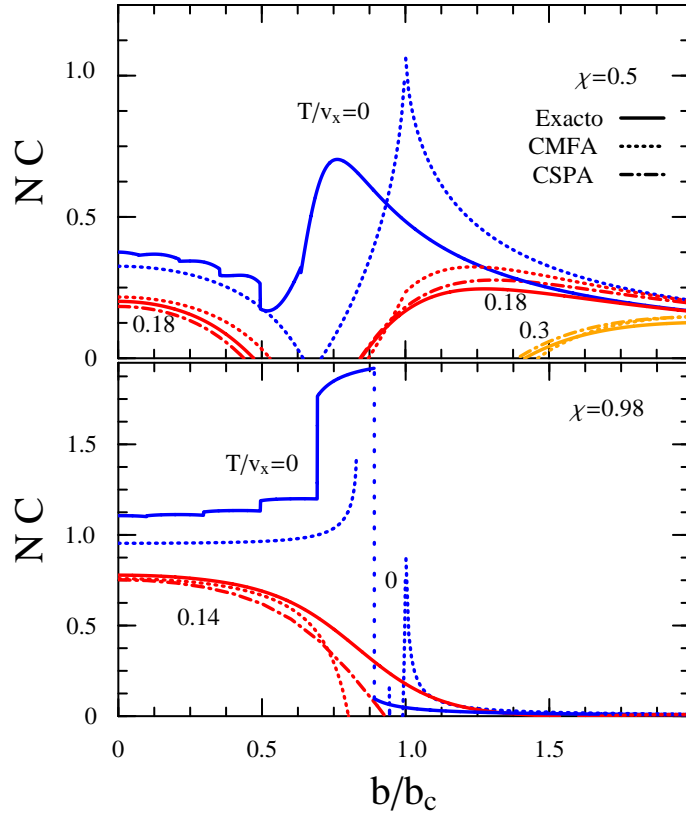


Figura 7: Comportamiento magnético de la concurrencia para una cadena con $N = 10$ espines a diferentes temperaturas, para anisotropías $\chi = 0,5$ (arriba) y $\chi = 0,98$ (abajo). En esta última la concurrencia antiparalela crece con el campo a muy baja T , como ocurre en el caso XXZ (ver en el texto).

método CSPA, a pesar de no ser ya exacto, mejora nuevamente los resultados en la vecindad de b_c .

Cuando la raíz cuadrada completa es conservada en la evaluación de C_- (Ec. (5.31)), la CMFA es ahora capaz de tener en cuenta cualitativamente el salto finito en C para campos cercanos a b_s pero sólo si χ es muy cercano a 1, como se ve en el panel inferior. En este caso, el resultado CMFA para C_- a $T = 0$ no decrece al aumentar b sino que *aumenta*, de acuerdo con el resultado exacto, terminando en un campo final $b_f < b_s^{ex}$ donde se vuelve complejo (y es máximo). Para $\chi = 1 - \delta/N$ y campos justo por debajo b_c , esto es, $(b/b_c)^2 = 1 - \varepsilon/N$, obtenemos en realidad, en vez de la Ec. (5.35), la expresión CMFA asintótica

$$C_- \approx \frac{1}{N} \left(\frac{1}{2} \varepsilon - \sqrt{\frac{\delta}{\varepsilon}} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \right) - 2e^{-\beta \hbar v_x} - \frac{1}{N} \left[2 \sqrt{\frac{\delta}{\varepsilon}} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar \omega + \frac{1}{4} \varepsilon (\varepsilon - 4) \right]^{1/2} \quad (5.46)$$

con $\omega = \sqrt{\varepsilon \delta} (v_x - v_z) / N$. Mientras que para $\varepsilon \propto n$ se reduce a la Ec. (5.35), para $\varepsilon < 4$ se vuelve complejo si δ es suficientemente pequeña. A $T = 0$, si $\delta < \delta_c = \frac{12^3}{5^5} \approx 0,55$, la Ec. (5.46) se vuelve compleja para $\varepsilon < \varepsilon_f(\delta) \approx 2,4 + \frac{5}{3} \sqrt{\delta_c - \delta}$, con $C_-(b_f) \approx \frac{1}{8} \varepsilon_f^2$. Nótese que

$C_-(b_f) > 1$ para $\delta \lesssim 0,48$, con $C_-(b_f) \rightarrow 2/N$ para $\delta \rightarrow 0$, que es el resultado correcto para el límite XXZ [8]. En el caso mostrado, $\delta = 0,2$. La Ec. (5.46) implica también que esos efectos, en particular el aumento de C_- cuando $b \rightarrow b_s$ para χ cercano a 1, desaparecerán para $T \propto \omega \propto b_c/N$ muy bajas, lo cual es confirmado en los resultados exactos. Es posible también apreciar en el panel inferior de la Fig. 7 la persistencia significativa de la concurrencia antiparalela hasta $b \approx 1,5b_c$ a $T/(\hbar v_x) = 0,14$ (que no es predicha por CMFA o CSPA), lo cual es justo el mismo comportamiento anómalo discutido en las Figs. 5–6, mejorado por el pequeño valor de δ . Sin embargo, aún en este caso extremo hay una débil pero no nula reaparición de la concurrencia paralela para campos altos $\forall T$ (apreciable en la figura sólo para $T = 0$) la cual es correctamente reproducida por CMFA.

5.4 Aproximaciones CSPA Y CMFA en el límite XXZ

El caso límite de una interacción XXZ ($v_x = v_y = v$) tiene algunas particularidades interesantes, ya que corresponde al límite crítico del modelo. Por un lado, se trata de un caso en el que el hamiltoniano es diagonalizable *en cada multiplete* de espín total definido, quedando la energía de los estados parametrizada por los autovalores del espín total S y de su componente en z , S_z . En la formulación CSPA la integral (5.17) puede expresarse en términos de coordenadas cilíndricas ($\mathbf{r} = (r \cos(\phi), r \sin(\phi), z)$), e integrarse exactamente en la variable angular ϕ , de lo que resulta [8]

$$Z_{\text{CSPA}} = \frac{N\beta}{2v} \sqrt{\frac{n\beta}{4\pi v_z}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} Z(\sqrt{r^2 + b^2}) \frac{\omega(\sqrt{r^2 + z^2}) \sinh[\frac{1}{2}\beta\hbar\sqrt{r^2 + b^2}]}{\sqrt{r^2 + b^2} \sinh[\frac{1}{2}\beta\hbar\omega(\sqrt{r^2 + z^2})]} r dr dz, \quad (5.47)$$

donde

$$H_{\pm}(\lambda) = \pm \sqrt{\lambda^2 - b^2} \sum_{i=1}^N S_{ix} + b \sum_{i=1}^N S_{ix} \quad (5.48)$$

$$\begin{aligned} Z(\lambda) &= \text{tr} [\exp[-\beta H_+(\lambda)]] = \text{tr} [\exp[-\beta H_-(\lambda)]] \\ &= e^{-\frac{\hbar}{4}\beta \sum_{\mu} (N(r^2/v + z^2/v_z) + 2v + v_z)} [2 \cosh \frac{1}{2}\beta\hbar\lambda]^N, \end{aligned} \quad (5.49)$$

$$\omega(\lambda) = \sqrt{(\lambda - v \tanh \frac{\beta\hbar\lambda}{2})(\lambda - v \frac{b^2}{\lambda^2} \tanh \frac{\beta\hbar\lambda}{2})} \quad (5.50)$$

Además de que las expresiones se vuelven algo más simples, encontramos en este caso dos elementos nuevos. En primer lugar, la aproximación de campo medio resulta en una frecuencia ω que se anula para cualquier valor del campo por debajo del campo crítico b_c . Esto, sin embargo, no introduce en principio ninguna clase de comportamiento anómalo en las integrales ya que, fuera de una región de medida cero, el integrando es siempre finito y positivo cuando el sistema se encuentra por encima de la temperatura de ruptura T_L . Una segunda particularidad es la presencia del factor jacobiano r , cuyo efecto es el de introducir una corrección orden $\mathcal{O}(1/N)$ a las ecuaciones de campo medio, de forma tal que evita la divergencia de las derivadas de Z en la vecindad de la transición de fase para sistemas finitos.

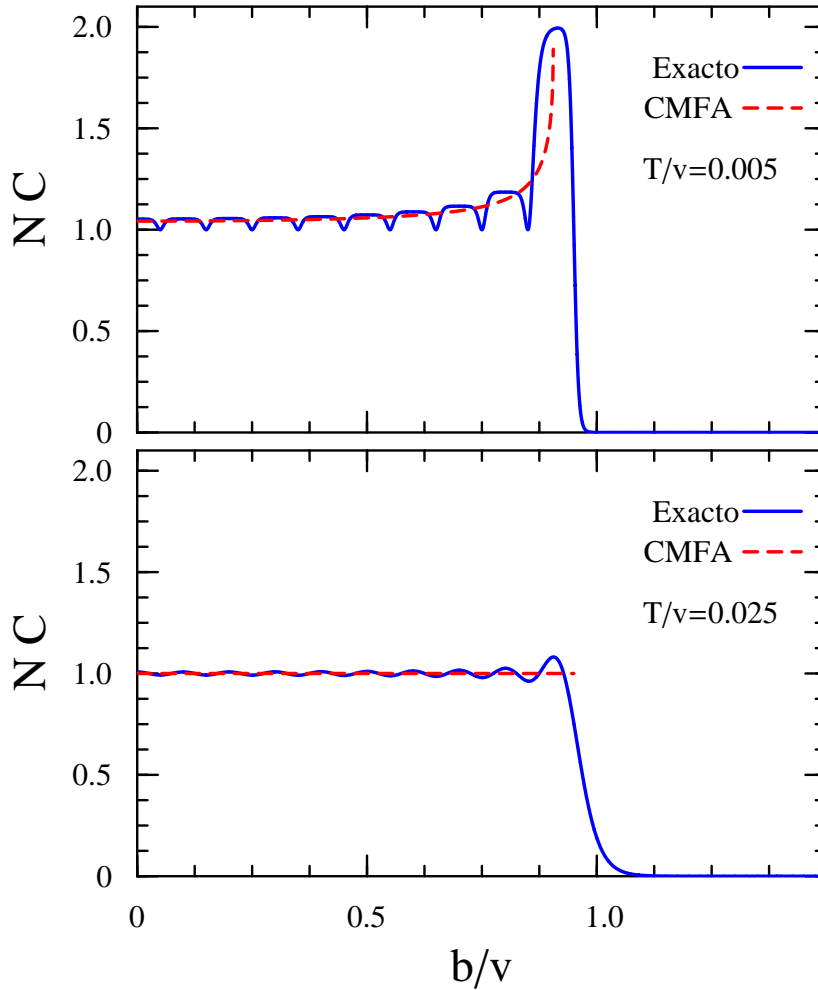


Figura 8: Concurrencia C (multiplicada por N) a bajas temperaturas en función del campo magnético b para $N = 20$ espines acoplados a través del Hamiltoniano (7.1) para $v_z = 0$. Las curvas representan los resultados exactos para $T/v = 0,005$ (panel superior), donde C alcanza su valor máximo ($2/N$) para $b \approx b_c$, y $T/v = 1/2N = 0,025$ (panel inferior), donde el pico en $b \approx b_c$ no es ya prominente (Ec. (5.44)). El comportamiento para $T \rightarrow 0$ para todo $v_z < v$ es idéntico excepto por el reescalo $v \rightarrow v - v_z$.

En la Fig. 8 se representa la concurrencia escaleada exacta en función del campo magnético junto con la aproximación CMFA. Las pequeñas oscilaciones que se observan en el resultado exacto corresponden a las $n/2$ transiciones que sufre el estado fundamental al aumentar el campo magnético. Al aumentar el tamaño del sistema, tanto las energías como las negatividades de los estados fundamentales de cada uno de los subespacios de paridad definida tienden al mismo límite, reduciendo la amplitud de estas oscilaciones, lo que también ocurre al aumentar la temperatura del sistema. En el límite de N grande, sólo persistirá el último pico, correspondiente a la transición asociada al campo factorizante, que es correctamente reproducido por CMFA. En la Fig. 9 se puede apreciar el comportamiento de

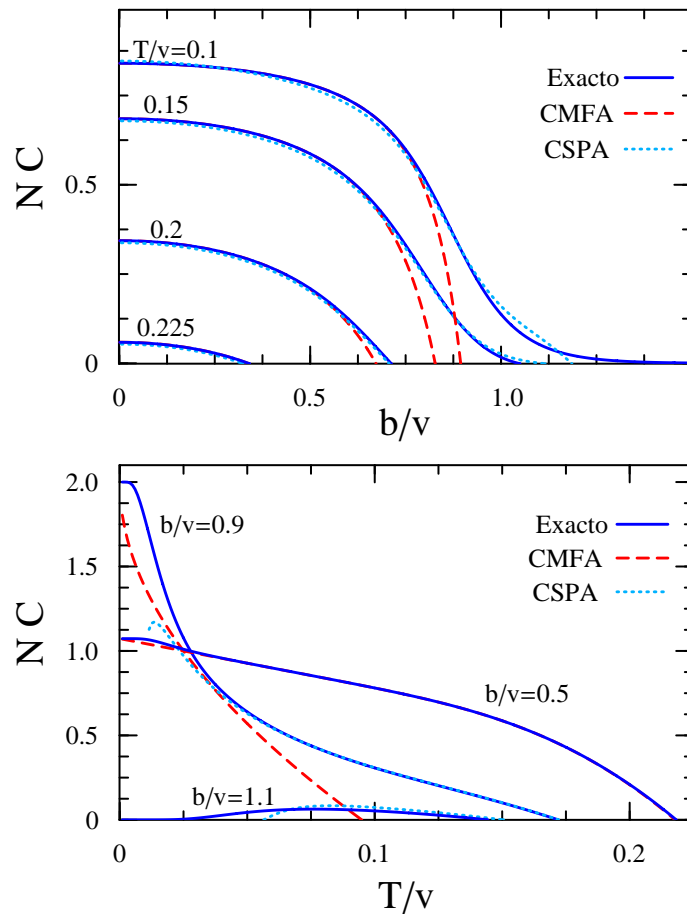


Figura 9: Concurrencia para $N = 20$ espines y $v_z = 0$, en función del campo magnético a diferentes temperaturas (arriba) y en función de la temperatura a diferentes campos (abajo). Se representaron los resultados exactos, CMFA y CSPA, observándose que el correspondiente a CMFA se anula para $b/v = 1,1$ (panel inferior), donde el entrelazamiento emerge para $T > 0$.

la concurrencia con respecto al campo magnético y la temperatura. La aproximación CSPA predice correctamente el comportamiento aún en la zona de la transición de fase. Para campos grandes sin embargo, esta aproximación no es capaz de predecir el comportamiento asintótico para campos grandes (que en este caso es $\propto \exp(-\beta(b - b_c))/N$ [8]). Por otro lado, a temperaturas bajas, la aproximación CMFA sólo es capaz de describir el entrelazamiento por debajo del campo crítico, presentando un mayor apartamiento del comportamiento exacto (y del de la CSPA) en el entorno de la transición de fase. En el panel inferior puede observarse como CSPA predice correctamente la *reentrada* del entrelazamiento en la zona de campo moderadamente grande.

En la Fig. 10 se puede apreciar cómo la aproximación CSPA reproduce casi exactamente el comportamiento de la concurrencia para $N > 20$, mientras que el resultado CMFA se vuelve indistinguibles de los resultados exactos y de su CSPA para $N > 100$. En el panel superior se representa el comportamiento de la concurrencia escaleada con el campo magnético. Para

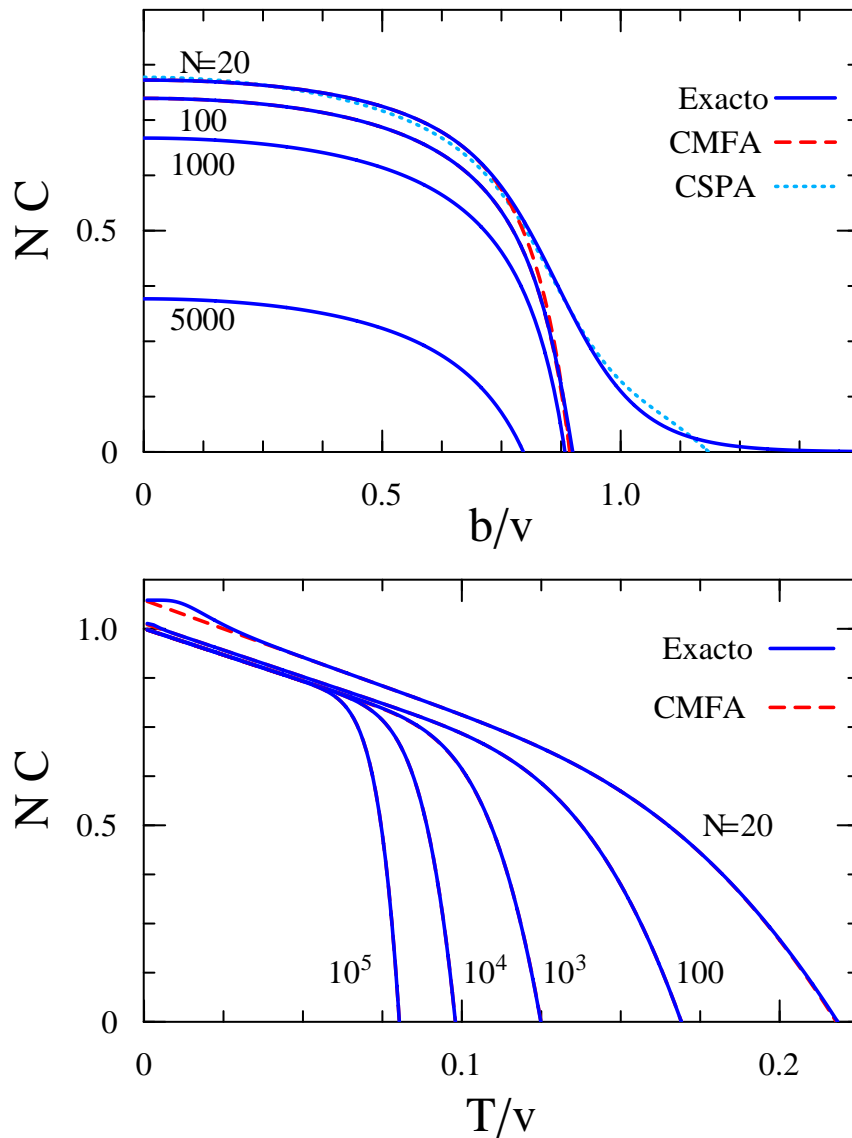


Figura 10: Arriba: Concurrencia en función del campo magnético a $T/v = 0,1$ y diferentes valores del número N de espines, para $v_z = 0$. Los resultados exactos, CMFA y CSPA prácticamente se solapan para $N \gtrsim 100$, la concurrencia se anula para $N \gtrsim 8810$. Abajo: Concurrencia en función de la temperatura a campo fijo $b = 0,5v$ y para valores crecientes de N . Los resultados Exacto y CMFA son indistinguibles para $N \gtrsim 100$.

$N > 100$ la concurrencia *exacta* a temperatura finita ($T/v = 0,1$) se anula antes de de la transición de fase de campo medio, mientras que para $N = 20$ se mantiene finita para campos por encima del campo crítico. En esa región, CSPA reproduce correctamente ese comportamiento en un entorno por encima de la transición de fase, aunque falla en predecir el comportamiento asintótico para campos grandes (que en este caso es $\propto \exp(-\beta(b - b_c))/N$ [8]). El panel inferior representa el comportamiento térmico, que nuevamente es

predicho con precisión por la CMFA. Se puede apreciar como al aumentar el tamaño del sistema, la temperatura crítica decrece con la inversa del logaritmo del tamaño del sistema, correspondiéndose con el predicho para T_L^- la Ec. (5.43).

Parte III

Bosonización RPA y entrelazamiento de bloques

6

BOSONIZACIONES APROXIMADAS Y RPA

En los capítulos anteriores mostramos como la aproximación [CSPA](#) y luego la [CMFA](#) eran capaces de estimar con mucha precisión las correlaciones de pares en una clase muy amplia de sistemas cuánticos, lo que nos permitía, en el caso de redes de espín 1/2 definir completamente la matriz densidad de cualquier subsistema formado por un par de espines. Si bien es posible en principio extender esta técnica para evaluar correlaciones de más cuerpos, su generalización implica incluir términos de interacción de tres o más cuerpos, así como un tratamiento perturbativo algo engorroso.

Existen sin embargo una clase de estados para los que, dadas las correlaciones de pares, podemos reconstruir cualquier otra correlación: los estados Gaussianos en sistemas de bosones. Esta clase de estados fueron discutidos al final del Cap. 2, donde evaluamos explícitamente la negatividad para cualquier partición de un subsistema de bosones.

Un hecho interesante consiste en que la aproximación a la función de partición que se obtiene del tratamiento [RPA](#) tiene un aspecto muy similar al cociente de dos funciones de partición correspondientes a Hamiltonianos bosónicos cuadráticos: De hecho, como veremos enseguida [RPA](#) es exacta cuando se la aplica a un Hamiltoniano bosónico cuadrático; las energías “locales” $\lambda_{\alpha i}$ se corresponden con las energías de excitación del sistema bosónico si se “apagan” todas las interacciones entre bosones distintos, mientras que las “frecuencias [RPA](#)” no son otra cosa que las energías *exactas* de las excitaciones colectivas del sistema bosónico.

Con estas ideas en mente, mostraremos primero cómo es posible encontrar un esquema de bosonización compatible con [RPA](#) que nos permita estimar correlaciones de muchos cuerpos en función de las correlaciones de pares y de los valores de los observables locales del sistema. Mostraremos además que en primera aproximación, los observables de entrelazamiento del sistema original se pueden estimar directamente a partir de los observables de entrelazamiento en el correspondiente sistema bosónico. Finalmente, se exhibirá cómo esta bosonización aproximada se encuentra relacionada con otros esquemas de bosonización exactos en ciertos sistemas, en particular, para sistemas de espines.

Tratamiento CSPA del hamiltoniano bosónico cuadrático

Consideremos en primer lugar el siguiente Hamiltoniano cuadrático en operadores bosónicos:

$$H^b = \sum_i \lambda_i b_i^\dagger b_i - \sum_{i \neq j} \Delta_{ij}^+ b_i^\dagger b_j - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \Delta_{ij}^- b_i b_j + h.c. \quad (6.1)$$

que pertenece a la clase definida en la Ec. (2.44), donde por simplicidad nos limitaremos al caso $\Phi = 0$. En (6.1) hemos separado tres términos: El primero corresponde a un hamil-

toniano “local” con energías de excitación λ_i . El segundo término corresponde a términos de interacción que preservan el número total de partículas, mientras que el resto consiste de términos que destruyen (o crean) pares de bosones distintos. Las energías colectivas de excitación de este sistema ω_i corresponden a los autovalores positivos de la matriz (2.53), que en este caso tiene la forma

$$\mathcal{MH} = \begin{pmatrix} \Lambda - \Delta^+ & -\Delta^- \\ (\Delta^-)^* & -\Lambda + (\Delta^+)^* \end{pmatrix} \quad (6.2)$$

donde Λ es la matriz diagonal con coeficientes λ_i . Asumiremos desde el principio que la matriz \mathcal{H} es definida positiva, de manera que H^b define un estado Gaussiano vía la Ec. (2.43). La función de partición *exacta* de este sistema es entonces

$$Z = \prod_i \frac{\exp(\beta\lambda_i/2)}{2 \sinh(\beta\omega_i/2)} \quad (6.3)$$

Supongamos que quisieramos tratar al estado térmico del hamiltoniano (6.1) en la aproximación de campo medio *local*: en este caso, consiste en reemplazar b_i y b_i^\dagger en los términos de interacción por su valor esperado respecto del estado térmico asociado al “Hamiltoniano local”. Como el Hamiltoniano local preserva el número de bosones, naturalmente $\langle b_i \rangle_0 = \langle b_i^\dagger \rangle_0 = 0$ y por lo tanto, en este caso

$$H_{MF} = \sum_i \lambda_i b_i^\dagger b_i.$$

La función de partición en la Aproximación de campo medio (Mean Field Approximation) (MFA) será entonces

$$Z_{MF} = \prod_i \frac{\exp(\beta\lambda_i/2)}{2 \sinh(\beta\lambda_i/2)} \quad (6.4)$$

así, en este caso se cumple trivialmente la identidad exacta

$$Z = Z_{MF} \frac{Z}{Z_{MF}} = Z_{MF} \prod_i \frac{\sinh(\beta\lambda_i/2)}{\sinh(\beta\omega_i/2)}. \quad (6.5)$$

Evaluemos ahora, para este sistema, la traza del operador orden temporal que aparece en el integrando de la representación de Hubbard-Stratonovich (Ec. (3.4)), cuyo resultado general exacto es:

$$\text{tr} \left[\mathcal{T} \exp \left(- \int_0^\beta h(\tau) d\tau \right) \right] = \prod_i \sinh^{-1} \left(\frac{\beta\lambda_i}{2} \right) \prod_n e^{-\frac{1}{2} \tilde{\phi}^*(\omega_n) \mathcal{M}(\Lambda + i\omega_n)^{-1} \tilde{\phi}(\omega_n)}$$

donde $\tilde{\phi}(\omega_n)$ son los coeficientes de Fourier de $\phi(\tau)$ y $\omega_n = 2\pi n/\beta$ las frecuencias de Matsubara. Naturalmente, la expresión exacta es idéntica al desarrollo a segundo orden en

los campos. Como podemos factorizar la dependencia en los coeficientes dinámicos, podemos identificar la matriz de curvatura $R_{\mu i}^{vj}(\phi_0, \varpi)$ en la Ec. (4.8) con la matriz de curvatura exacta:

$$R_{\mu i}^{vj}(\phi_0, \varpi) = \mathcal{M}(\Lambda + \varpi)^{-1} \quad (6.6)$$

$$\tilde{R}_{\mu i}^{vj} = \mathcal{M}\Lambda^{-1} \quad (6.7)$$

Luego, ω_α son los autovalores de $\mathcal{M}\mathcal{H}$, con \mathcal{H} la matriz de coeficientes de la forma cuadrática bosónica

$$\mathcal{M}\mathcal{H} = \mathcal{M}(\Lambda - V) . \quad (6.8)$$

siendo

$$V = \begin{pmatrix} \Delta^+ & \Delta^- \\ \Delta^{-*} & \Delta^{+*} \end{pmatrix}$$

coincidiendo con (6.2). De esta manera, las energías RPA son las energías de excitación *exactas* del sistema, y por lo tanto la integral funcional exacta conduce naturalmente al resultado (6.5).

Consideremos ahora un sistema general con observables locales $Q_{\mu i}$ y un Hamiltoniano $H = H_{local} + V$. Suponiendo que para una cierta temperatura β el sistema presente una única solución bien definida de las ecuaciones de campo medio, consideremos la bosonización aproximada

$$\begin{aligned} Q_{\mu i} \rightarrow & \langle Q_{\mu i} \rangle_{MFA} - \sum_{k_i \neq k'_i} \langle k_i | Q_{\mu i} | k_i \rangle \mathcal{M}_{kk'i} \langle B_{kk'i}^\dagger B_{kk'i} \rangle_{\rho_{bos}} + \\ & + \sum_{k \neq k'} \langle k'_i | Q_{\mu i} | k_i \rangle \left((\mathcal{M}P)_{kk'i}^{1/2} \frac{(1 - \mathcal{M})_{kk'i}}{2} B_{kk'i} + (\mathcal{M}P)_{kk'i}^{1/2} \frac{(1 + \mathcal{M})_{kk'i}}{2} B_{kk'i}^\dagger \right) + \\ & + \sum_{k_i \neq k'_i} \langle k_i | Q_{\mu i} | k_i \rangle \mathcal{M}_{kk'i} B_{kk'i}^\dagger B_{kk'i} \quad \text{con} \end{aligned} \quad (6.9a)$$

$$\rho_{bos} = \frac{\exp(-\beta \tilde{h}_i)}{\text{tr} [\exp(-\beta \tilde{h}_i)]} \quad (6.9b)$$

donde $B_{kk'i} \equiv B_{k'ki}$, $|k\rangle$ es una base ortonormal de autoestados del Hamiltoniano local h y \tilde{h}_i es el Hamiltoniano bosonizado

$$\tilde{h}_i = \langle h_i \rangle_{MFA} + \sum_{k \neq k'} \Lambda_{kk'} B_{kk'i}^\dagger B_{kk'i} \quad (6.10)$$

$$= \langle h_i \rangle_{MFA} + \sum_{k_i \neq k'_i} \epsilon_{kk'i} \mathcal{M}_{kk'i} B_{kk'i}^\dagger B_{kk'i} \leftrightarrow h_i + \langle \tilde{h} \rangle_{\rho_{bos}} . \quad (6.11)$$

Si reemplazamos (6.9) en el Hamiltoniano del sistema y desarrollamos a segundo orden, obtendremos un hamiltoniano bosónico cuadrático, cuya función de partición asociada coincidirá con la función de partición del sistema original en la RPA.

Esta bosonización aproximada tiene sentido sólo sobre estados para los que las ocupaciones medias de estos modos bosónicos sean pequeñas. El estado fundamental de un sistema de este tipo, cuando sus partes interactúan débilmente entre si satisface esta condición. Además este estado es un estado Gaussiano, por lo que todas las correlaciones bosónicas pueden ser expresadas en términos de correlaciones de pares. De esta manera, donde la aproximación es aplicable, los observables y correlaciones del sistema original pueden expresarse en términos de esas correlaciones bosónicas. La evaluación de estas cantidades por medio de la derivación respecto de los acoplamientos diferirá sólo en términos relacionados con el cambio en los parámetros de la bosonización, y tienen en cuenta de alguna manera efectos de orden más alto en las correlaciones. Estas correcciones, importantes para subsistemas pequeños, o en el entorno de los puntos críticos del sistema, pueden despreciarse en general en la descripción de subsistemas relativamente grandes.

Reducción del sistema bosónico para el caso de espectro lineal

En muchos casos, de la enorme cantidad de excitaciones locales posibles del sistema, la mayoría se encuentran desacopladas. Tal vez el caso más evidente surge cuando aplicamos este esquema de “bosonización” a un verdadero sistema bosónico. Por cada bosón b_i del sistema original, el sistema bosonizado presenta un número infinito de bosones $b_{i n n'}$, asociados a las excitaciones $|n\rangle \rightarrow |n'\rangle$. Como el hamiltoniano es cuadrático en los operadores b_i y b_i^\dagger , basta con implementar la bosonización (6.9a) de estos operadores:

$$b_i \rightarrow \sum_n \sqrt{n+1} \sqrt{p_{i n, n+1}} B_{i n n+1}$$

Por medio de una transformación canónica, es posible transformar los operadores $B_{i n n'}$ a unos nuevos operadores $\tilde{B}_{i\alpha}$, de manera que uno de ellos sea de la forma

$$\tilde{B}_{i0} = \frac{\sum_n \sqrt{n+1} \sqrt{p_{i n, n+1}} B_{i n n+1}}{\sqrt{\sum_n (n+1) p_{i n, n+1}}}.$$

Como son bosones cuyo hamiltoniano local es cuadrático,

$$p_{i n, n+1} = p_n (1 - \exp(-\beta \lambda_i))^2.$$

Como $\sum_n p_{i n, n+1} = 1$ podemos entonces reescribir el nuevo bosón como

$$\tilde{B}_{i0} = \sum_n \sqrt{n+1} \sqrt{p_{i n}} B_{i n n+1},$$

de manera que la “bosonización” RPA es consistente con $b_i \rightarrow \tilde{B}_{i0}$, $b_i^\dagger b_i \rightarrow \tilde{B}_{i0}^\dagger \tilde{B}_{i0}$, mientras que el resto de los $\tilde{B}_{i\alpha}$ permanecerán desacoplados del Hamiltoniano y de cualquier observable del sistema original y así, el resultado RPA coincide con el resultado exacto.

Mapeo local de entre los estados del sistema y los estados bosónicos

Para realizar el mapeo entre los estados, vamos primero a analizar la representación de un proyector cualquiera ¹

$$|k\rangle\langle k| \rightarrow p_k - \sum_{k' \neq k} \mathcal{M}_{kk'} \langle B_{kk'}^\dagger B_{kk'} \rangle_{\rho_{bos}} + \sum_{k \neq k'} \mathcal{M}_{kk'} B_{kk'}^\dagger B_{kk'} \quad (6.12)$$

A temperatura cero esta expresión Ec. (6.12) se reduce a

$$|k\rangle\langle k| \rightarrow \sum_{k' \neq k} \mathcal{M}_{kk'} B_{kk'}^\dagger B_{kk'} \quad k \neq 0. \quad (6.13)$$

$$|0\rangle\langle 0| \rightarrow \mathbf{1} - \sum_{k \neq 0} \sum_{k' \neq 0} \mathcal{M}_{kk'} B_{kk'}^\dagger B_{kk'} \quad (6.14)$$

Es posible ver que estos objetos son proyectores ortogonales si nos restringimos al espacio de estados generado por el vacío bosónico $|0\rangle$ y aquellos de la forma $B_{0k}^\dagger |0\rangle$. En este régimen los operadores $|k\rangle\langle k'|$ se anulan a menos que k o k' sean cero, por la presencia del factor $P_{kk'}$. Así conseguimos dos cosas: por un lado, garantizar que el mapeo de estados no se arruine en el sistema interactuante, y por otro, desacoplar la mayoría de los modos bosónicos. A temperatura cero, el esquema de bosonización "RPA" se reduce a

$$\begin{aligned} Q_\mu &\rightarrow \langle Q_\mu \rangle_{MFA} + \\ &+ \sum_{k \neq 0} (\langle 0|Q_\mu|k\rangle B_{0k} + \langle k|Q_\mu|0\rangle B_{0k}^\dagger) + \\ &+ \sum_{k \neq 0} \langle k|Q_\mu|k\rangle B_{k0}^\dagger B_{k0} \end{aligned} \quad (6.15)$$

y h_{bos} a

$$\tilde{h} = \langle h \rangle_{MFA} + \sum_{k \neq 0} \Lambda_{k0} B_{k0}^\dagger B_{k0} \quad (6.16)$$

$$= \langle h \rangle_{MFA} + \sum_{k \neq 0} \epsilon_k B_{k0}^\dagger B_{k0} \leftrightarrow h. \quad (6.17)$$

Cabe destacar que en el Hamiltoniano bosonizado a temperatura cero se cancelarán todos los términos lineales en los operadores bosónicos $B_{kk'i} B_{kk'i}^\dagger$, provenientes de los productos de operadores asociados a distintos sitios con valores esperados no nulos. Esto es así ya que si el estado de campo medio es estable, el Hamiltoniano exacto H del sistema original no puede conectar el estado fundamental del Hamiltoniano de campo medio H_{MF}

$$|0\rangle = |0_1\rangle \otimes \dots \otimes |0_i\rangle \otimes \dots \otimes |0_N\rangle$$

con un estado

$$|\beta, i\rangle = |0_1\rangle \otimes \dots \otimes |\beta_i\rangle \otimes \dots \otimes |0_N\rangle$$

dado que si lo hiciera, sería posible elegir un nuevo estado de campo medio con una energía menor, por medio de cierta transformación lineal unitaria *local* sobre H_{MF} .

¹ Omitiremos en la discusión siguiente el índice de sitio, sobre entendiéndose que todos los observables se tratan de algún sitio dado.

6.0.1 Bosonización y entrelazamiento

En general, toda bosonización (exacta) de un sistema \mathcal{S} puede pensarse como un proceso de simulación cuántica del sistema \mathcal{S} sobre un cierto subespacio de estados de un sistema de bosones, que llamaremos “subespacio dinámico”. Llamaremos al espacio completo del sistema bosónico el “espacio cinemático” correspondiente. La bosonización puede implementarse por medio de una transformación unitaria de la forma

$$U = (\mathbf{1}_S \otimes P_{din})(W)(\mathbf{1}_S \otimes P_{din}) + (\mathbf{1}_S \otimes (\mathbf{1}_{bos} - P_{din})) \quad (6.18)$$

donde W y P_{din} se elegirán adecuadamente para garantizar la unitariedad de U . Si elegimos $W = \otimes_W^{(i)}$ y $P_{din} = \otimes_i P_{din}^{(i)}$, U será un producto directo de operaciones unitarias locales, y por lo tanto, el entrelazamiento entre dos subsistemas \mathcal{B} y \mathcal{C} del estado $|\alpha\rangle_S \otimes |0\rangle_{bos}$ será igual al del estado $|0\rangle_S \otimes |\alpha'\rangle_{bos} = U|\alpha\rangle_S \otimes |0\rangle_{bos}$ respecto de los correspondientes subsistemas y viceversa. En el caso de la bosonización derivada de la Ec. (6.15) se puede implementar como

$$W_i = |0_i\rangle\langle 0_i| \otimes |0_i\rangle\langle 0_i| + \sum_{k_i \neq 0_i} |0_i\rangle\langle k_i| \otimes B_{k_i}^\dagger + |k_i\rangle\langle 0_i| \otimes B_{k_i} + (\mathbf{1}_S^{(i)} - |0_i\rangle\langle 0_i|_S) \otimes (\mathbf{1}_{bos}^{(i)} - |0_i\rangle\langle 0_i|_{bos}) \quad (6.19)$$

$$P_{din}^i = \frac{\prod_{k_i} (\sin(\pi B_{k_i}^\dagger B_{k_i}) / (\pi B_{k_i}^\dagger B_{k_i}))}{1 - \sum_{k_i} B_{k_i}^\dagger B_{k_i}} \quad (6.20)$$

de forma que el subespacio dinámico se compone de los estados con a lo sumo un bosón en el espacio cinemático. A partir de este mapeo, podemos reconstruir un mapeo de operadores exacto, así como un Hamiltoniano bosonizado exacto

$$H = H_S \otimes |0\rangle\langle 0|_{bos} \rightarrow H^{bos} = UHU^\dagger = |0\rangle\langle 0|_S \otimes H^{bos}. \quad (6.21)$$

Naturalmente, resolver el problema con el Hamiltoniano bosonizado exacto es tan difícil como resolver el problema original; sin embargo, la aproximación a segundo orden del Hamiltoniano bosonizado sí es soluble exactamente y, como se discutió en el Cap. 2, también se conocen expresiones exactas para las negatividades entre cualquier par de subsistemas.

A bajas temperaturas, y si el entrelazamiento de un sitio con el resto no es demasiado grande, podemos obviar los proyectores P_{din} , asumiendo que el estado de equilibrio ρ prácticamente no tiene soporte fuera del espacio dinámico. Para volver al sistema \mathcal{S} deberemos primero proyectar nuevamente al espacio dinámico. Por este procedimiento, (resolver el hamiltoniano bosónico en la aproximación cuadrática, proyectar y volver al sistema original vía la conjugación con U^\dagger), obtenemos una aproximación al estado fundamental del sistema de espines. Los observables de entrelazamiento entre dos subsistemas del sistema bosónico serán entonces una cota superior al entrelazamiento entre los correspondientes subsistemas en el estado de espín aproximado.

En el capítulo siguiente aplicaremos estas ideas al caso de las redes de espines a temperatura cero.

7

BOSONIZACIÓN RPA EN REDES DE ESPINES

En el capítulo anterior se discutió cómo la aproximación RPA implica, a temperatura cero, una bosonización aproximada de los observables. Veremos ahora que en el caso de sistemas de espines a temperatura cero, este esquema es especialmente simple, implicando un único álgebra bosónico por cada uno de los espines del sistema. Mediante esta bosonización, estudiaremos algunos aspectos del entrelazamiento global y entre diferentes subsistemas en las redes de espines que comenzamos a estudiar en el Cap. 5.

Vamos a considerar entonces una red general de espines $\mathbf{S}_i = (s_{ix}, s_{iy}, s_{iz})$, con acoplamientos cuadráticos, pero sin auto interacciones, inmersa en un campo magnético, no necesariamente uniforme. El Hamiltoniano de esta clase de sistemas es de la forma¹

$$H = \sum_{i,\mu} B^{i\mu} s_{i\mu} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j, \mu, \nu} J^{i\mu j\nu} s_{i\mu} s_{j\nu}, \quad (7.1)$$

donde $\mu = x, y, z$ y $B^{i\mu}$ son las componentes del campo en el sitio i -ésimo. Las cadenas de Ising, XY, XYZ ($J^{i\mu j\nu} = \mathbf{1}^{\mu\nu} J_\mu^{ij}$) así como aquellas con acoplamientos tipo Dzyaloshinskii-Moriya ($J^{i\mu, j\nu} = -J^{i\nu, j\mu}$) de rango arbitrario son casos particulares de la Ec. (7.1). Siguiendo el esquema desarrollado en el capítulo anterior, el primer paso para construir la bosonización aproximada de RPA es determinar el estado fundamental en la aproximación de campo medio, esto es, un estado separable

$$|0\rangle \equiv \otimes_{i=1}^N |0_i\rangle = |0_1 \dots 0_N\rangle$$

con energía mínima $\langle H \rangle_0 = \langle 0|H|0\rangle$, dada por

$$\langle H \rangle_0 = \sum_{i,\mu} B^{i\mu} \langle s_{i\mu} \rangle_0 - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j, \mu, \nu} J^{i\mu j\nu} \langle s_{i\mu} \rangle_0 \langle s_{j\nu} \rangle_0 \quad (7.2)$$

donde $\langle s_i \rangle_0 = \langle 0_i | s_i | 0_i \rangle$. Cada estado local $|0_i\rangle$ puede ser determinado autoconsistentemente como el estado de menor energía de los Hamiltonianos locales

$$h_i = \sum_{\mu} \frac{\partial \langle H \rangle_0}{\partial \langle s_{i\mu} \rangle_0} s_{i\mu} = \boldsymbol{\lambda}^i \cdot \mathbf{s}_i, \quad (7.3)$$

siendo el estado de máximo espín s_i dirigido a lo largo de $-\boldsymbol{\lambda}^i$ (un estado coherente). Esto lleva a las ecuaciones autoconsistentes

$$\lambda^{i\mu} = B^{i\mu} - \sum_{j \neq i, \nu} J^{i\mu j\nu} \langle s_{j\nu} \rangle_0, \quad \langle s_i \rangle_0 = -s_i \boldsymbol{\lambda}^i / \lambda^i, \quad (7.4)$$

¹ En este capítulo y en el siguiente elegiremos un sistema de unidades para el que $\hbar = 1$, de manera de simplificar las expresiones. Los operadores $s_{i\mu} = \hbar^{-1} S_{i\mu}$ se introducen para tener en cuenta el correspondiente reescaleo.

donde $\lambda^i = |\boldsymbol{\lambda}^i|$. La Ec. (7.4) puede resolverse iterativamente comenzando de un estado inicial de prueba, así como por cualquiera de los métodos mencionados en la sección B.2.1.

Ya que la forma (7.1) es válida para cualquier elección de los ejes locales, es conveniente elegir el eje z_i a lo largo de la dirección $\boldsymbol{\lambda}^i$, de manera que $\langle s_{i\mu} \rangle_0 = -s_i \mathbf{1}_\mu^z$ y $\lambda^{i\mu} = \lambda^i \mathbf{1}_z^\mu$, con $\lambda^i > 0$. El segundo paso en RPA consiste en la bosonización aproximada

$$s_{i+} \rightarrow \sqrt{2s_i} b_i^\dagger, \quad s_{i-} \rightarrow \sqrt{2s_i} b_i, \quad s_{iz} \rightarrow -s_i + b_i^\dagger b_i, \quad (7.5)$$

donde $s_{i\pm} = s_{ix} \pm i s_{iy}$ y b_i, b_i^\dagger son considerados operadores bosónicos estándar ($[b_i, b_j^\dagger] = \mathbf{1}_{ij}$, $[b_i, b_j] = [b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0$), con $|0\rangle \rightarrow |0_b\rangle$ su vacío.

Esta bosonización preserva dos de las relaciones de conmutación de $SU(2)$ en forma exacta ($[s_i^z, s_j^\pm] = \pm \mathbf{1}_{ij} s_i^\pm$), preservando la restante en promedio sobre el vacío ($\langle [s_i^-, s_j^+] \rangle_0 = 2s_i \mathbf{1}_{ij}$). Esta aproximación coincide con la aproximación de Holstein-Primakoff así como con otras bosonizaciones exactas [48, 72–74] a orden cero en s_i^{-1} . Si se rempazan los operadores de espín por los operadores bosonizados según las Ecs. (7.5) en el Hamiltoniano original (7.1), despreciando todos los términos de orden cúbico y cuártico en b_i, b_i^\dagger obtenemos el Hamiltoniano bosónico cuadrático

$$\begin{aligned} H^b &= \langle H \rangle_0 + \sum_i \lambda^i b_i^\dagger b_i - \sum_{i \neq j} \Delta_+^{ij} b_i^\dagger b_j + \frac{1}{2} (\Delta_-^{ij} b_i^\dagger b_j^\dagger + h.c.) \\ &= \langle H \rangle_0 - \frac{1}{2} \sum_i \lambda^i + \frac{1}{2} \mathcal{Z}^\dagger \mathcal{H} \mathcal{Z}, \end{aligned} \quad (7.6)$$

$$\mathcal{Z} = \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H} = \begin{pmatrix} \Lambda - \Delta_+ & -\Delta_- \\ -\bar{\Delta}_- & \Lambda - \bar{\Delta}_+ \end{pmatrix}, \quad (7.7)$$

$$\Delta_\pm^{ij} = \frac{1}{2} \sqrt{s_i s_j} [J^{ix} jx \pm J^{iy} jy - i(J^{iy} jx \mp J^{ix} jy)], \quad (7.8)$$

donde $\mathcal{Z}^\dagger = (b^\dagger, b)$ y $\Lambda^{ij} = \lambda^i \mathbf{1}^{ij}$. La elección del eje de campo medio para la bosonización (7.5) asegura que ningún término lineal en b_i, b_i^\dagger aparezca en H^b , reflejando la estabilidad del estado de campo medio $|0\rangle$ con respecto a las excitaciones locales. Este Hamiltoniano puede ser diagonalizado exactamente, como se discutió en el apartado 2.5. La matriz $\mathcal{M}\mathcal{H}$, que define la bosonización RPA, es de dimensión $2N \times 2N$, con N el número de espines. RPA implica entonces una reducción exponencial en la dimensión del problema (de $(2s+1)^N$ a $2N$ para N espines idénticos). Más aún, en sistemas invariantes ante translaciones (Ec. (7.2)), puede ser aún reducido a N 2×2 matrices, consiguiéndose de este modo un tratamiento *completamente analítico*.

7.1 El estado fundamental RPA

Como vimos antes, el vacío de los nuevos bosones b' será $(b'_\alpha | 0'_b) = 0$

$$|0'_b\rangle = C_b \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{i,j} Z^{ij} b_i^\dagger b_j^\dagger\right] |0_b\rangle, \quad Z = V\bar{U}^{-1}, \quad (7.9)$$

(Ec. (2.56)) El estado de espín asociado a RPA puede definirse como

$$|0_{\text{RPA}}\rangle = C_s \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{Z^{ij}}{2\sqrt{s_i s_j}} s_{i+s_{j+}}\right] |0\rangle. \quad (7.10)$$

Los valores medios obtenidos a partir del estado (7.10) serán aproximadamente los mismos que los que se obtienen por medio del mapeo (7.5), coincidiendo exactamente hasta segundo orden en V (ver Sec. 7.2). En contraste con $|0\rangle$, el estado (7.10) es *entrelazado* (a menos que $V \neq 0$).

Notemos que para el Hamiltoniano cuadrático (7.1):

1. $|0_{\text{RPA}}\rangle = |0\rangle$ si y sólo si $|0\rangle$ es un auto-estado exacto de H , ya que H^b contiene los elementos de matriz *exactos* conectando $|0\rangle$ con el resto del espacio de Hilbert:

$$H|0\rangle = \langle H \rangle_0 |0\rangle - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Delta_-^{ij} |1_i 1_j\rangle, \quad (7.11)$$

donde $|1_i 1_j\rangle = \frac{s_i + s_{j+}}{2\sqrt{s_i s_j}} |0\rangle$, usando la condición de campo medio $\langle 1_i | H | 0 \rangle = \langle 1_i | h_i | 0_i \rangle = 0$ (5.3). Así, si $|0_{\text{RPA}}\rangle = |0\rangle$, $Z = 0$ y por lo tanto $V = 0$ en \mathcal{W} , implicando $\Delta_- = 0$. $|0\rangle$ es entonces un auto-estado exacto por la Ec. (7.11). Por el contrario, si $|0\rangle$ es un auto-estado exacto, es una solución de la ecuación de campo medio, obteniéndose $\Delta_- = 0$, lo que implica que $|0_{\text{RPA}}\rangle = |0\rangle$ (aunque Δ_+ puede ser no nulo y $\omega^\alpha \neq \lambda^\alpha$). En particular, cuando H tiene un estado fundamental exacto separable $|0\rangle$ (esto es, en el campo factorizante [7, 28, 75]), $|0_{\text{RPA}}\rangle = |0\rangle$.

2. $|0_{\text{RPA}}\rangle$ es siempre exacto para campos suficientemente grandes ($|\mathbf{B}| \gg J$). En este límite $|0\rangle$ es el estado con todos los espines s_i completamente alineados a lo largo de $-\mathbf{B}^i$ a menos de correcciones pequeñas ($\lambda^i \approx \mathbf{B}^i + sJ \cdot \mathbf{B}^i / |\mathbf{B}|^i$). Hasta primer orden en Δ_\pm / λ , las Ecs. (2.53)–(7.9) llevan entonces a $Z^{ij} \approx V_{ij} \approx \frac{\Delta_-^{ij}}{\lambda_i + \lambda_j}$, lo que implica

$$|0_{\text{RPA}}\rangle \approx |0\rangle + \sum_{i < j} \frac{\Delta_-^{ij}}{\lambda_i + \lambda_j} |1_i 1_j\rangle, \quad (7.12)$$

lo cual, por la Ec. (7.11), es precisamente la expansión a primer orden (en Δ_- / Λ) del estado fundamental exacto.

En el caso de estados de campo medio con simetría rota, el estado de espín RPA permite implementar las rotaciones necesarias para la restauración de la simetría: El estado fundamental exacto será en realidad muy cercano a la superposición de estados $|RPA\rangle$:

$$|GS\rangle \approx |RPA^{(RS)}\rangle = \sum_g R_g |RPA\rangle \quad (7.13)$$

donde s son los elementos del grupo de simetría S roto por la solución de campo medio y R la representación de S sobre el espacio de estados del sistema, elegida de forma de minimizar el valor medio de $\langle RPA^{(RS)} | H | RPA^{(RS)} \rangle$. La restauración de simetría *incrementa considerablemente la capacidad de RPA para aproximar fielmente al estado fundamental*.

Evaluación bosónica de la negatividad y entropía de subsistemas

La evaluación directa de las correlaciones de muchos cuerpos y de medidas de entrelazamiento a partir del estado RPA de espín (7.10) es en general una difícil tarea. Sin embargo, los valores de esas cantidades en el vacío bosónico asociado (7.9), que serán aproximadamente los mismos que aquellos obtenidos de (7.10), puede ser directamente evaluado usando el formalismo general de estados Gaussianos, discutido en la Sec. 2.5.

Por tratarse de un estado Gaussiano, el estado fundamental del Hamiltoniano bosonizado (7.6) junto con las Ecs. (7.5), determinan las correlaciones y los valores medios de espín básicos en la aproximación RPA a partir de las correlaciones bosónicas $F_{ij} = \langle a_i^\dagger a_j \rangle$ y $G_{ij} = \langle a_i a_j \rangle$, esto es, $\langle s_{i\mu} \rangle_{0'} = \mathbf{1}_{\mu z} (F_{ii} - s_i)$ y, para $i \neq j$,

$$\langle s_{i+} s_{j-} \rangle_{0'} = 2\sqrt{s_i s_j} F_{ji}, \quad \langle s_{i-} s_{j-} \rangle_{0'} = 2\sqrt{s_i s_j} G_{ji}, \quad (7.14)$$

con $\langle s_{i\pm} s_{jz} \rangle_{0'} = 0$, lo cual coincide exactamente con los promedios derivados de (7.10) hasta segundo orden en V , esto es, primer orden en la ocupación media VV^\dagger (normalmente muy pequeña fuera de las regiones críticas). Mediante el uso del teorema de Wick, obtenemos también $\langle s_{iz} s_{jz} \rangle_{0'} = \langle s_{iz} \rangle_{0'} \langle s_{jz} \rangle_{0'} + |F_{ij}|^2 + |G_{ij}|^2$ para $i \neq j$. A partir de estas estimaciones, podemos reconstruir el estado correspondiente a los subsistemas del sistema de espines. Veamos ahora una forma más directa de hacer lo mismo.

7.2 Matrices densidad de espín en la aproximación RPA

A primer orden en las ocupaciones medias VV^\dagger (o a segundo orden en V , aplicable cuando la ocupación media por sitio es menor que 1) podemos expresar la matriz densidad de espines correspondiente al estado RPA de espín (7.10) en términos de las contracciones (2.57). A este orden, $F \approx GG^\dagger$ (Ecs. (2.57)) y el soporte de $\rho = |0_{\text{RPA}}\rangle\langle 0_{\text{RPA}}|$ se reduce al subespacio generado por el estado de campo medio $|0\rangle$ y los estados de dos excitaciones $|1_i 1_j\rangle$ (Ec. (7.11)), que lleva a

$$\rho \approx \begin{pmatrix} GG^\dagger & G \\ G^\dagger & 1 - G^\dagger G \end{pmatrix} \quad (7.15)$$

donde G denota una matriz columna de elementos G_{ij} , para $i < j$. A este orden, $\rho^2 = \rho$. La correspondiente matriz densidad reducida $\rho_{\mathcal{A}} = \text{tr}_{\bar{\mathcal{A}}}[\rho]$ de un subsistema \mathcal{A} de L espines viene dada por

$$\rho_{\mathcal{A}} \approx \begin{pmatrix} G_{\mathcal{A}} G_{\mathcal{A}}^\dagger & 0 & G_{\mathcal{A}} \\ 0 & F_{\mathcal{A}} - G_{\mathcal{A}} G_{\mathcal{A}}^\dagger & 0 \\ G_{\mathcal{A}}^\dagger & 0 & 1 - \text{tr}[F_{\mathcal{A}}] + G_{\mathcal{A}}^\dagger G_{\mathcal{A}} \end{pmatrix} \quad (7.16)$$

donde $F_{\mathcal{A}}, G_{\mathcal{A}}$ son matrices de contracciones del subsistema \mathcal{A} y $G_{\mathcal{A}}$, de $L \times L$ componentes. El vector columna concomitante (de longitud $L(L-1)/2$). El bloque central contiene los elementos de matriz entre estados con excitación $|1_i\rangle\langle 1_j|$ que surgen de la traza parcial de

GG^\dagger . Esta identidad se obtiene haciendo uso de la identidad aproximada $\sum_{k \in \bar{A}} G_{ik} G_{kj}^\dagger \approx F_{ij} - \sum_{k \in A} G_{ik}^\dagger G_{jk}$ para $i, j \in A$ (y despreciando los elementos diagonales de G_{ii} , de orden más alto debido a la ausencia de términos de auto-interacción en el Hamiltoniano), los cuales permiten escribir $\rho_{\mathcal{A}}$ completamente en términos de las contracciones locales. La Ec. (7.16) se encuentra entonces en acuerdo con la tomografía directa del estado a este orden (para $i, j, k, l \in A$, $\langle b_j^\dagger b_i \prod_{k \neq i, j} (1 - b_k^\dagger b_k) \rangle_{0'} \approx (F_{\mathcal{A}} - G_{\mathcal{A}} G_{\mathcal{A}}^\dagger)_{ij}$, $\langle b_i^\dagger b_j^\dagger b_k b_l \rangle_{0'} \approx G_{kl} \bar{G}_{ij}$). Hasta orden $\mathcal{O}(V^2)$, $\rho_{\mathcal{A}}$ es una matriz semi definida positiva con $\text{tr}[\rho_{\mathcal{A}}] = 1$, pero que ahora ya no corresponde a un estado puro.

Su entropía $S(\rho_{\mathcal{A}}) = -\text{tr}[\rho_{\mathcal{A}} \log_2 \rho_{\mathcal{A}}]$ es determinada, a este orden, por el bloque central $\rho_{\mathcal{A}}^1 = F_{\mathcal{A}} - G_{\mathcal{A}} G_{\mathcal{A}}^\dagger$,

$$S(\rho_{\mathcal{A}}) \approx \text{tr} \left[\rho_{\mathcal{A}}^1 (\log_2 e - \log_2 \rho_{\mathcal{A}}^1) \right], \quad (7.17)$$

que coincide con la Ec. (2.61) hasta segundo orden en V (a este orden $f_{\mathcal{A}}^\alpha$ coincide con los autovalores de $\rho_{\mathcal{A}}^1$ y la Ec. (2.61) lleva a $\approx \sum_\alpha f_{\mathcal{A}}^\alpha (\log_2 e - \log_2 f_{\mathcal{A}}^\alpha)$).

Por otro lado, el término principal en la negatividad que surge de la bipartición $(\mathcal{B}, \mathcal{C})$ de \mathcal{A} es de primer orden en V y es simplemente la suma de los valores singulares de la submatriz $G_{\mathcal{B}, \mathcal{C}}$ (de elementos G_{ij} , $i \in \mathcal{B}$, $j \in \mathcal{C}$), donde $\mathcal{N}_{\mathcal{B}, \mathcal{C}} \approx \text{tr}[G_{\mathcal{B}, \mathcal{C}} G_{\mathcal{B}, \mathcal{C}}^\dagger]^{1/2}$. A este orden, los autovalores simplécticos negativos $\tilde{f}_{\mathcal{A}}^\alpha$ en (2.65) son nuevamente los valores singulares de $G_{\mathcal{B}, \mathcal{C}}$ (con signo negativo), mientras que la Ec. (2.64) se reduce a $\mathcal{N}_{\mathcal{B}, \mathcal{C}} \approx -\sum_\alpha \tilde{f}_{\mathcal{A}}^\alpha$, llevando nuevamente al resultado previo.

Finalmente notemos que la Ec. (7.16) siempre conmuta con la paridad S_z (respecto del eje de campo medio) del subsistema \mathcal{A} , esto es, $[\rho_{\mathcal{A}}, P_{z\mathcal{A}}] = 0$, $P_{z\mathcal{A}} = \exp[i\pi \sum_{i \in \mathcal{A}} (s_{iz} - s_i)]$. En el caso de dos espines i, j , $G_{\mathcal{A}}$ tiene longitud 1 y la Ec. (7.16) es sólo una matriz de bloques de 4×4 , mientras que en el caso de un único espín i , $G_{\mathcal{A}}$ tiene longitud 0 y la Ec. (7.16) se vuelve simplemente $\rho_i \approx F_{ii} |1_i\rangle \langle 1_i| + (1 - F_{ii}) |0_i\rangle \langle 0_i|$.

Sistemas con invarianza translacional

Las únicas cantidades requeridas en el esquema de evaluación bosónica RPA son, de esta manera, las contracciones básicas (2.57). Su evaluación se vuelve particularmente simple en sistemas con invarianza translacional, tanto en 1 o d dimensiones, esto es, sistemas con un espín común $s_i = s$ en un campo uniforme $B^i = B$ con acoplamientos dependientes sólo de la separación entre los sitios:

$$J^{i\mu j\nu} = J^{\mu\nu}(i - j) \quad (7.18)$$

donde $J^{\mu\nu}(l) = J^{\nu\mu}(-l)$, y $J^{\mu\nu}(-l) = J^{\mu\nu}(n - l)$ en una cadena cíclica finita (o en d dimensiones, i, j, l, n representando vectores d -dimensionales). Vamos también a asumir un campo medio uniforme $\lambda^i = \lambda$, que entonces deberá satisfacer

$$\lambda^\mu = B^\mu - \sum_\nu J_0^{\mu\nu} \langle s_\nu \rangle_0, \quad J_0^{\mu\nu} \equiv \sum_l J^{\mu\nu}(l), \quad (7.19)$$

con $\langle s \rangle_0 = -s\lambda/\lambda$ (Ec. (5.3)). De esta manera el campo medio uniforme es determinado de esta manera sólo por el "acoplamiento total" $J_0^{\mu\nu}$.

Eligiendo nuevamente el eje z en la dirección de λ , de forma que $\langle s_{i\mu} \rangle = -s\mathbf{1}_\mu^z$ y $B^\mu + sJ_0^{\mu z} = \lambda\mathbf{1}^{\mu z}$, con $\lambda > 0$, el Hamiltoniano bosonizado tendrá ahora la forma (7.6) con acoplamientos $\Delta_{\pm}^{ij} = \Delta_{\pm}(i-j)$. Por medio de una transformada de Fourier discreta de los operadores bosónicos, podemos reescribirlo como

$$H_b = \langle H \rangle_0 + \sum_k (\lambda - \Delta_+^k) b_k^\dagger b_k - \frac{1}{2} (\Delta_-^k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + h.c.) \quad (7.20)$$

$$\Delta_{\pm}^k = \sum_{l=0}^{N-1} e^{i2\pi kl/N} \Delta_{\pm}(l), \quad (7.21)$$

donde $k = 0, \dots, N-1$ y $b_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{i2\pi kj/N} b_j$ son operadores bosónicos en el espacio de momentos, con $b_{-k} = b_{N-k}$. La diagonalización de (7.20) es directa y lleva a

$$H^b = \langle H \rangle_0 + \sum_k \omega^k b_k'^\dagger b_k' + \frac{1}{2} (\omega^k - \lambda + \Delta_+^k), \quad (7.22)$$

donde $\omega^k = \tilde{\omega}^k - \frac{1}{2} (\Delta_+^k - \Delta_+^{-k})$, $b_k'^\dagger = u_k b_k^\dagger + \bar{v}_k b_{-k}$ y

$$\tilde{\omega}^k = \sqrt{(\lambda - \tilde{\Delta}_+^k)^2 - |\Delta_-^k|^2}, \quad (7.23)$$

$$u_k = \sqrt{\frac{\lambda - \tilde{\Delta}_+^k + \tilde{\omega}_k}{2\tilde{\omega}^k}}, \quad v_k = \frac{\Delta_-^k}{|\Delta_-^k|} \sqrt{\frac{\lambda - \tilde{\Delta}_+^k - \tilde{\omega}_k}{2\tilde{\omega}^k}}, \quad (7.24)$$

con $\tilde{\Delta}_+^k = \frac{1}{2} (\Delta_+^k + \Delta_+^{-k})$, $u_k^2 - |v_k|^2 = 1$, y $u_k = u_{-k}$, $v_k = v_{-k}$. Todas las ω^k serán reales y positivas para un campo medio estable, implicando las condiciones de estabilidad

$$|\Delta_-^k| < \sqrt{(\lambda - \Delta_+^k)(\lambda - \Delta_+^{-k})}, \quad k = 0, \dots, N-1. \quad (7.25)$$

Podemos obtener ahora las contracciones básicas explícitamente,

$$\langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle_{0'} = \mathbf{1}_{kk'} |v_k^2|, \quad \langle b_k b_{-k'} \rangle_{0'} = \mathbf{1}_{kk'} u_k v_k = \frac{\Delta_-^k}{2\tilde{\omega}^k}, \quad (7.26)$$

lo que lleva finalmente a (Ec. (2.57))

$$F_{ij} = F(i-j) = \frac{1}{N} \sum_k e^{-i2\pi k(i-j)/N} |v_k^2|, \quad (7.27a)$$

$$G_{ij} = G(i-j) = \frac{1}{N} \sum_k e^{-i2\pi k(i-j)/N} u_k v_k. \quad (7.27b)$$

Para campos intensos $|B|$ tales que $\lambda \gg |\Delta_{\pm}|$, estas se reducen a $u_k v_k \approx \frac{1}{2} \Delta_-^k / \lambda$ y $|v_k^2| \approx \frac{1}{4} |\Delta_-^k|^2 / \lambda^2$. El vacío RPA (7.9) se vuelve así

$$|0_b'\rangle = C_b \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{i,j} Z(i-j) b_i^\dagger b_j^\dagger\right] |0_b\rangle, \quad (7.28)$$

donde $C_b = \prod_k u_k^{-1/2}$ y $Z(l) = \frac{1}{N} \sum_k e^{-i2\pi lk/N} \frac{v_k}{u_k}$.

De esta manera, estos sistemas admiten una evaluación analítica de sus contracciones (2.57). Tanto las ecuaciones de campo medio (7.19) como el Hamiltoniano RPA (7.20) se vuelven independientes del espín común s después de un reescalo $J^{\mu\nu}(l) \rightarrow J^{\mu\nu}(l)/s$, el cual vamos a adoptar en lo que sigue, lo que indica que RPA describe el límite de espín grande del sistema, como se muestra en Ec. (7.5).

Sistemas con interacciones XYZ

Examinemos con más detalle el formalismo previo en un sistema consistente de una red de espines $s_i = s$ invariante ante translaciones, con acoplamientos XYZ de rango arbitrario en un campo trasverso:

$$H = B \sum_i S_{iz} - \frac{1}{2\hbar s} \sum_{i \neq j} \sum_{\mu=x,y,z} J_\mu(i-j) S_{i\mu} S_{j\mu}. \quad (7.29)$$

La Ec. (7.29) conmuta con la paridad de espín S_z ,

$$[H, P_z] = 0, \quad P_z = \exp[i\pi \sum_i (S_{iz} - s)/\hbar],$$

para cualquier valor de sus parámetros, de forma que el estado fundamental exacto en una red finita tendrá siempre una paridad definida fuera de los puntos de degeneración. Vamos a enfocarnos en el caso ferromagnético, donde $J_x(l) \geq 0 \forall l$ con

$$|J_y(l)| \leq J_x(l), \quad (7.30)$$

el cual exhibe una fase normal y otra con simetría rota a nivel de campo medio.

RPA en torno a la solución normal

Para el Hamiltoniano (7.29), el estado $|0\rangle$ con todos los espines alineados a lo largo de la dirección $-z$ es siempre una solución de las ecuaciones de campo medio (7.19), siendo la solución de mínima energía para campos B suficientemente intensos. Esto lleva a que $\lambda^i = \lambda \mathbf{1}^{\mu z}$, con

$$\lambda = |B| + J_z^0 > 0, \quad J_z^0 \equiv \sum_l J_z(l). \quad (7.31)$$

Todas las ecuaciones previas pueden ser directamente aplicadas. Ahora $\Delta_\pm(l) = \frac{J_x(l) \pm J_y(l)}{2} = \Delta_\pm(-l)$, implicando $\Delta_\pm^k = \Delta_\pm^{-k}$ y

$$\omega^k = \sqrt{(\lambda - J_x^k)(\lambda - J_y^k)}, \quad (7.32)$$

donde $J_\mu^k = \sum_l e^{i2\pi kl/N} J_\mu(l)$ ($\Delta_\pm^k = \frac{J_x^k \pm J_y^k}{2}$). Esta solución es por lo tanto estable siempre que $J_\mu^k \leq \lambda \forall k$ y $\mu = x, y$, esto es, para $|B|$ por encima de cierto valor crítico del campo B_c . En el caso (7.30), la condición más fuerte es obtenida para $k = 0$, esto es,

$$|B| > B_c \equiv J_x^0 - J_z^0. \quad (7.33)$$

RPA en torno a la solución con simetría rota

Para $|B| \leq B_c$, el estado normal se vuelve inestable: La frecuencia RPA más baja, ω^0 , se anula para $|B| \rightarrow B_c$ y se vuelve imaginaria para $|B| < B_c$. El estado de campo medio con energía más baja para $|B| < B_c$ corresponde ahora a un estado con simetría de paridad rota, con todos los espines alineados a lo largo de un eje en el plano xz , formando un ángulo θ con el eje z original:

$$|0\rangle \rightarrow |\Theta\rangle \equiv |\theta_1 \dots \theta_N\rangle, \quad |\theta_j\rangle = \exp[-i\theta s_{jy}]|0_j\rangle. \quad (7.34)$$

Esto lleva a que $\langle \mathbf{S}_j \rangle_0 = -s(\sin \theta, 0, \cos \theta) = -s\boldsymbol{\lambda}/\lambda$, con

$$\lambda = J_x^0, \quad \cos \theta = B/B_c, \quad (7.35)$$

como es determinado por (7.19). Podemos expresar ahora los operadores de espín originales en términos de los operadores rotados, esto es,

$$S_{ix} = S_{ix'} \cos \theta + S_{iz'} \sin \theta, \quad S_{iz} = S_{iz'} \cos \theta - S_{ix'} \sin \theta \quad (7.36)$$

con $S_{iy} = S_{iy'}$. La RPA alrededor de este estado lleva a los siguientes remplazos

$$\lambda \rightarrow J_{x'}^0, \quad J_x^k \rightarrow J_x'^k = J_x^k \cos^2 \theta + J_z^k \sin^2 \theta, \quad (7.37)$$

en la Ec. (7.32), con J_y^k invariante y $\Delta_{\pm}^k = \frac{1}{2}(J_x'^k \pm J_y^k)$.

Las correlaciones $\langle S_{i\mu'} S_{j\mu'} \rangle_{\text{RPA}}$ para los operadores de espín rotados tienen las mismas expresiones previas (2.57), mientras que aquellos de los operadores originales pueden ser obtenidos usando las Ecs. (7.36). Debe remarcarse que, sin embargo, en un sistema finito, el estado de espín de RPA asociado ya no será una buena aproximación al verdadero estado fundamental, debido a la ruptura de simetría. La restauración de paridad, al menos en forma aproximada, debe ser implementada antes de obtenerse el resultado final. En lo que sigue se discutirá el caso en que una simetría discreta (la simetría de paridad) se encuentra rota a nivel de campo medio. El caso de simetrías continuas puede tratarse con el formalismo CSPA desarrollado en el capítulo 5.

Estados RPA de paridad definida

Como $[H, P_z] = 0$, el estado de campo medio con paridad rota $|\Theta\rangle$ es degenerado: Ambos $|\Theta\rangle$ y $|- \Theta\rangle = P_z |\Theta\rangle$ son estados fundamentales en la aproximación de campo medio. A fin de describir un estado fundamental con paridad definida, la aproximación correcta al estado fundamental RPA debe tomarse como una de las combinaciones de paridad definida

$$|\Theta_{\text{RPA}}^{\pm}\rangle = \frac{|\Theta_{\text{RPA}}\rangle \pm |-\Theta_{\text{RPA}}\rangle}{\sqrt{2(1 \pm \langle -\Theta_{\text{RPA}} | \Theta_{\text{RPA}} \rangle)}}, \quad (7.38)$$

donde $|\pm \Theta_{\text{RPA}}\rangle$ son los estados RPA alrededor de cada estado de campo medio. El solapamiento $\langle -\Theta_{\text{RPA}} | \Theta_{\text{RPA}} \rangle = \langle \Theta_{\text{RPA}} | P_z | \Theta_{\text{RPA}} \rangle$ es proporcional al solapamiento entre los dos campos medios,

$$\langle -\Theta | \Theta \rangle = \cos^{2N_s} \theta = (B/B_c)^{2N_s}, \quad (7.39)$$

el cual es pequeño excepto para $B \rightarrow B_c$ o N_s pequeño.

Despreciando el solapamiento previo, la Ec. (7.38) nos lleva a las matrices densidad reducidas

$$\rho_{\mathcal{A}}^{\pm} \approx \frac{1}{2}[\rho_{\mathcal{A}}(\theta) + \rho_{\mathcal{A}}(-\theta)] \quad (7.40)$$

siempre que el solapamiento complementario $\langle -\Theta_{\text{RPA}}^{\bar{\mathcal{A}}} | \Theta_{\text{RPA}}^{\bar{\mathcal{A}}} \rangle \propto (B/B_c)^{2(n-n_{\mathcal{A}})s}$ pueda también ser despreciado. Aquí $\rho_{\mathcal{A}}(\pm\Theta)$ son las matrices densidad reducida de espín determinadas por el estado RPA, dadas hasta $\mathcal{O}(V^2)$ por las expresiones de la Sec. 7.2. La restauración de simetría (7.40) es esencial para conseguir una buena descripción de la verdadera entropía de subsistema, aunque su principal efecto para subsistemas \mathcal{A} no demasiado pequeños es en verdad simple: Si el producto $\rho_{\mathcal{A}}(\Theta)\rho_{\mathcal{A}}(-\Theta) \propto (B/B_c)^{2N_{\mathcal{A}}s}$ puede despreciarse, la Ec. (7.40) puede ser considerada como la suma de dos matrices densidad con soporte ortogonal con idéntico espectro, lo que lleva a

$$S(\rho_{\mathcal{A}}^{\pm}) \approx S(\rho_{\mathcal{A}}(\theta)) + 1, \quad (7.41)$$

donde $S(\rho_{\mathcal{A}}(\Theta))$ puede ser evaluado mediante la aproximación bosónica (2.61). Bajo estas hipótesis, el efecto sobre la negatividad global (2.66) es sólo

$$\mathcal{N}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(\rho_{\mathcal{A}}^{\pm}) \approx 2\mathcal{N}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}(\rho_{\mathcal{A}}(\theta)) + \frac{1}{2}, \quad (7.42)$$

ya que $\text{Tr}\sqrt{\rho_{\mathcal{A}}^{\pm}} \approx \sqrt{2}\text{Tr}\sqrt{\rho_{\mathcal{A}}(\theta)}$, mientras que la negatividad de subsistema $\mathcal{N}_{\mathcal{C}}$ de una bipartición $(\mathcal{B}, \mathcal{C})$ de \mathcal{A} permanece aproximadamente sin cambios: $\mathcal{N}_{\mathcal{B}, \mathcal{C}}(\rho_{\mathcal{A}}^{\pm}) \approx \mathcal{N}_{\mathcal{B}, \mathcal{C}}(\rho_{\mathcal{A}}(\theta))$.

Cuando el producto $\rho_{\mathcal{A}}(\Theta)\rho_{\mathcal{A}}(-\Theta)$ no puede despreciarse (como en un subsistema formado por espines), podemos en principio construir la matriz densidad de espín(7.40). Esto puede hacerse rotando $\rho_{\mathcal{A}}(\theta)$ (Ec. (7.16) en el marco de referencia de campo medio al eje z original y removiendo todos los elementos que deben anularse por simetría de paridad (lo cual es el efecto final de la Ec. (7.40)). Por ejemplo, la matriz densidad reducida de dos espines para $s = 1/2$ tiene la forma bloqueada (7.16) en la base estándar de autovalores de $s_{iz}s_{jz}$ tanto en la fase normal como en la fase con ruptura de simetría de paridad después de la restauración de simetría[7]. El efecto final sobre $S(\rho_{\mathcal{A}})$ es el remplazo del término $+1$ en (7.41) por la entropía de la mezcla de campos medios reducida $-\sum_{\nu=\pm} q_{\nu} \log_2 q_{\nu}$, con $q_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm (B/B_c)^{2s_{\mathcal{A}}})$, más pequeñas correcciones RPA.

Mientras que ambas $\rho_{\mathcal{A}}^{\pm}$ son idénticas en la aproximación (7.40), la verdadera $\rho_{\mathcal{A}}^{\pm}$ en un sistema pequeño dependerá de la paridad. El estado de paridad correcta en tal caso se elegirá de forma tal que se minimice la energía $E_{\text{RPA}}^{\pm} = \langle \Theta_{\text{RPA}}^{\pm} | H | \Theta_{\text{RPA}}^{\pm} \rangle$.

Campo factorizante

El valor explícito de los acoplamientos básicos Δ_{\pm}^k en la fase con simetría de paridad rota son, usando las Ecs. (7.37)–(7.35),

$$\Delta_{\pm}^k = \frac{1}{2}[(J_x^k - J_z^k)(B/B_c)^2 + J_z^k \pm J_y^k] \quad (7.43)$$

En el caso de una anisotropía común, tal que el cociente

$$\chi = \frac{J_y(l) - J_z(l)}{J_x(l) - J_z(l)} \quad (7.44)$$

es *independiente* de la separación l , tenemos $J_y^k - J_z^k = \chi(J_x^k - J_z^k)$ y por lo tanto $\Delta_-^k = \frac{1}{2}(J_x^k - J_z^k)[(B/B_c)^2 - \chi]$. Se ve entonces que si $\chi \in [0, 1]$, $\Delta_-^k = 0 \forall k$ cuando

$$|B| = B_s \equiv B_c \sqrt{\chi} \quad (7.45)$$

de manera que todos los Δ_-^k cambian de signo $|B| = B_s$. Aquí B_s es el *campo factorizante* [4, 7, 28, 75, 76]: En $B = B_s$ el campo medio con simetría de paridad rota se vuelve un estado fundamental *exacto*, ya que las correcciones RPA se anulan (Ec. (7.1)). Este efecto es independiente del número de espines N (mientras χ se mantenga constante) y del espín s (con el presente escaleo). Sin embargo, los verdaderos límites laterales en $B = B_s$ serán dados por los estados de paridad definida (7.38), los cuales se mantienen entrelazados. En consecuencia, la entropía de subsistema $S(\rho_A)$ y la negatividad $\mathcal{N}_{A\bar{A}}$ se aproximarán en realidad a un valor *finito* para $B \rightarrow B_s$ (1 y 1/2 respectivamente en la aproximación (7.41)–(7.42)), mientras que el entrelazamiento entre dos espines alcanzará un rango infinito [5, 7, 29]. Nótese finalmente que para $B = B_s$, $\Delta_+^k = J_y^k$ y por lo tanto,

$$\omega^k = J_x^0 - J_y^k. \quad (7.46)$$

7.3 Aplicación

Par de espines s

Como un primer ejemplo [2], consideremos un sistema formado por dos espines s acoplados por el Hamiltoniano (7.29). Obviamente, podemos asumir sin pérdida de generalidad que $J_x \geq |J_y|$ (Ec. (7.30)), ya que el signo de J_x puede siempre cambiarse por una rotación en π alrededor del eje z de uno de los espines (y podemos siempre asumir $|J_x| \geq |J_y|$ por una adecuada elección de ejes). La transformada de Fourier de $J_\mu(l) = \mathbf{1}_{11} J_\mu$ se reduce aquí a $J_\mu^k = (-1)^k J_\mu$, $k = 0, 1$, llevando a dos modos normales, uno atractivo y uno repulsivo:

$$\omega_0 = \sqrt{(\lambda - J_x)(\lambda - J_y)}, \quad \omega_1 = \sqrt{(\lambda + J_x)(\lambda + J_y)}.$$

Las contracciones (7.27) se reducen a $F_{ij} = \frac{\lambda - \Delta_+}{4\omega_0} - \frac{\lambda + \Delta_+}{4\omega_1}(1 - 2\mathbf{1}_{ij}) - \frac{1}{2}\mathbf{1}_{ij}$, $G_{ij} = \frac{\Delta_-}{4\omega_0} + \frac{\Delta_-}{4\omega_1}(1 - 2\mathbf{1}_{ij})$, donde $\Delta_\pm = \frac{1}{2}(J_x \pm J_y)$ y los remplazos (7.37) serán aplicados para $|B| < B_c$. La consiguiente entropía de entrelazamiento de pares en la aproximación bosónica (2.61) es simplemente

$$S(\rho_1) = -f \log_2 f + (1 + f) \log_2(1 + f) + \delta, \quad (7.47)$$

$$f = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{\lambda^2 - \tilde{\omega}^2}{\omega_0 \omega_1}} - 1 \right), \quad \tilde{\omega} = \frac{\omega_0 + \omega_1}{2} \quad (7.48)$$

donde $f = \sqrt{(F_{11} + \frac{1}{2})^2 - (G_{11})^2} - \frac{1}{2}$ es el autovalor simpléctico positivo de la matriz de contracciones de un espín (de dimensión 2×2) y $\delta = 0$ (1) para $|B| > B_c$ ($< B_c$) en la aproximación (7.41), válida para $(B/B_c)^{2s} \ll 1$. Para valores pequeños de f , podemos simplemente usar $S(\rho_1) \approx f(\log_2 e - \log_2 f)$, con $f \approx F_{11}$, en acuerdo con el resultado de la Sec. 7.2.

Así, a nivel RPA el entrelazamiento es determinado por la ocupación local media f y controlada por el cociente $\frac{\lambda^2 - \tilde{\omega}^2}{\omega_0 \omega_1}$, el cual es pequeño lejos de B_c y se anula en $B = B_s$ (donde $\tilde{\omega} = \lambda = J_x^0$ por la Ec. (7.46), y por lo tanto, $f = 0$). Para $|B| \gg B_c$, $f \approx (\frac{J_x - J_y}{4B})^2$, mientras que en la vecindad de B_s , $f \propto (B - B_s)^2$. Para $B \rightarrow B_c$, $f \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\lambda^2 - \tilde{\omega}^2}{\omega_0 \omega_1}} \propto |B - B_c|^{-1/4}$, con $S(\rho_1) \approx \log_2 f e$. La negatividad en la aproximación RPA bosónica (2.64)-(2.65) se vuelve

$$\mathcal{N}_{12} = \frac{-\tilde{f}}{1 + 2\tilde{f}} = f + \sqrt{f(f+1)} \quad (7.49)$$

donde $\tilde{f} = f - \sqrt{f(f+1)}$ es el autovalor simpléctico negativo de la matriz de contracciones de 4×4 . La corrección (7.42) ($\mathcal{N}_{21} \rightarrow 2\mathcal{N}_{21} + \frac{1}{2}$) debe ser aplicada para $|B| < B_c$. Para f pequeño, tenemos simplemente $\mathcal{N}_{12} \approx -\tilde{f} \approx \sqrt{f}$. Esto nos lleva a una discontinuidad en la pendiente de \mathcal{N}_{12} en el campo factorizante B_s (ver Fig. 11), al anularse f en forma cuadrática ($\mathcal{N}_{12} - \frac{1}{2} \propto |B - B_s|$ para $B \approx B_s$). Por otro lado, para $f \rightarrow \infty$ ($|B| \rightarrow B_c$), $\tilde{f} \rightarrow -\frac{1}{2}$, con $\tilde{f} \approx -\frac{1}{2} + \frac{1}{8f}$ y $\mathcal{N}_{12} \approx 2f$. $S(\rho_1)$ y \mathcal{N}_{12} son ambas funciones cóncavas crecientes de f y miden el entrelazamiento del par.

La comparación con resultados numéricos exactos, obtenidos mediante la diagonalización de H (una matriz de $(2s+1)^2 \times (2s+1)^2$ elementos), es mostrada en la Fig. 11 para el caso XY ($J_z = 0$) con anisotropía $\chi = J_y/J_x = 0.5$. Se puede ver que los resultados exactos se aproximan rápidamente a los valores RPA (7.47)-(7.49) al aumentar el espín s . La discrepancia para s finito surge sólo en la vecindad de B_c o para muy pequeños valores de s , esto es, donde los efectos de tuneleo cuántico que surgen a partir del solapamiento no nulo (7.39) entre los estados degenerados de paridad rota se vuelven apreciables.

Sin embargo, este solapamiento puede ser tenido en cuenta usando el estado RPA de paridad definida (7.38) de menor energía, el cual para s finito mejora el resultado para B cercano a B_c (que de otro modo resulta prácticamente coincidente con el resultado de la aproximación bosónica), como se ve en la Fig. 12. La Ec. (7.38) predice los límites laterales *exactos* en el campo factorizante [7] para *cualquier* s , aunque para $\chi = 0.5$ estos límites se aproximan rápidamente al valor límite para espín alto $S(\rho_1) = 1$ y $\mathcal{N}_{12} = \frac{1}{2}$ predicho por las aproximaciones (7.41)-(7.42). La Fig. 2 también muestra el comportamiento de las ocupaciones medias f y \tilde{f} . Se observa que la primera es muy pequeña ($f \lesssim 0.05$) excepto en la vecindad de B_c , implicando que lejos de B_c , todos los resultados de RPA bosónicos pueden ser reproducidos por la matriz densidad de espín de la Sec. 7.2, con $\tilde{f} \approx \sqrt{f}$. En los paneles inferiores se muestran las energías de RPA ω_0, ω_1 y los coeficientes $Z_k \equiv v_k/u_k$ del estado RPA usados en la Ec. (7.28). Aunque ω_0 se anula en B_c , la diferencia $\lambda - \tilde{\omega}$, responsable del entrelazamiento, se mantiene muy pequeña en todas partes. Ambos Z_k se anulan y cambian de signo en el campo factorizante B_s , indicando un cambio cualitativo en el tipo de correlaciones en ese punto: Es un hecho bien conocido que el entrelazamiento

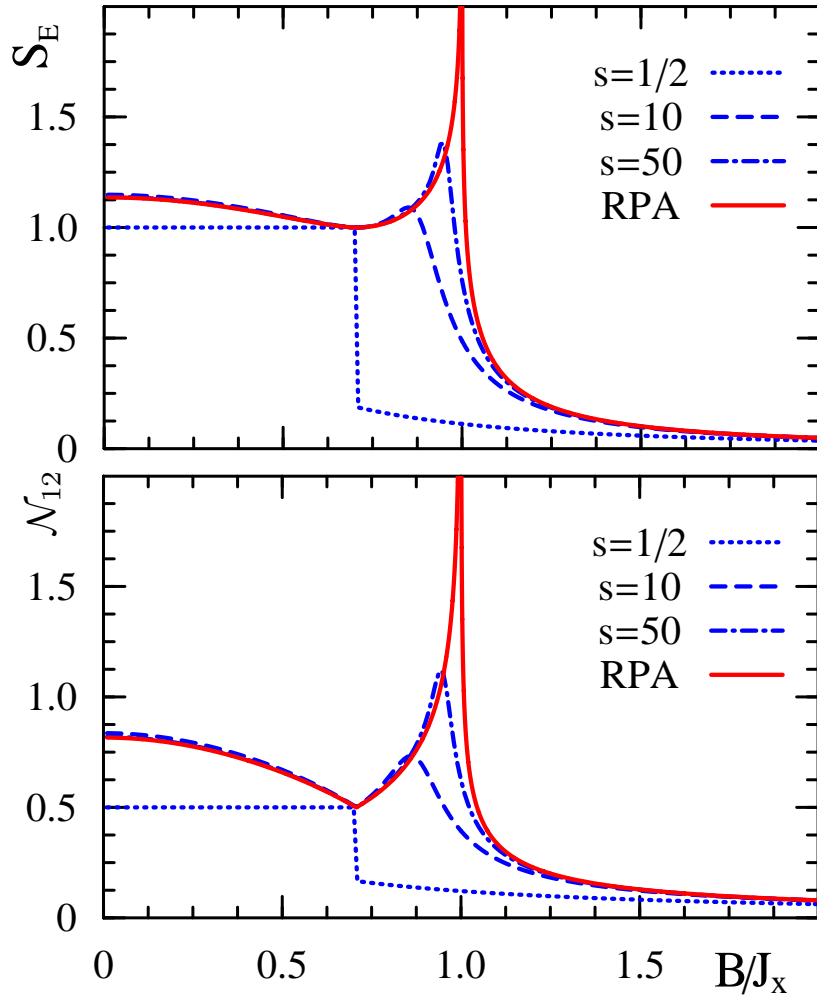


Figura 11: Entrelazamiento entre dos espines s en función de la intensidad del campo trasverso B para un acoplamiento XY con $J_y/J_x = 0,5$. Se representan la entropía de entrelazamiento exacta $S_E = S(\rho_1)$ (arriba) y la negatividad (abajo) para diferentes valores de espín s , y los resultados de la aproximación RPA bosónica, Ecs. (7.47), (7.49). Los resultados exactos se aproximan a los de RPA al aumentar s , apareciendo diferencias para s no tan pequeño sólo para B cercano a $B_c = J_x$. En el campo factorizante $B_s \approx B_c/\sqrt{2}$, $S_E = 1$ mientras que $\mathcal{N}_{12} = 1/2$.

entre dos espines $1/2$ cambia de antiparalelo a paralelo (en el marco de referencia original) en B_s [7], un efecto que emerge en RPA a partir de este cambio de signo.

Sistemas de espines completamente conectados

Consideremos ahora una red de N espines completa y uniformemente conectada por acoplamientos XYZ , donde

$$J_\mu(l) = (1 - \mathbf{1}_{l0})J_\mu/(N - 1), \quad (7.50)$$

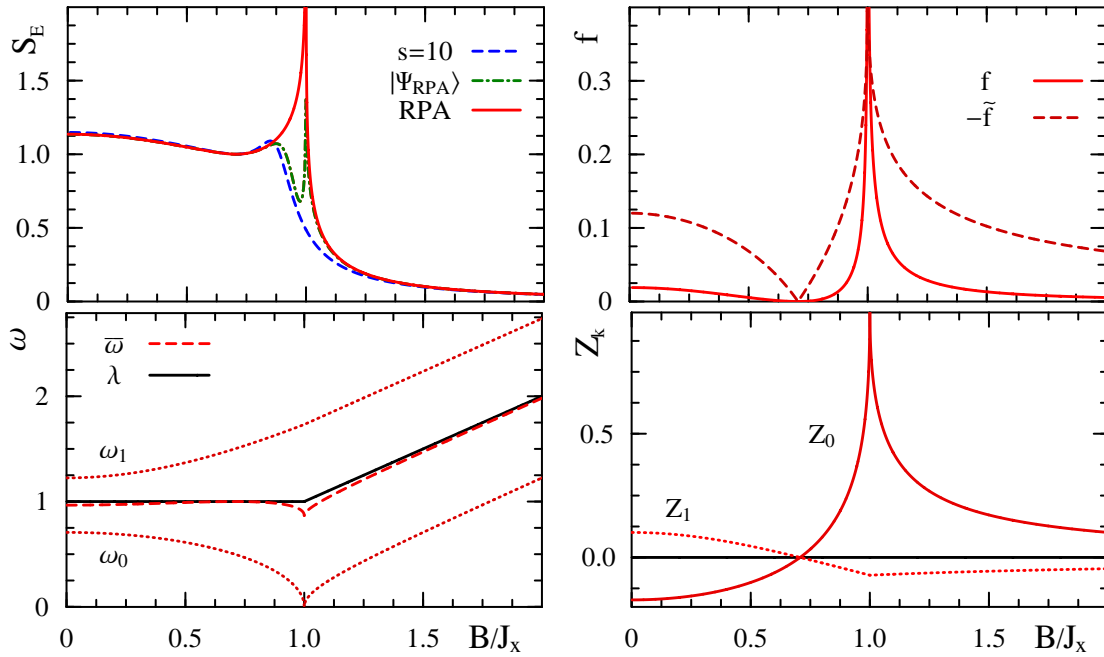


Figura 12: Arriba: Izquierda: La entropía de entrelazamiento obtenida a partir de los estados RPA de paridad definida (7.38) (línea punteada), comparada con el resultado RPA bosónico (7.47) y el valor exacto, para $s = 10$ y para los mismos valores de los parámetros de la Fig. 11. El resultado obtenido a partir del estado RPA de espín mejora el de la aproximación bosónica para campos B justo por debajo de B_c . Derecha: La ocupación media bosónica local f , Ec. (7.48), la cual es pequeña lejos de B_c , y el autovalor negativo \tilde{f} de la matriz de contracciones traspuesta parcial ($\tilde{f} \approx \sqrt{f}$ para f pequeño). Abajo: Izquierda: energías de RPA ω_0 , ω_1 , junto con la energía de campo medio λ y la energía media de RPA $\tilde{\omega}$ que aparece en (7.48). Derecha: Las cantidades $Z_k = v_k/u_k$ para $k = 0, 1$, que determinan el estado RPA (7.28) y se anulan en el campo factorizante B_s .

en (7.29). Este escaleo asegura que la energía intensiva $\langle H \rangle / N$ se mantenga finita para N grande y J_μ finito. Como ya se mencionó en el capítulo 5, las propiedades de entrelazamiento de este modelo son bien conocidas [48, 62, 77] y, para $s = 1/2$ en el límite de N grande, han sido analizadas previamente [77], incluyendo recientemente un tratamiento basado en la bosonización de Holstein-Primakoff [70, 74, 78, 79]. Se mostrará que la aplicación directa del presente formalismo RPA resulta en un tratamiento completamente analítico para cualquier tamaño N y espín s . Este tratamiento no coincide exactamente con el de las referencias [74, 78], por la ausencia de términos de auto interacción $\propto s_{i\mu} s_{i\nu}$ (no triviales para $s > 1/2$) que aquí son tomados en cuenta exactamente, conduciendo a correcciones asociadas a modos RPA repulsivos (ω_1), no nulos para N finito.

La transformada de Fourier de (7.50) es $J_\mu^0 = J_\mu$ y $J_\mu^k = -J_\mu / (N - 1)$ para $k = 1, \dots, N - 1$, llevando nuevamente a dos energías RPA distintas: Una asociada con el modo fundamental

atractivo (ω_0) y una al modo repulsivo $\omega_k = \omega_1$, $N - 1$ veces degenerado (para $k \neq 0$), agregando esta última solamente una pequeña corrección repulsiva, que tiene en cuenta la ausencia de los términos de auto interacción:

$$\omega_0 = \sqrt{(\lambda - J_x)(\lambda - J_y)}, \quad \omega_1 = \sqrt{(\lambda + \frac{J_x}{N-1})(\lambda + \frac{J_y}{N-1})}$$

donde los remplazos (7.37) deben usarse para $B < B_c$. Las consiguientes contracciones (7.27) se vuelven aquí obviamente independientes de la separación para $i \neq j$:

$$F_{ij} = F_0 \mathbf{1}_{ij} + F_1, \quad G_{ij} = G_0 \mathbf{1}_{ij} + G_1 \quad (7.51a)$$

$$F_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda - \Delta_+^1}{\omega_1} - 1 \right) \quad F_1 = \frac{1}{2N} \left[\frac{\lambda - \Delta_+^0}{\omega_0} - \frac{\lambda - \Delta_+^1}{\omega_1} \right] \quad (7.51b)$$

$$G_0 = \frac{1}{2N} \left[\frac{\Delta_-^0}{\omega_0} - \frac{\Delta_-^1}{\omega_1} \right] \quad G_1 = \frac{\Delta_-^1}{2\omega_1} \quad (7.51c)$$

lo que implica que para cualquier bipartición $(L, N - L)$, la entropía de entrelazamiento $S(\rho_L)$ dependerá sólo del tamaño L . Para evaluarla, observamos que la matriz de contracciones \mathcal{D}_L para un subsistema de L espines tiene los siguientes autovalores simplécticos (véase también [47])

$$f_L = \sqrt{(F_0 + LF_1 + \frac{1}{2})^2 - (G_0 + LG_1)^2} - \frac{1}{2} \quad (7.52)$$

$$f_0 = \sqrt{(F_0 + \frac{1}{2})^2 - G_0^2} - \frac{1}{2} \quad (7.53)$$

más sus compañeros $1 + f_L$, $1 + f_0$, donde f_L es no degenerado mientras que f_0 tiene degeneración $L - 1$. Las Ecs. (7.52)–(7.53) pueden ser obtenidas también por una transformación de Fourier local o notando que la matriz de contracción de $L \times L$, F_L , puede ser escrita como $F_L = F_0 \mathbf{1}_L + F_1 \mathbb{1}_L \mathbb{1}_L^t$ (al igual que G_L), con $\mathbb{1}_L$ un vector columna $L \times 1$ con elementos unidad. F_L y G_L serán entonces diagonales en la misma base local con autovalores $F_0 + LF_1$ y F_0 ($L - 1$ veces degenerado) y similarmente para G_L , lo que lleva a las Ecs. (7.52)–(7.53). En el caso de un vacío global, $f_0 = 0$ (ya que para $L = N$, tendríamos $f_{L=N} = f_0 = 0$), implicando un único autovalor positivo f_L para cualquier $L < N$. De esta manera, en la aproximación bosónica, la entropía de entrelazamiento (Ecs. (2.61)–(7.41)) viene dada por

$$S(\rho_L) = -f_L \log_2 f_L + (1 + f_L) \log_2(1 + f_L) + \delta, \quad (7.54)$$

$$f_L = \frac{1}{2} [\sqrt{1 + 2\alpha_L \Delta} - 1], \quad \alpha_L = L(n - L)/N^2, \quad (7.55)$$

donde $\delta = 0$ (1) para $|B| < B_c$ ($(B/B_c)^{2Ls} \ll 1$) y

$$\Delta = \frac{N^2(\lambda^2 - \tilde{\omega}^2)}{2(N-1)\omega_0\omega_1}, \quad \tilde{\omega} = \frac{\omega_0 + (N-1)\omega_1}{N}. \quad (7.56)$$

Para $N = 2$ recuperamos las Ecs. (7.47)–(7.48), mientras que para N grande, $\Delta \approx \frac{\lambda - \Delta_+^0}{\omega_0} - 1$. El entrelazamiento es gobernado nuevamente por el cociente $\frac{\lambda^2 - \tilde{\omega}^2}{\omega_0\omega_1}$, que es pequeño lejos de B_c y se anula en B_s . Para Δ pequeño, $f_L \approx \frac{1}{2}\alpha_L\Delta$, con $\Delta \approx \frac{1}{2} \left(\frac{N}{N-1} \frac{J_x - J_y}{2B} \right)^2$ para $|B| \gg B_c$ y

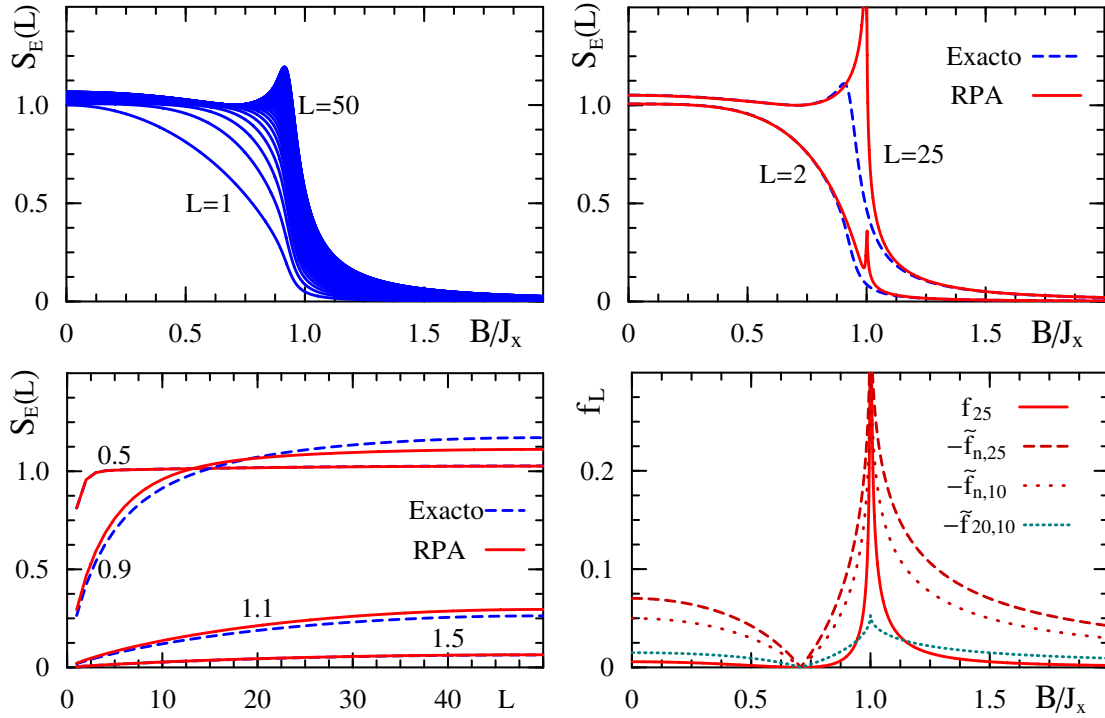


Figura 13: Resultados para la red de $N = 100$ espines $1/2$ completamente conectada. Arriba: Izquierda: Entropías de entrelazamiento $S_E(L) = S(\rho_L)$ de subsistemas con $L \leq n/2$ espines en función de la intensidad del campo magnético externo. Derecha: Comparación entre los resultados exactos y de RPA para $S(\rho_L)$. Abajo: Izquierda: Resultados exacto y de RPA para $S(\rho_L)$ en función del tamaño del subsistema L para cuatro diferentes valores de B/B_c . Derecha: Comportamiento magnético del número de ocupación bosónico medio (7.55) para $L = 25$ y del autovalor simpléctico negativo (7.59) de la matriz de contracciones traspuesta parcial, para diferentes valores de L y m .

$\Delta \propto (B - B_s)^2$ en la vecindad de B_s . Para $B \rightarrow B_c$, $f_L \propto \sqrt{\alpha_L} (B - B_c)^{-1/4}$ y $S(\rho_L) \approx \log_2 f_L e$.

Para evaluar la negatividad \mathcal{N}_{mp} de una bipartición (m, p) de un subsistema de L espines ($m + p = L$), podemos notar primero que F_L estará compuesto de bloques $F_{mm} = F_0 \mathbf{1}_m + F_1 \mathbb{1}_m \mathbb{1}_m^t$, $F_{mp} = F_1 \mathbb{1}_m \mathbb{1}_p^t = F_{pm}^t$ y $F_{pp} = F_0 \mathbf{1}_p + F_1 \mathbb{1}_p \mathbb{1}_p^t$, y similarmente para G_L . Una transformación local nos permite entonces escribir F_L como una suma directa de un bloque diagonal $(L - 2) \times (L - 2)$ $F_0 I_{L-2}$ más el bloque $F_0 I_2 + F_1 \begin{pmatrix} m & \sqrt{mp} \\ \sqrt{mp} & p \end{pmatrix}$, y similarmente para G_L . La correspondiente matriz de contracciones traspuesta parcial tendrá entonces los autovalores simplécticos $\tilde{f}_0 = f_0$ (Ec. (7.53)), $L - 2$ veces degenerado (con $\tilde{f}_0 = 0$ para un vacío global) y

$$\tilde{f}_{Lm}^{\pm} = \frac{1}{2} \sqrt{\text{tr}[A^2] \pm \sqrt{(\text{tr}[A^2])^2 - 16 \det A}} - \frac{1}{2} \quad (7.57)$$

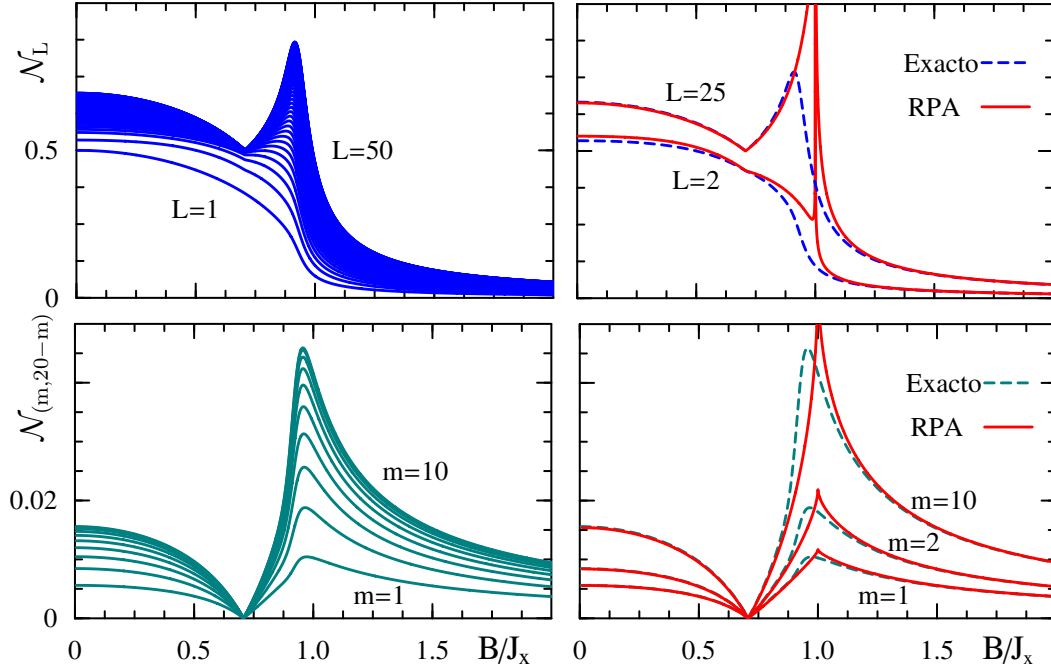


Figura 14: Arriba: Izquierda: Negatividades globales exactas $\mathcal{N}(L) = \mathcal{N}_{L,N-L}$ entre L y $N - L$ espines en el sistema completamente conectado. Derecha: Comparación entre el resultado exacto y la aproximación RPA de $\mathcal{N}(L)$ para dos valores de L . Abajo: Izquierda: Negatividades exactas de los subsistemas $\mathcal{N}_{m,L-m}$ entre m y $L - m$ espines en un subsistema de $L = 20$ espines. Derecha: Comparación entre el resultado exacto y la aproximación RPA para $\mathcal{N}_{m,L-m}$.

junto con sus compañeros $1 + \tilde{f}_0$, $1 + \tilde{f}_{Lm}^\pm$, donde $A = \begin{pmatrix} A_{FG} & -A_{GF} \\ A_{GF} & -A_{FG} \end{pmatrix}$ es una matriz bloques de 4×4 $A_{FG} = (\frac{1}{2} + F_0)I_2 + \begin{pmatrix} mF_1 & \sqrt{mp}G_1 \\ \sqrt{mp}G_1 & pF_1 \end{pmatrix}$ y similarmente para A_{GF} . Aquí, $\tilde{f}_{LM}^+ > 0$ pero $\tilde{f}_{LM}^- < 0$.

De esta manera, la negatividad bosónica de la bipartición $(m, L - m)$ de un subsistema de $L \leq N$ espines puede también ser explícitamente obtenida, como función del *único* autovalor negativo \tilde{f}_{Lm} de la matriz de contracciones de la traspuesta parcial :

$$\mathcal{N}_{m,L-m} = \frac{-\tilde{f}_{Lm}}{1 + 2\tilde{f}_{Lm}}, \quad (7.58)$$

$$\tilde{f}_{Lm} = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \gamma_{Lm}\Delta - \sqrt{8\beta_{Lm}\Delta + \gamma_{Lm}^2\Delta^2}} - \frac{1}{2} \quad (7.59)$$

$$\gamma_{Lm} = \alpha_L + 4\beta_{Lm}, \quad \beta_{Lm} = m(L - m)/N^2. \quad (7.60)$$

Para una partición global ($L = N$), $\alpha_N = 0$ mientras que $\beta_{Nm} = \alpha_m$, y $\tilde{f}_{nL} = f_L - \sqrt{f_L(f_L + 1)}$, con $\mathcal{N}_{nL} = f_L + \sqrt{f_L(f_L + 1)}$, como en la Ec. (7.49). En general, para Δ pequeño,

$$\tilde{f}_{Lm} \approx -\sqrt{\frac{1}{2}\beta_{Lm}\Delta} \approx -\sqrt{(\beta_{Lm}/\alpha_L)f_L} \quad (7.61)$$

de manera que para campos intensos, $\tilde{f}_{Lm} \approx \sqrt{\beta_{Lm}} \frac{N}{N-1} \frac{I_x - J_y}{4B}$, mientras que para B cercano a B_s , $\tilde{f}_{Lm} \propto \sqrt{\beta_{Lm}} |B - B_s|$. Por otro lado, para $B \rightarrow B_c$, $\tilde{f}_{Lm} \rightarrow -\frac{1}{2} (1 - \sqrt{\frac{\alpha_L}{\alpha_L + 4\beta_{Lm}}}) + \mathcal{O}(|B - B_c|^{1/2})$ si $\alpha_L \neq 0$, lo que implica que las negatividades de subsistema $\mathcal{N}_{m,L-m}$ para $L < n$ se mantienen finitas en B_c (en acuerdo con el resultado de [78]), ya que \tilde{f}_{Lm} se mantiene por encima de $-\frac{1}{2}$.

En la fase con ruptura de simetría de paridad,, el remplazo (7.42) ($N \rightarrow 2N + \frac{1}{2}$) debe usarse para las negatividades globales $\mathcal{N}_{N,N-L}$, mientras que las negatividades de subsistema $\mathcal{N}_{m,L-m}$ se mantienen sin cambio después de la restauración de simetría si tanto $(B/B_c)^{2s(N-L)}$ como $(B/B_c)^{2sL}$ pueden despreciarse.

Las Ecs. (7.54)–(7.59) representan esencialmente las expresiones exactas para la entropía de subsistema y la negatividad para espín grande y N finito, al igual que para N grande y espín finito, como puede verificarse mediante el calculo numérico exacto. Por ejemplo, los resultados exactos (obtenidos por medio de la diagonalización de H) y la aproximación RPA para una red de $N = 100$ espines $1/2$ se muestran en las figuras. 13–14. Los resultados RPA para la entropía de entrelazamiento son muy precisos excepto en la vecindad de B_c , disminuyendo las diferencias al aumentar N o s . Para L grande se obtuvieron con la expresión previa (7.54) mientras que para L pequeño (como el caso de $L = 2$), se calcularon a partir del estado RPA de espín (7.40), cuyo principal efecto es tener en cuenta el solapamiento correcto entre los estados con simetría rota para B por debajo pero cercano a B_c (aproximadamente, reemplazando δ en (7.47) por la entropía de la superposición reducida de campos medios).

La variación de $S(\rho_L)$ con L a campo fijo (panel inferior izquierdo en la Fig. 13) es también correctamente predicha, siendo bastante preciso tanto en la fase normal como en la de simetría rota para campos no demasiado cercanos a B_c . El panel inferior derecho muestra que f_L se mantiene pequeño excepto para B en torno a B_c , mientras que \tilde{f}_{Lm} se vuelve también pequeño cuando L se reduce, en completo acuerdo con la Ec. (7.61). Los resultados RPA para la negatividad global ($\mathcal{N}_{N,N-L}$) y en subsistemas particulares ($\mathcal{N}_{m,L-m}$ para $L < n$), las cuales son mucho más pequeñas y se anulan en B_s , son también muy precisos, como puede verse en la Fig. 14. Las negatividades de subsistema fueron obtenidas directamente con la Ec. (7.58), mientras que las negatividades globales fueron corregidas con la Ec. (7.42) para $B < B_c$ y L grande, y usando (7.40) para $L = 2$.

Parte IV

Campos factorizantes

8

EL CAMPO FACTORIZANTE EN SISTEMAS DE ESPINES

En los capítulos anteriores se mencionó que la aproximación de campo medio podía eventualmente volverse exacta para determinados valores finitos del campo magnético externo. Este fenómeno se observó por primera vez en cadenas de espines con interacciones XYZ de primeros vecinos [28, 80] y muy recientemente fue estudiado para el caso de arreglos generales de espines en [7, 29, 70, 75, 81–83]. Llamamos al correspondiente valor del campo magnético un campo factorizante del sistema. Como el estado de campo medio es separable, se podría esperar que un sistema en su campo factorizante no debería presentar ningún tipo de entrelazamiento.

Sin embargo, en el caso que el campo externo sea un campo transversal ocurre que la solución de campo medio en el campo factorizante rompe la simetría de paridad asociada a esta clase de sistemas. Cuando esto ocurre, el estado fundamental resulta ser un estado degenerado del sistema. Al proyectar estas soluciones sobre los subespacios de paridad definida encontramos que los genuinos autoestados del Hamiltoniano justo por encima y por debajo del campo factorizante ya no serán en general separables. En [7] mostramos, para el caso de cadenas cíclicas finitas de espines $1/2$ en un campo magnético transversal uniforme, que el campo factorizante se corresponde con la última transición entre estados con paridad opuesta que sufre el sistema al aumentar el campo magnético. En este tipo de sistemas, el estado presenta la notable propiedad de que el entrelazamiento entre cualquier par de espines del sistema alcanza un valor finito, independiente del alcance de la interacción. Estos rasgos hacen del campo factorizante un punto crítico cuántico, al menos en sistemas finitos. En contraste, en la transición de fase convencional, el valor y el alcance del entrelazamiento de pares se mantiene típicamente finito [61].

En la primera parte de este capítulo se desarrollará una teoría general sobre los campos factorizantes en arreglos de espines, para luego aplicar esos resultados generales a cadenas de espines de espines con invarianza traslacional [3, 4].

8.1 Campo factorizante en redes de espín generales

Consideremos el Hamiltoniano de una red de espines arbitraria de la forma (5.1) donde esta vez incluiremos posibles términos de autoenergía ($i = j$), no triviales para $s_i \geq 1$ ¹. Asumiremos además que el sistema presenta simetría de paridad s_z , pero no necesaria-

¹ Este tipo de términos están presentes por ejemplo en simulaciones de modelos de espines de valor arbitrario, acoplados por interacciones XXZ, basadas en en cavidades acopladas [84]

mente simetría ante traslaciones espaciales. El Hamiltoniano más general para un sistema de estas características será ²

$$H = b^i s_{iz} + \frac{1}{2} \sum_i s_{i\mu} v^\mu (i-j) s_{j\mu} \quad (8.1)$$

Buscaremos ahora condiciones para las que estos sistemas poseen un *auto estado separable con simetría rota* de la forma

$$|\Theta\rangle = \otimes_{i=1}^N \exp[i\theta^i s_{iy}] |0_i\rangle \quad (8.2)$$

$$= \otimes_{i=1}^N \left[\sum_{k=0}^{2s_i} \sqrt{\binom{2s_i}{k}} \cos^{2s_i-k} \frac{\theta^i}{2} \sin^k \frac{\theta^i}{2} |k_i\rangle \right], \quad (8.3)$$

donde $s_{iz}|k_i\rangle = (k - s_i)|k_i\rangle$ y $e^{i\theta^i s_{iy}}|0_i\rangle$ es un estado coherente [85]. La elección de y como el eje de rotación no presenta una pérdida de generalidad ya que cualquier estado $e^{i\phi^i \cdot s_i}|0_i\rangle$ corresponde a una rotación adecuada para valores complejos de θ^i en (8.2) ³. Reemplazando $s_{i\mu}$ en (8.1) por $e^{-i\theta^i s_{iy}} s_{i\mu} e^{i\theta^i s_{iy}}$, esto es, $s_{iz,x} \rightarrow s_{iz,x} \cos \theta^i \pm s_{iz,z} \sin \theta^i$, $s_{iy} \rightarrow s_{iy}$, la ecuación $H|\Theta\rangle = E_\Theta|\Theta\rangle$, esto es, $H_\Theta|0\rangle = E_\Theta|0\rangle$ con $|0\rangle = \otimes_{i=1}^N |0_i\rangle$ y $H_\Theta = e^{-i\sum_i \theta^i s_{iy}} H e^{i\sum_i \theta^i s_{iy}}$, lleva a las igualdades

$$v^{ijy} = v^{ijx} \cos \theta^i \cos \theta^j + v^{ijz} \sin \theta^i \sin \theta^j, \quad (8.4)$$

$$b^i \sin \theta^i = \sum_j (s_j - \frac{1}{2} \mathbf{1}_{ij}) (v^{ijx} \cos \theta^i \sin \theta^j - v^{ijz} \sin \theta^i \cos \theta^j), \quad (8.5)$$

que determinan, por ejemplo, el valor de v^{ijy} y b^i en términos de v^{ijx} , v^{ijz} , s_i y θ^i . La energía está dada por

$$E_\Theta = - \sum_i s_i [b^i \cos \theta^i + \frac{1}{2} \sum_j (s_j - \frac{1}{2} \mathbf{1}_{ij}) (v^{ijx} \sin \theta^i \sin \theta^j + v^{ijz} \cos \theta^i \cos \theta^j) + \frac{1}{4} (v^{iix} + v^{iiy} + v^{iiz})]. \quad (8.6)$$

Para una cadena cíclica (1D) de espín s con acoplamientos de primeros vecinos ($v^{ij\mu} = v^\mu \mathbf{1}^{i(j\pm 1)}$) en un campo magnético uniforme ($b^i = b$) recobramos la condición de separabilidad original de la Ref. [80] tanto para el caso ferromagnético ($v^\mu \geq 0$, $\theta^i = \theta$) como para el antiferromagnético ($v^\mu \leq 0$, $\theta^i = (-1)^i \theta$). Las Ecs. (8.4)–(8.6) son sin embargo completamente generales y se mantienen válidas también para valores complejos de θ^i , $v^{ij\mu}$ y b^i : Si se satisfacen $\forall i, j$, H tendrá un auto estado separable (8.2) con autovalor dado por la Ec. (8.6). Si $\sin \theta^i \neq 0$ para algún i , este autovalor es *degenerado*: $|\Theta\rangle$ romperá la simetría de paridad y por lo tanto, el estado asociado

$$|-\Theta\rangle = P_z |\Theta\rangle = \otimes_{i=1}^N \exp[-i\theta^i s_{iy}] |0_i\rangle, \quad (8.7)$$

² Como en el capítulo anterior, para simplificar la discusión, usaremos un sistema de unidades en el que $\hbar = 1$ y no incluiremos el coeficiente de reescalización $1/s$.

³ En término de los ángulos de Euler, $e^{i\alpha s_z} e^{i\beta s_y} e^{i\gamma s_z} |0\rangle = c e^{i\theta s_y} |0\rangle$, con $\tan \frac{\theta}{2} = e^{i\alpha} \tan \frac{\beta}{2}$ y $c = e^{-is(\alpha+\gamma)} \left(\frac{\cos \beta/2}{\cos \theta/2} \right)^{2s}$ (Ec. (8.3)). ϕ puede obviamente ser restringida al plano x, y .

será otro autoestado exacto de H con la misma energía (8.6). Los puntos en el espacio de parámetros donde los autoestados $|\pm \Theta\rangle$ son autoestados exactos corresponden necesariamente a cruces de niveles con paridad opuesta.

Para valores reales de θ^i , la Ec. (8.5) es sólo la condición estacionaria para la energía (8.6) para $b^i, v^{ij\mu}$ fijos. El estado (8.2) puede entonces considerarse como un estado de prueba de campo medio, siendo (8.5) la ecuación de autoconsistencia asociada. La Ec. (8.4), que es independiente del espín (para $v^{ij\mu}$ fijo), asegura que el estado es un autoestado exacto al cancelarse los elementos de matriz residuales de uno y de dos cuerpos conectando $|\Theta\rangle$ con el resto de los estados. Esto tiene un significado claro en RPA [6, 48]: si se satisfacen las Ecs. (8.4),(8.5), $\forall i, j$ el vacío de RPA coincidirá con el estado de campo medio. Más explícitamente, la matriz RPA a temperatura cero (cuyos autovalores son las energías de RPA) es

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{RPA}} &= \begin{pmatrix} \Lambda - \Delta^+ & -\Delta^- \\ (\Delta^-)^* & -\Lambda + (\Delta^+)^* \end{pmatrix}, \\ \Delta_{ij}^\pm &= \frac{1}{2} \sqrt{s_i s_j} (v^{ijx} \cos \theta^i \cos \theta^j + v^{ijz} \sin \theta^i \sin \theta^j \pm v^{ijy}), \end{aligned}$$

donde Λ es una matriz cuyos elementos diagonales son λ_i , los autovalores del Hamiltoniano local de campo medio $b^i s_{iz} - \sum_{j,\mu} v^{ij\mu} \langle s_{j\mu} \rangle_{\Theta} s_{i\mu}$, y Δ_{ij}^\pm los elementos asociados con los operadores de dispersión ($s_{i+} s_{j-}$) y creación de excitaciones de espín ($s_{i+} s_{j+}$) respectivamente. La Ec. (8.4) es entonces equivalente a la condición $\Delta^- = 0$, implicando la ausencia de correcciones de RPA al vacío de campo medio.

Más aún, si $\theta^i \in (0, \pi) \forall i$ y

$$|v^{ijy}| \leq v^{ijx} \quad \forall i, j, \quad (8.8)$$

podemos asegurar que $|\pm \Theta\rangle$ será un *estado fundamental* de H : En la base estándar formada por los estados $\{\otimes_{i=1}^N |k_i\rangle\}$, los términos en H dependientes de $\{s_{iz}\}$ son diagonales mientras que el resto llevan a elementos de matriz no positivos fuera de la diagonal, ya que $\sum_{\mu=x,y} v^{ij\mu} s_{i\mu} s_{\mu j} = \sum_{\nu=\pm} v^{ij\nu} (s_{i+} s_{j(-\nu)} + s_{i-} s_{j\nu})$, donde $s_{j\pm} = s_{jx} \pm i s_{jy}$ y $v^{ij\pm} = \frac{1}{4} (v^{ijx} \pm v^{ijy}) \geq 0$ por la Ec. (8.8). Entonces, $\langle H \rangle$ puede ser minimizado por un estado con todos sus coeficientes reales y del mismo signo en esta base (signos distintos no podían reducir $\langle H \rangle$), que entonces, no puede ser ortogonal a $|\Theta\rangle$ (Ec. (8.3)). Con una elección adecuada de fases para θ^i , $|\pm \Theta\rangle$ puede también ser estado fundamental en otros casos: Una rotación en π alrededor del eje z en cada sitio i lleva a $\theta^i \rightarrow -\theta^i$ y $v^{ijx,y} \rightarrow -v^{ijx,y}$ para $i \neq j$. Los autoestados de H con paridad definida en el subespacio generado por los estados $|\pm \Theta\rangle$ pueden construirse como

$$|\theta_\pm\rangle \equiv \frac{|\theta\rangle \pm |-\theta\rangle}{\sqrt{2(1 \pm \cos^N \theta)}} \quad (8.9a)$$

$$= \sum_k \frac{\sqrt{2} \sin^k \frac{\theta}{2} \cos^{N-k} \frac{\theta}{2}}{k! \sqrt{1 \pm \cos^N \theta}} s_+^k |0\rangle, \quad (8.9b)$$

$$O_\Theta \equiv \langle -\Theta | \Theta \rangle = \prod_{i=1}^N \cos^{2s_i} \theta^i, \quad (8.10)$$

los cuales satisfacen $P_z|\Theta^\pm\rangle = \pm|\Theta^\pm\rangle$, $\langle\Theta^{\nu'}|\Theta^{\nu}\rangle = \delta^{\nu\nu'}$. Aquí hemos fijado θ^i reales $\forall i$, ya que por medio de rotaciones locales alrededor del eje z podemos siempre elegir y_i en la dirección de ϕ_i (y por lo tanto volver real a θ^i) en el estado final $|\Theta\rangle$. Aún más, podemos también elegir $|\theta^i| \leq \pi/2$ (y así $O_\Theta \geq 0$) ya que una rotación local de π alrededor del eje x lleva a $\theta^i \rightarrow \pi - \theta^i$. El solapamiento (8.10) jugará un papel importante en lo que sigue.

Cuando la degeneración en el campo factorizante es de hecho 2, los estados (8.9) (en lugar de (8.2)) son *los verdaderos límites laterales en el campo factorizante* de los correspondientes autoestados exactos no degenerados (y por tanto, de paridad definida) de H . Para variaciones pequeñas δb^i , la degeneración se romperá si $O_\Theta \neq 0$, con un salto en la energía de $\Delta E \approx \sum_i \delta b^i \Delta M_i$, donde

$$\Delta M_i \equiv \langle\Theta^-|s_{iz}|\Theta^-\rangle - \langle\Theta^+|s_{iz}|\Theta^+\rangle = \frac{2s_i \sin^2 \theta^i O_\Theta}{\cos \theta^i (1 - O_\Theta^2)}. \quad (8.11)$$

(En contraste, $\langle\pm\Theta|s_{iz}|\pm\Theta\rangle = -s_i \cos \theta^i$).

En el campo factorizante ocurre un cruce de niveles entre los estados $|\Theta^+\rangle$ y $|\Theta^-\rangle$, que son los estados fundamentales justo por encima y por debajo del campo factorizante respectivamente. Este cruce está caracterizado por un *salto de la magnetización* $\Delta M = \sum_i \Delta M_i$. Si ΔE o ΔM pueden resolverse o ser medidos, la realización de los estados (8.9) es entonces manifiesta, y aprovechable en principio en aplicaciones tecnológicas. La magnitud de ΔM es gobernada por el solapamiento (8.10), apreciable en sistemas pequeños (si $\theta^i \neq \pi/2$) al igual que en sistemas finitos con ángulos pequeños (θ^i)² $\approx \delta_i/N$, tales que $O_\Theta \approx e^{-\sum_i s_i \delta_i/N}$. Esto implica (Ec. (8.4)) que el sistema se aproxima al límite XXZ ($v^{ijy} = v^{ijx}$). En este límite ($\theta^i \rightarrow 0$), $\Delta M \rightarrow 1$, con $|\Theta^+\rangle \rightarrow |0\rangle$ y $|\Theta^-\rangle \propto \sum_i \sqrt{s_i} \theta^i |1_i\rangle$ (un estado tipo W ponderado), donde $|1_i\rangle \equiv \otimes_{j=1}^N |(\mathbf{1}_{ji})_j\rangle$.

8.1.1 Entrelazamiento en los estados de paridad definida

En contraste con $|\pm\Theta\rangle$, los estados (8.9) son entrelazados. Si $\sin \theta^i \neq 0 \forall i$ el número de Schmidt de tales estados para *cualquier* bipartición global $(\mathcal{A}, \bar{\mathcal{A}})$ es 2 y la descomposición de Schmidt es

$$|\Theta^\pm\rangle = \sqrt{p_{\mathcal{A}^+}^\pm} |\Theta_{\mathcal{A}^+}^\pm\rangle |\Theta_{\bar{\mathcal{A}}}^\pm\rangle + \sqrt{p_{\mathcal{A}^-}^\pm} |\Theta_{\mathcal{A}^-}^\pm\rangle |\Theta_{\bar{\mathcal{A}}}^\mp\rangle, \quad (8.12)$$

$$p_{\mathcal{A}^\nu}^\pm = \frac{(1+\nu O_{\mathcal{A}})(1\pm\nu O_{\bar{\mathcal{A}}})}{2(1\pm O_\Theta)}, \quad O_{\mathcal{A}} = \langle-\Theta_{\mathcal{A}}|\Theta_{\mathcal{A}}\rangle, \quad (8.13)$$

donde $|\Theta_{\mathcal{A}}^\pm\rangle, |\Theta_{\bar{\mathcal{A}}}^\pm\rangle$ denotan los estados análogos de paridad definida en los subsistemas A, \bar{A} , con $\nu = \pm$, $O_{\mathcal{A}} O_{\bar{\mathcal{A}}} = O_\Theta$ y $p_{\mathcal{A}^+}^\pm + p_{\mathcal{A}^-}^\pm = 1$. Entonces, $|\Theta^\pm\rangle$ pueden ser efectivamente considerado como *estados de dos qubits* con respecto a *cualquier* bipartición $(\mathcal{A}, \bar{\mathcal{A}})$, con $|\Theta_{\mathcal{A}}^\pm\rangle, |\Theta_{\bar{\mathcal{A}}}^\pm\rangle$ representando los estados ortogonales de cada qubit. Por consiguiente, la matriz densidad reducida $\rho_{\mathcal{A}}^\pm$ del subsistema A en el estado $|\Theta^\pm\rangle$ es

$$\rho_{\mathcal{A}}^\pm = p_{\mathcal{A}^+}^\pm |\Theta_{\mathcal{A}^+}^\pm\rangle \langle\Theta_{\mathcal{A}^+}^\pm| + p_{\mathcal{A}^-}^\pm |\Theta_{\mathcal{A}^-}^\pm\rangle \langle\Theta_{\mathcal{A}^-}^\pm|. \quad (8.14)$$

El entrelazamiento entre \mathcal{A} y su complemento $\bar{\mathcal{A}}$ puede ser medido a través de la concurrencia global (raíz cuadrada del “tangle” [86]) $C_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}} = \sqrt{2(1 - \text{tr} \rho_{\mathcal{A}}^2)}$, la cual para una matriz densidad de rango 2 es sólo una función creciente de la entropía de entrelazamiento $E_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}} = -\text{tr} \rho_{\mathcal{A}} \log_2 \rho_{\mathcal{A}}$, con $C_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}} = E_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}} = 0$ (1) para estados separables (máximamente entrelazados). En los estados (8.12) obtenemos entonces

$$C_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}^{\pm} = \frac{\sqrt{(1 - O_{\mathcal{A}}^2)(1 - O_{\bar{\mathcal{A}}}^2)}}{1 \pm O_{\Theta}}. \quad (8.15)$$

Estos valores representan los límites laterales de $C_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}$ en el campo factorizante. Para $O_{\Theta} > 0$, $C_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}^{-} > C_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}^{+}$, con $C_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}^{-} = 1$ si $O_{\mathcal{A}} = O_{\bar{\mathcal{A}}}$. Nótese que $|\Theta^{\pm}\rangle$ son estados de Bell simultáneamente para $(\mathcal{A}, \bar{\mathcal{A}})$ sólo si $O_{\mathcal{A}} = O_{\bar{\mathcal{A}}} = 0$ (el límite GHZ de $|\Theta^{\pm}\rangle$, ver Cap. 2). En general, al aumentar el solapamiento se reducirá el entrelazamiento global.

La entropía de entrelazamiento de un bloque de L espines en una cadena de espines $1/2$ acoplados por una interacción XY uniforme a primeros vecinos en un campo constante fue calculada en [87] quienes mostraron que $s_L = -\text{tr} \rho_L \ln \rho_L = \ln 2$ en el campo factorizante (esto es, $C_{LL} = E_{LL} = 1$). En el límite termodinámico, de acuerdo con la Ec. (8.15) para solapamiento nulo. La Ec. (8.15) extiende este resultado a una cadena general *finita*, resultando en un valor ligeramente más pequeño: Para $O_{\mathcal{A}}, O_{\bar{\mathcal{A}}}$ pequeños, $C_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}^{\pm} \approx 1 - \frac{1}{2}(O_{\mathcal{A}} \pm O_{\bar{\mathcal{A}}})^2$ y $s_{L\pm} \approx \ln 2 - \frac{1}{2}(O_L \pm O_{\bar{L}})^2$ (con $O_L = (\frac{v^y}{v^x})^{\frac{1}{2}}$ en la cadena XY con $s = 1/2$).

Entrelazamiento de pares y de subsistemas. Por otro lado, si los solapamientos son nulos, el entrelazamiento de un subsistema en los estados (8.14) también lo será. Una característica notable de los estados (8.9) es que *cualquier* par de espines o subsistemas disjuntos $\mathcal{B}|\mathcal{C}$ estarán también entrelazados si el solapamiento complementario $O_{\overline{\mathcal{B}\mathcal{C}}}$ es no nulo y $O_{\mathcal{B}}^2 < 1$, $O_{\mathcal{C}}^2 < 1$. Más aún, su entrelazamiento puede ser caracterizado por la concurrencia

$$C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^{\pm} = \frac{\sqrt{(1 - O_{\mathcal{B}}^2)(1 - O_{\mathcal{C}}^2)O_{\overline{\mathcal{B}\mathcal{C}}}}}{1 \pm O_{\Theta}}, \quad (8.16)$$

o equivalentemente, por su negatividad [21, 40],

$$\mathcal{N}_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^{\pm} = \frac{1}{2}[\sqrt{(p_{\mathcal{A}^{\mp}}^{\pm})^2 + (C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^{\pm})^2/O_{\overline{\mathcal{B}\mathcal{C}}} - p_{\mathcal{A}^{\mp}}^{\pm}}], \quad (8.17)$$

donde $\mathcal{A} = \mathcal{B} + \mathcal{C}$. La Ec. (8.17) representa entonces los límites laterales de $\mathcal{N}_{\mathcal{B}\mathcal{C}}$ en el campo factorizante.

Demostración: Para $\mathcal{A} = \mathcal{B} + \mathcal{C}$, notamos primero que si $O_{\bar{\mathcal{A}}} = 0$, la Ec. (8.14) se vuelve $\rho_{\mathcal{A}}^{\pm} = \frac{1}{2}(|\Theta_{\mathcal{A}}\rangle\langle\Theta_{\mathcal{A}}| + |-\Theta_{\mathcal{A}}\rangle\langle-\Theta_{\mathcal{A}}|)$, esto es, $\rho_{\mathcal{A}}^{\pm}$ *coincidente* y *separable* (combinación convexa de matrices densidad producto[88]). El entrelazamiento entre \mathcal{B} y \mathcal{C} puede entonces ocurrir sólo si $O_{\overline{\mathcal{B}\mathcal{C}}} \neq 0$. Luego, usando una descomposición similar a la de Schmidt (8.12) de los estados $|\Theta_{\mathcal{A}}^{\pm}\rangle$, la Ec. (8.14) puede también ser considerada como un *estado mezcla*

de dos qubits efectivo con respecto a cualquier bipartición $\mathcal{B}|\mathcal{C}$ de \mathcal{A} : Su soporte caerá en el subespacio generado por cuatro estados $\{|\Theta_{\mathcal{B}}^{\nu}\rangle|\Theta_{\mathcal{C}}^{\nu'}\rangle, \nu, \nu' = \pm\}$, tales que

$$\rho_{\mathcal{A}}^{\pm} = \begin{pmatrix} p_{\mathcal{A}^+}^{\pm} q_{\mathcal{B}\mathcal{C}^+}^+ & 0 & 0 & p_{\mathcal{A}^+}^{\pm} \alpha_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^+ \\ 0 & p_{\mathcal{A}^-}^{\pm} q_{\mathcal{B}\mathcal{C}^+}^- & p_{\mathcal{A}^-}^{\pm} \alpha_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^- & 0 \\ 0 & p_{\mathcal{A}^-}^{\pm} \alpha_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^- & p_{\mathcal{A}^-}^{\pm} q_{\mathcal{B}\mathcal{C}^-}^- & 0 \\ p_{\mathcal{A}^+}^{\pm} \alpha_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^+ & 0 & 0 & p_{\mathcal{A}^+}^{\pm} q_{\mathcal{B}\mathcal{C}^-}^+ \end{pmatrix}$$

donde $q_{\mathcal{B}\mathcal{C}^{\nu}}^{\pm} = \frac{(1+\nu O_{\mathcal{B}})(1\pm\nu O_{\mathcal{C}})}{2(1\pm O_{\mathcal{B}}O_{\mathcal{C}})}$, $\alpha_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^{\pm} = \sqrt{q_{\mathcal{B}\mathcal{C}^+}^{\pm} q_{\mathcal{B}\mathcal{C}^-}^{\pm}}$ y $q_{\mathcal{B}\mathcal{C}^+}^{\pm} + q_{\mathcal{B}\mathcal{C}^-}^{\pm} = 1$. $\rho_{\mathcal{A}}^{\pm}$ estarán entrelazados sí y sólo si su traspuesta parcial tiene autovalores negativos [20], una condición equivalente aquí a una concurrencia del estado mezcla positiva [38] $C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^{\pm} = \text{Max}[C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^{\pm}, 0]$, donde $C_{\nu}^{\pm} = 2[p_{\mathcal{A}^{\nu}}^{\pm} \alpha_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^{\nu} - p_{\mathcal{A}^{-\nu}}^{\pm} \alpha_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^{-\nu}]$ representa la concurrencia paralela ($\nu = +$) o antiparalela ($\nu = -$), esto es, llevada por $|\Theta_{\mathcal{A}}^+\rangle$ o $|\Theta_{\mathcal{A}}^-\rangle$ en la Ec. (8.14). Esto conduce a la Ec. (8.16), con $C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^+$ ($C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^-$) paralela (antiparalela). La consecuente negatividad, dada aquí por el valor absoluto del autovalor negativo de la traspuesta parcial $(\rho_{\mathcal{A}}^{\pm})^{t_{\mathcal{B}}}$, queda expresada entonces por la Ec. (8.17).

Para $\mathcal{B} = \mathcal{A}$, $\mathcal{C} = \bar{\mathcal{A}}$ ($O_{\mathcal{B}+\mathcal{C}} \rightarrow 1$), la Ec. (8.16) se reduce a (8.15), con $\mathcal{N}_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}^{\pm} = \frac{1}{2}C_{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}}^{\pm}$. Para un par de espines $i \neq j$, $O_{\mathcal{B}} = \cos^{2s_i} \theta^i$, $O_{\mathcal{C}} = \cos^{2s_j} \theta^j$ y el resultado de [7]

Finalmente notemos que si $O_{\mathcal{B}} = O_{\mathcal{C}}$, $\mathcal{N}_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^+ = C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^+/2$, como en el caso de una partición global. En general, sin embargo, no hay una proporcionalidad entre $\mathcal{N}_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^{\pm}$ y $C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^{\pm}$.

Las concurrencias (8.16) satisfacen las desigualdades de monogamia [89] $C_{\mathcal{B},\mathcal{C}+\mathcal{D}}^2 \geq C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^2 + C_{\mathcal{B}\mathcal{D}}^2$ para cualquier terna de subsistemas disjuntos $\mathcal{B}, \mathcal{C}, \mathcal{D}$. Obtenemos en este caso

$$C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^2 + C_{\mathcal{B}\mathcal{D}}^2 = C_{\mathcal{B},\mathcal{C}+\mathcal{D}}^2 \left[1 - \frac{(1-O_{\mathcal{C}}^2)(1-O_{\mathcal{D}}^2)}{1-O_{\mathcal{C}}^2 O_{\mathcal{D}}^2}\right].$$

Remarquemos también que el entrelazamiento de subsistema persiste, aunque atenuado, en la mezcla uniforme

$$\rho^0 = \frac{1}{2}(|\Theta^+\rangle\langle\Theta^+| + |\Theta^-\rangle\langle\Theta^-|), \quad (8.18)$$

la cual difiere de $\frac{1}{2}(|\Theta\rangle\langle\Theta| + |-\Theta\rangle\langle-\Theta|)$ si $O_{\Theta} \neq 0$ y representa el límite $T \rightarrow 0^+$ del estado térmico $\rho \propto e^{-\beta H}$ en el campo factorizante cuando $|\pm\Theta\rangle$ son estado fundamental (y la degeneración del estado fundamental es 2). Reemplazando $p_{\mathcal{A}^{\nu}}^{\pm}$ por $\frac{1}{2}(p_{\mathcal{A}^{\nu}}^+ + p_{\mathcal{A}^{\nu}}^-)$ en (8.14), encontramos ahora que las concurrencias global y de subsistemas son antiparalelas, dadas para cualquier par de subsistemas disjuntos \mathcal{B}, \mathcal{C} por

$$C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^0 = \frac{1}{2}(C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^- - C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^+) = C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^- O_{\Theta} / (1 + O_{\Theta}), \quad (8.19)$$

esto es, la mitad de la diferencia entre sus límites laterales de $C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}$. La Ec. (8.19) se mantiene válida para una bipartición global ($\mathcal{B} = \mathcal{A}$, $\mathcal{C} = \bar{\mathcal{A}}$). La consecuente negatividad puede calcularse de manera análoga.

El orden de magnitud de la concurrencia de subsistema es gobernado por el solapamiento complementario $O_{\mathcal{B}+\mathcal{C}}$. Para subsistemas pequeños (como un par de espines) en un sistema grande, $C_{\mathcal{B}\mathcal{C}}^{\pm}$ será apreciable sólo para ángulos suficientemente pequeños en el subsistema complementario, esto es, $\theta_i^2 \approx \delta_i/N$, de manera que $O_{\mathcal{B}+\mathcal{C}} \approx e^{-\sum_{i \in \bar{\mathcal{A}}} s_i \delta_i / N}$ se mantenga finito. Esto lleva de nuevo a sistemas con anisotropía XY pequeña.

8.1.2 La solución uniforme

Examinemos ahora la posibilidad de un ángulo común $\theta^i = \theta \forall i$. La Ec. (8.4) lleva entonces a

$$v^{ijy} - v^{ijz} = (v^{ijx} - v^{ijz}) \cos^2 \theta, \quad (8.20)$$

implicando una razón fija

$$\chi \equiv (v^{ijy} - v^{ijz}) / (v^{ijx} - v^{ijz}) = \cos^2 \theta \quad (8.21)$$

para todos los pares con $v^{ijx} \neq v^{ijz}$, y un acoplamiento isotrópico $v^{ijy} = v^{ijx}$ si $v^{ijx} = v^{ijz}$. Un subconjunto de acoplamientos isotrópicos no arruina este autoestado ⁴. La Ec. (8.5) implica entonces que b^i es arbitrario si $\theta = 0$ o π (como en el caso XXZ $v^{ijy} = v^{ijx}$). Si $\theta \neq 0, \pi$

$$b^i = \chi \sum_j (v^{ijx} - v^{ijz}) (s_j - \frac{1}{2} \mathbf{1}_{ij}). \quad (8.22)$$

La energía (8.6) es en ese caso

$$E_{\Theta} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} s_i [s_j (v^{ijx} + v^{ijy} - v^{ijz}) + \mathbf{1}_{ij} v^{iiz}]. \quad (8.23)$$

Un campo general permite entonces un autoestado separable uniforme (un estado coherente global) en cadenas abiertas como en cadenas cíclicas con espín s_i arbitrario en cualquier dimensión si (8.20) se mantiene $\forall i, j$. Por ejemplo, en una cadena abierta de espines $s_i = s$ con acoplamientos a primeros vecinos $v^{ij\mu} = v^{\mu} \mathbf{1}^{i(j\pm 1)}$, la Ec. (8.22) produce $b^i = b_s = 2s \sqrt{(v^y - v^z)(v^x - v^z)}$ en los sitios internos, pero $b^1 = b^N = \frac{1}{2} b_s$ en los bordes.

En realidad, las Ecs. (8.20)–(8.23) son válidas para valores complejos de θ , pero el campo factorizante será real sólo si $\cos \theta$ es real ($\chi \geq 0$). $\cos^2 \theta > 1$ (θ imaginario) corresponde a una rotación alrededor del eje x pero puede reescribirse como una rotación alrededor del eje y axis por una rotación global en torno al eje z . Así, podemos fijar $\cos^2 \theta \in [0, 1]$. Los estados $|\pm \Theta\rangle$ serán entonces estado fundamental cuando la Ec. (8.8) sea satisfecha.

La concurrencia (8.16) se vuelve, al fijar $\cos^2 \theta = \chi$,

$$C_{BC}^{\pm} = \frac{\sqrt{(1 - \chi^{2s_B})(1 - \chi^{2s_C})} \chi^{S - (s_B + s_C)}}{1 \pm \chi^S} \quad (8.24)$$

donde $s_B = \sum_{i \in B} s_i$ es el espín total del subsistema y $S = \sum_i s_i$ el espín total. Esta es independiente de la separación y del rango de acoplamiento, dependiendo solamente de χ^S y de los cocientes $s_B/S, s_C/S$. Si

$$\chi = 1 - \delta/2S, \quad (8.25)$$

⁴ Para un acoplamiento completamente isotrópico $\frac{1}{2} \sum_{i,j} v^{ij} s_i \cdot s_j$, θ se mantiene arbitrario mientras que la Ec. (8.5) lleva a $b^i = 0$ si $\sin \theta \neq 0$: Sin campo externo, cualquier estado coherente es un autoestado exacto.

con $\delta > 0$ y finita, $\chi^S \approx e^{-\delta/2}$ se mantiene finito para valores grandes de S . La Ec. (8.24) lleva entonces a concurrencias globales $\mathcal{O}(1/\sqrt{S})$ y de subsistema $\mathcal{O}(1/S)$ para valores pequeños de s_A, s_B y s_C :

$$C_{AA}^\pm \approx \sqrt{\frac{s_A \delta}{S} \frac{\sqrt{1 - e^{-\delta}}}{1 \pm e^{-\delta/2}}}, \quad (8.26)$$

$$C_{BC}^\pm \approx \frac{\delta \sqrt{s_B s_C} e^{-\delta/2}}{S (1 \pm e^{-\delta/2})}. \quad (8.27)$$

Por otro lado, para $s_A = \frac{1}{2}S$, $C_{AA}^- = 1$ mientras que $C_{AA}^+ = \tanh \frac{1}{4}\delta$. Así, mientras que para valores grandes de δ ambas C_{AA}^\pm se aproximan rápidamente a 1 al aumentar s_A , para valores pequeños de δ (límite XXZ) esto ocurre sólo para C_{AA}^- y s_A cercanos a $S/2$ (aquí $|\Theta^+\rangle \rightarrow |0\rangle$ pero $|\Theta^-\rangle$ se aproxima al estado tipo $W \propto \sum_i \sqrt{s_i} |1_i\rangle$).

8.1.3 Solución alternante y entrelazamiento controlable en el campo factorizante

Entre otras posibles soluciones de las Ecs. (8.4)–(8.5), examinemos aquella *solución en la que el campo magnético induce dos ángulos de polarización* en una cadena (cíclica o abierta) de espín s con acoplamientos XY a primeros vecinos ($v^{ij\mu} = \mathbf{1}_{i,j\pm 1} v^\mu$, con $v^z = 0$). Asumimos que $\chi = v^y/v^x \in [0, 1]$. Un autoestado separable con $\theta_{2i} = \theta_e$, $\theta_{2i-1} = \theta_o$ es posible en presencia de un campo alternante $b^{2i} = b_e$, $b^{2i-1} = b_o$ en los sitios internos, satisfaciendo (Ecs. (8.4)–(8.5))

$$b_e b_o = (2s)^2 v^x v^y. \quad (8.28)$$

Esto lleva a una *curva de separabilidad* transversa. Los consiguientes ángulos satisfacen $\cos \theta_o \cos \theta_e = v^y/v^x$ y son dados por

$$\cos^2 \theta_\sigma = \frac{b_\sigma^2 + (2s v^y)^2}{b_\sigma^2 + (2s v^x)^2}, \quad \sigma = o, e, \quad (8.29)$$

siendo *dependientes del campo*. Para $b_e = b_o$ recobramos la solución uniforme anterior ($b_s = 2s\sqrt{v^x v^y}$). En una cadena abierta sólo debemos agregar, de acuerdo a la Ec. (8.5), las correcciones de borde $b^1 = \frac{1}{2}b_o$, $b^N = \frac{1}{2}b_{\sigma_N}$. Los estados $|\pm \Theta\rangle$ serán entonces estado fundamental fijando $\theta_{o,e} > 0$ cuando $v^x > 0$ y $\theta_o > 0$, $\theta_e < 0$ en el caso antiferromagnético $v^x < 0$ (para N par si la cadena es cíclica, para evitar que ocurra frustración).

Los estados de paridad definida $|\Theta^\pm\rangle$ llevarán nuevamente a un rango de entrelazamiento infinito, pero con concurrencias entre pares de espines con tres diferentes formas de dependencia con el campo (y por lo tanto *controlables*) (Ec. (8.16) para $B = i$, $C = j$): par-par, impar-impar y par-impar, satisfaciendo $C_{oe}^\pm = \sqrt{C_{oo}^\pm C_{ee}^\pm}$, con $C_{oo}^\pm > C_{oe}^\pm > C_{ee}^\pm$ si $|b_o| < |b_e|$. Así, C_{oo}^\pm puede en forma *controlable*, hacerse *más grande* que C_{oe}^\pm a pesar de la ausencia de un acoplamiento directo entre sitios impar-impar. Para b_e suficientemente grande, $\cos \theta_e \approx 1$ pero $\cos \theta_o \approx \chi$: sólo los pares impar-impar estarán entrelazados de manera apreciable en este límite en el campo factorizante.

8.2 Aplicaciones

En lo que sigue, veremos algunas aplicaciones de lo desarrollado anteriormente, en sistemas resolubles exactamente para *todo campo transverso externo*. Primero se discutirán los casos extremos para redes invariantes traslacionales: la cadena cíclica de primeros vecinos y el modelo de Lipkin. En estos modelos el entrelazamiento de pares es función sólo de la separación entre los sitios (y en particular, en el caso del modelo de Lipkin, es constante). Luego extenderemos los resultados al caso de la cadena abierta de primeros vecinos. Hemos también realizado el análisis del caso de cadenas con interacciones no uniformes, en particular, dos sistemas simples que en cierta región de los parámetros presentan fases dimerizadas [3], que por razones de brevedad no se discutirá en esta tesis.

Campo factorizante en cadenas cíclicas

En este apartado se considerarán dos casos: I) la red completamente conectada y II) la cadena cíclica de primeros vecinos, en el caso particular de $s_i = 1/2$ en ambos casos. Vamos a estudiar el entrelazamiento entre pares de sitios cuando el sistema se encuentra dentro de un campo magnético transverso uniforme. Por la invarianza traslacional, el entrelazamiento entre cualquier par depende solamente de la “distancia” entre ellos: De esta manera, las Ecs. (8.16) (8.19) se reducen a

$$C_{ij}^{\pm} = (1 - \chi) \frac{\chi^{N/2-1}}{1 \pm \chi^{N/2}}, \quad (8.30)$$

$$C_{ij}^0 = C_{ij}^- \frac{\chi^{N/2}}{1 + \chi^{N/2}}, \quad (8.31)$$

En el límite de N grande y pequeñas anisotropías, estas expresiones se reducen a las aproximadas (8.27), que para este caso vienen dadas por

$$c_{\pm} \equiv NC_{\pm} \approx \delta e^{-\delta/2} / (1 \pm e^{-\delta/2}), \quad (8.32)$$

$$c_0 \equiv NC_0 \approx \delta e^{-\delta} / (1 - e^{-\delta}), \quad (8.33)$$

En los dos sistemas, cuando b aumenta desde 0^+ , el estado fundamental sufre $[N/2]$ transiciones de paridad $\pm \rightarrow \mp$ si $\chi \in (0, 1]$ (como en el caso XXZ), ocurriendo la última ($- \rightarrow +$) en $b = b_s$. Estas son claramente visibles para N pequeño si χ no es demasiado pequeño, esto es, si $\delta = N(1 - \chi)$ no es demasiado grande, como se ve en la Fig. 16 para $N = 10$ qubits. Para $b \rightarrow b_s^{\pm}$, todas las concurrencias del estado fundamental C_l^{\pm} se aproximan a los mismos límites laterales (8.30) en ambos sistemas, con valores no despreciables. Para $\delta = 2,5$, C_l^{\pm} alcanza de echo su valor *máximo* para $b \rightarrow b_s \approx 0,87v^x$ en I, y también en II si $l > 2$. Para $\delta = 5$ los límites laterales siguen siendo observables pero casi coincidentes, implicando una c_0 despreciable (Ec. (8.31)). En la Fig. 17 se representa el comportamiento de c_l^{\pm} para $N = 50$ qubits, para los mismos valores de δ (ahora $\chi = 0,95$ y $0,9$), observándose que es la misma que en la Fig. 16 en la vecindad de b_s . Todos los pares se vuelven entrelazados cuando $b \rightarrow b_s$, con C_l aproximándose a los valores comunes (8.30) en ambos

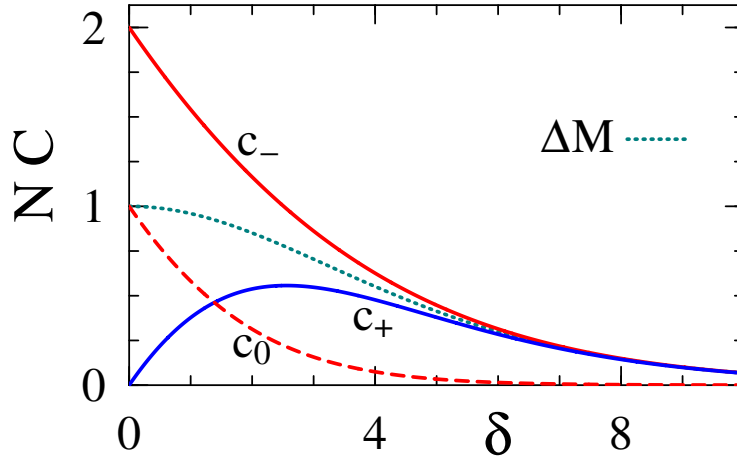


Figura 15: Concurrencias de pares reescaladas para el estado fundamental en el campo factorizante vs el parámetro de anisotropía reescalado δ . c_{\pm} denota los límites laterales (8.32), c_0 el valor en $b = b_s$ (Ec. (8.33)), el color rojo indica el tipo antiparalelo (c_-, c_0) y el azul el paralelo (c_+). La línea punteada representa el salto en la magnetización (8.11).

sistemas, siendo ahora bien aproximados por las Ecs. (8.32). Dentro de cada subespacio de paridad, el campo factorizante se distingue como aquel donde *todas* las concurrencias del estado fundamental C_l^{\pm} se cruzan tomando los valores (8.30) (en vez de anularse), como se ve en el panel superior de la Fig. 18. Más aún, en II el ordenamiento de las concurrencias C_l^{\pm} se invierte en $b = b_s$: C_l^- (C_l^+) aumenta con la separación l para b justo por encima (debajo) de b_s , ya que $C_l^{\pm}(b)$ se comporta linealmente en la vecindad de b_s . Nótese que $C_l^+(b)$ se anula para campos más bajos $b_l^+ < b_s$, volviéndose *antiparalela* para $b < b_l^+$. Por otro lado, a temperaturas suficientemente bajas, b_s puede ser identificado con el campo donde todas las concurrencias térmicas $C_l(T)$ se cruzan en el valor (8.31), como se ve en el panel inferior de la Fig. 18. $C_l(T)$ se anula para un campo $b_l(T) > b_s$ ligeramente *más grande* dependiente de l , permaneciendo *antiparalela* hasta $b_l(T)$. Para entender este efecto notemos que en una mezcla general

$$\rho_q = q|\theta_+\rangle\langle\theta_+| + (1-q)|\theta_-\rangle\langle\theta_-|, \quad q \in [0,1]$$

la concurrencia $C(q) \equiv C_l(\rho_q)$ es

$$C(q) = |1 - q/q_c|C_-, \quad q_c = \frac{1}{2}(1 + \cos^N \theta), \quad (8.34)$$

que generaliza la Ec. (8.31) (que se recupera para $q = 1/2$). $C(q)$ es antiparalela (paralela) para $q < q_c$ ($> q_c$) y *cero* para $q = q_c > 1/2$, donde ρ_q se vuelve completamente separable ($\rho_{q_c} = \frac{1}{2}(|\theta\rangle\langle\theta| + |-\theta\rangle\langle-\theta|)$). La separabilidad requiere entonces un peso levemente superior en $|\theta_+\rangle$ debido a su reducida concurrencia. Así, a $T > 0$ bajas $C_l(T)$ se anula y cambia de antiparalela a paralela en un campo ligeramente *mayor* $b_l(T) > b_s$, donde el estado fundamental con paridad positiva tiene un peso mayor en la mezcla térmica. En el caso II esto conduce al sorprendente resultado de que en un delgado intervalo $b_s < b < b_l(T)$, la

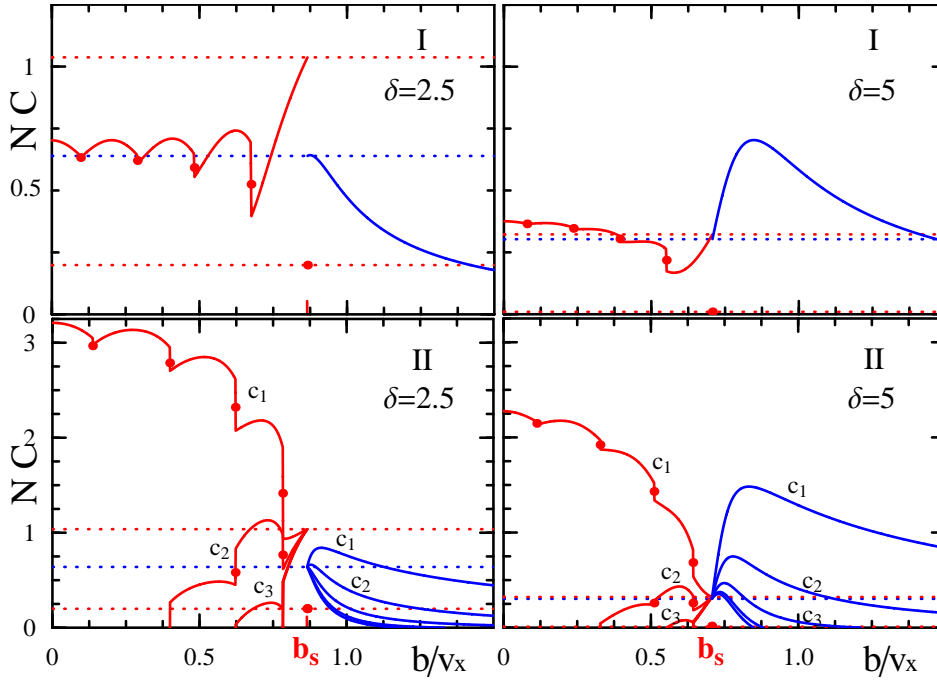


Figura 16: Las concurrencias reescaladas del estado fundamental c_l vs. el campo magnético b para $N = 10$ qubits y anisotropía $\chi = 1 - \delta/N = 0,75$ (izquierda) y $0,5$ (derecha). Los paneles superiores corresponden a la red simétricamente conectada, donde c_l es el mismo para todas las separaciones l , los paneles inferiores a los acoplamientos de primeros vecinos, donde c_l es mostrado para todas las separaciones. Las líneas horizontales punteadas indican los valores límites (8.30) y (8.31). En $b = b_s$, c_l cambia de tipo antiparalelo (rojo) a paralelo (azul), siendo los límites laterales no nulos e idénticos $\forall l$, y los mismos para los casos I y II. Los puntos grandes indican los valores de concurrencia en las $N/2$ transiciones de paridad (para la mezcla de ambos estado fundamental), con aquel en $b = b_s$ dado por la Ec. (8.31) $\forall l$ en I y en II.

concurrencia térmica $C_l(T)$ crecerá con la distancia l , ya que sigue siendo gobernada por el estado impar más bajo $\forall l$.

De esta manera, vemos que el rango, el tipo y el orden del entrelazamiento de pares puede ser controlado ajustando el campo en torno a b_s .

8.2.1 Cadenas abiertas de espín s

Veamos ahora el caso de las cadenas abiertas de espín s con interacciones de primeros vecinos en campos uniformes y alternantes. Como ilustración, representamos primero en la Fig. 19 los resultados exactos para la negatividad \mathcal{N}_{1j} del estado fundamental entre el espín en el sitio 1 y el del sitio j en una pequeña cadena uniforme de espín s con acoplamientos XY a primeros vecinos en un campo transversal uniforme $b^i = b$ para $i = 2, \dots, n-1$, con las correcciones de borde $b^1 = b^n = \frac{1}{2}b$. Para $\chi = v^y/v^x \in (0, 1)$ esta cadena exhibirá un campo factorizante exacto $b_s = 2sv^x\sqrt{\chi}$ donde un estado separable con simetría de paridad

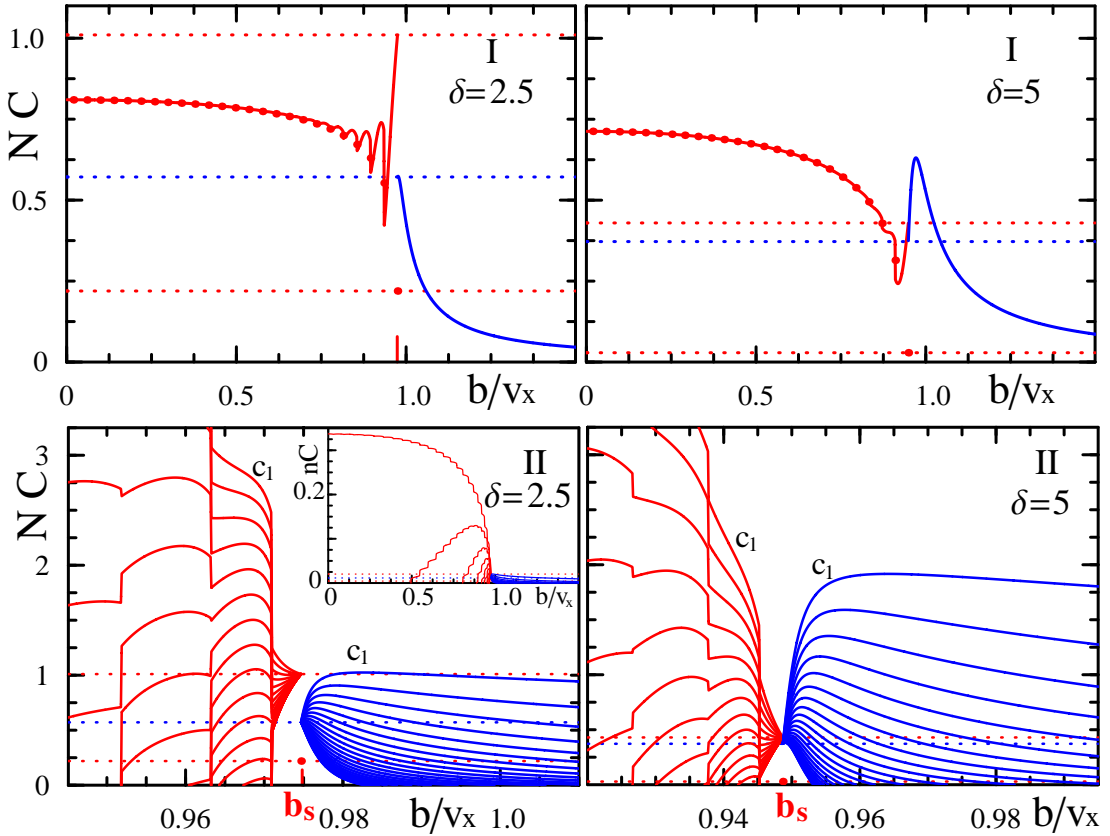


Figura 17: Los mismos detalles que en la Fig. 16 para $N = 50$ qubits. Los paneles inferiores representan los resultados en la vecindad de b_s , representándose en el recuadro el intervalo completo. Los valores límites en $b = b_s$ son nuevamente los mismos para todas las separaciones y son idénticos para ambos sistemas

rota con ángulo uniforme $\cos \theta = \sqrt{\chi}$ se volverá el estado fundamental exacto si $v^x > 0$ (si $v^x < 0$, el estado fundamental será $\theta^i = (-1)^i \theta$). Hemos fijado $\chi = 1 - \delta/(2Ns)$, tal que los límites laterales de la negatividad en b_s son aproximadamente independientes de s y N . En primer lugar se observa que el consiguiente comportamiento de \mathcal{N}_{1j} en términos del campo reescalado b/b_s es bastante similar para los tres valores de espín considerados ($s = 1/2, 1$ y $3/2$, el último involucrando una diagonalización en una base de 65536 estados para $N = 8$). El estado fundamental exhibe Ns transiciones de paridad al aumentar el campo desde 0^+ a b_s , de manera que última transición ocurre en b_s . Al acercarse a esta, se verifica que el rango del entrelazamiento de pares aumenta, con *todas* las negatividades aproximándose a límites laterales comunes (8.17), distintos a cada lado, dados aquí por $\mathcal{N}_{ij}^+ = \frac{1}{2}C_{ij}^+ \approx \frac{\delta e^{-\delta/2}}{2N(1+e^{-\delta/2})}$ (Ec. (8.27)) y $\mathcal{N}_{ij}^- \approx \frac{(C_{ij}^-)^2 e^{\delta/2}}{4p_{\mathcal{A}}^-} \approx \frac{\delta^2 e^{-\delta/2}}{4N^2(1-e^{-\delta/2})^2}$. Se origina así un intervalo alrededor b_s en el que el entrelazamiento de pares alcanza rango completo que involucra a su izquierda esencialmente el último estado antes de la transición (a grandes rasgos, un estado W). b_s juega en esta cadena pequeña el rol de un punto crítico cuántico. La Fig. 20 representa los resultados para una anisotropía mayor ($\delta = 7,5$). En este caso sólo las últimas dos

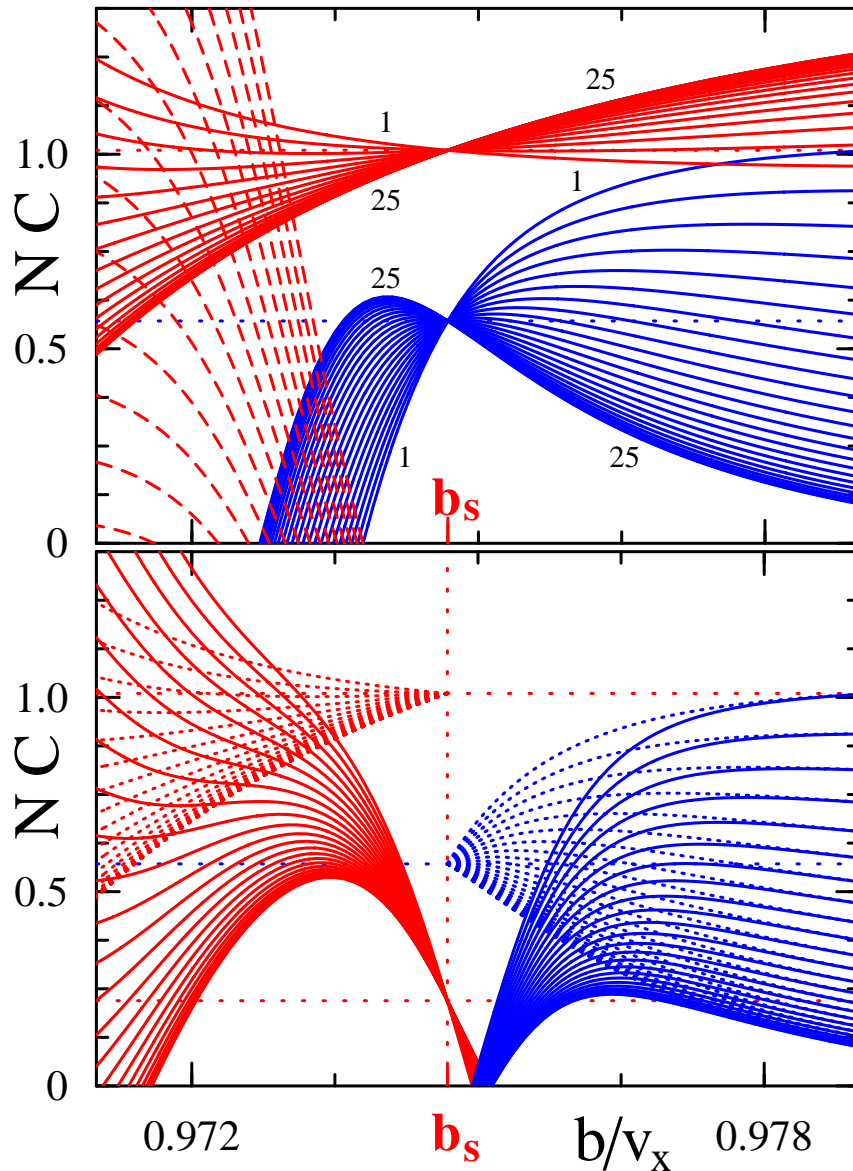


Figura 18: Arriba: Concurrencias reescaladas c_l en el estado más bajo para paridad P_z impar (curvas de arriba, en rojo) y par (curvas de abajo, en azul), para el caso II con $\delta = 2,5$ y $N = 50$. Los números indican la separación l . En $b = b_s$ ocurre una inversión en el orden de las c_l con l . Las líneas punteadas representan la concurrencia antiparalela en los estados pares. Abajo: Concurrencias térmicas en el sistema anterior a $kT = 5 \times 10^{-4}v^x$ (líneas sólidas) y a $T = 0$ (líneas punteadas).

transiciones de paridad son visibles en la negatividad. Los límites laterales comunes de \mathcal{N}_{ij}^{\pm} son menores y todas las negatividades exhiben un máximo a la derecha del campo factorizante. El comportamiento es entonces más similar al de las cadenas XY largas[29]. Sin embargo, existe aún un claro intervalo de rango completo de entrelazamiento alrededor de b_s , con límites laterales finitos en b_s cuando se observa en detalle (ver recuadro).

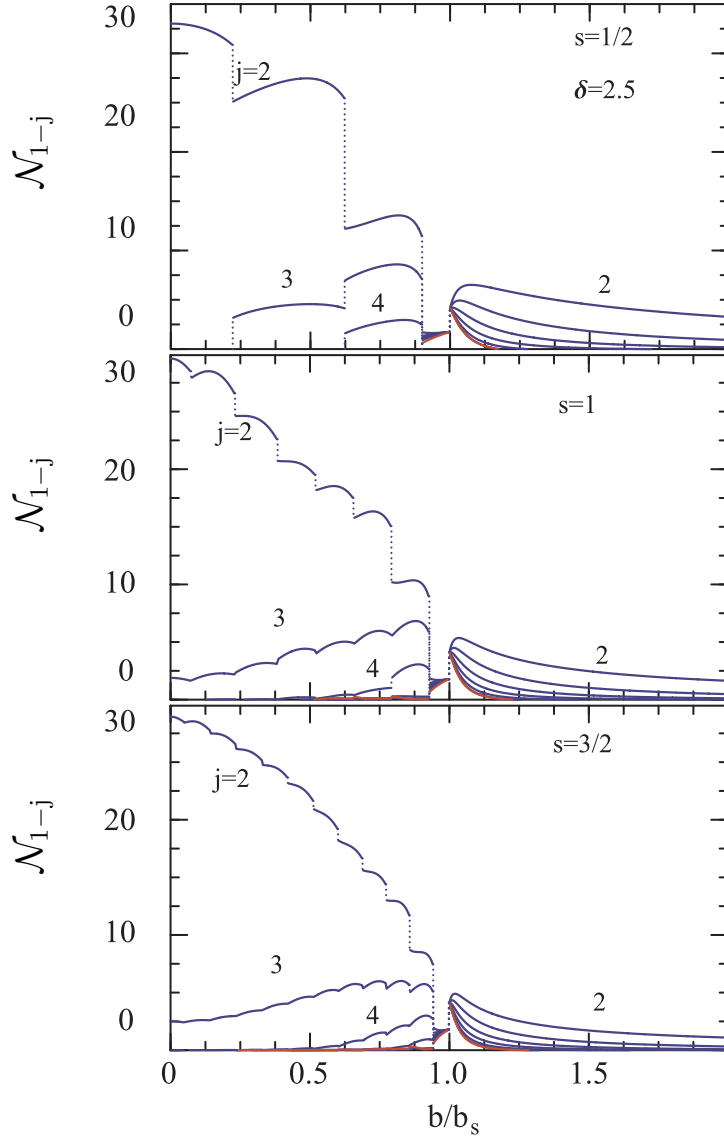


Figura 19: Negatividades entre el primer y el j^{mo} espín en una cadena abierta de espines s con acoplamiento XY, en función del campo magnético transversal b , con correcciones de borde (ver el texto), y tres diferentes valores de s . Hemos fijado el parámetro de anisotropía $v^y/v^x = 1 - \delta/(2sn)$, con $\delta = 2,5$ y $N = 8$ espines. El campo factorizante corresponde a la última transición de paridad, y es marcado como el campo en el que todas las negatividades se juntan, aproximándose a los dos distintos límites laterales comunes. La línea más baja (en rojo) representa la negatividad para los espines de los extremos (\mathcal{N}_{1-N}).

Los límites laterales en el campo factorizante en este sistema pueden en realidad ser modificados cambiando la relación entre los campos aplicados en los sitios pares e impares $\eta = b_e/b_o$, de acuerdo con la Ec. (8.28). Los resultados para la relación $\eta = 10$ (con las correcciones de borde pertinentes) son mostrados en la Fig. 21, donde la separabilidad es exactamente alcanzada para un campo $b_{os} = b_s/\sqrt{\eta}$ sobre los sitios impares. Nuevamente

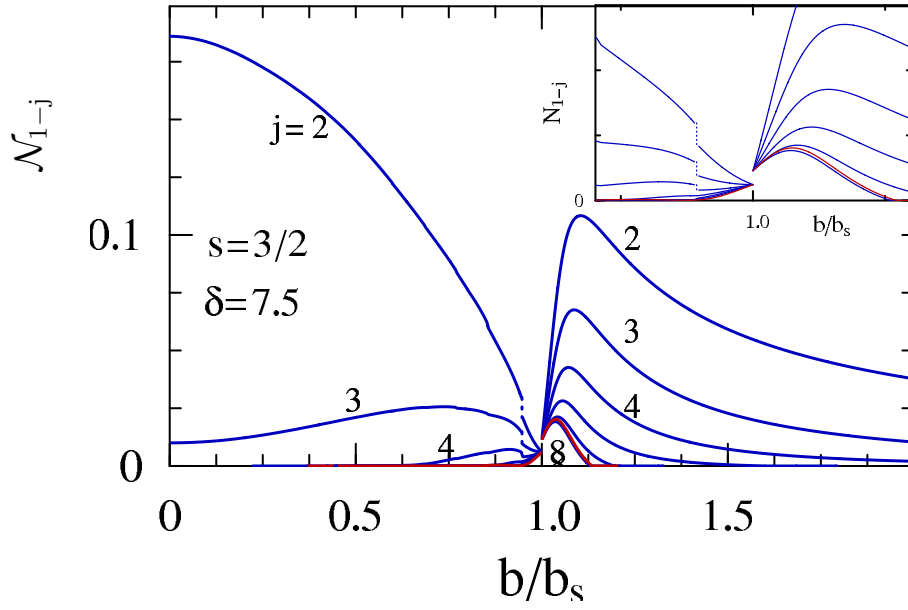


Figura 20: Los mismos detalles que en la Fig. (19) para $\delta = 7,5$ y $s = 3/2$. El recuadro representa el comportamiento en la vecindad del campo factorizante.

se han representado sólo las negatividades entre el primer y el j -ésimo espín, que ahora se aproximan a *dos* límites laterales comunes, uno para los j pares (\mathcal{N}_{oe}^{\pm}) y otro para los j impares (\mathcal{N}_{oo}^{\pm}). Mientras la primera llega a ser bastante pequeña, la última se vuelve claramente apreciable, efecto final de la gran desigualdad entre los dos campos, quedando entrelazados solamente los sitios impares en el entorno de este campo factorizante. Las negatividades entre sitios pares \mathcal{N}_{ee}^{\pm} (no mostradas) son por supuesto también muy pequeñas en b_{os} . Nótese finalmente que \mathcal{N}_{13} puede volverse mucho más grande que \mathcal{N}_{12} en la región entorno a b_{os} , a pesar de la ausencia de interacciones entre segundos vecinos.

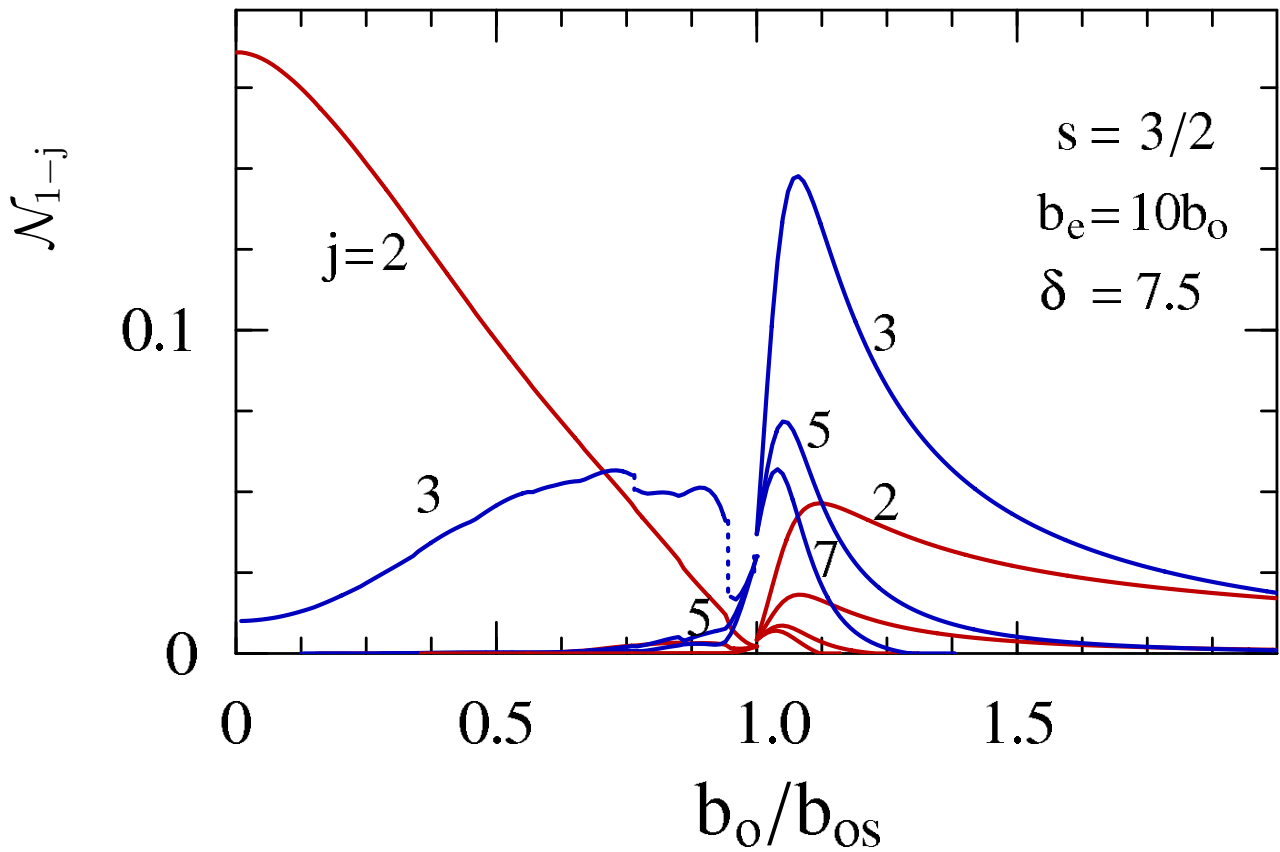


Figura 21: Los mismos detalles que en la Fig. (19) para $\delta = 7,5$, $s = 3/2$ y un campo alternante con una razón par/impar $b_e/b_0 = 10$. La línea roja (azul) representa el resultado para j par (impar).

Parte V
Conclusiones

9

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

A lo largo de esta tesis se analizaron diferentes aspectos del entrelazamiento en sistemas de muchos cuerpos. Se mostró como mediante la transformación de Hubbard–Stratonovich es posible construir diversas aproximaciones que permiten tratar el problema de evaluar el entrelazamiento entre subsistemas. Esto motivó una discusión sobre qué entendemos por entrelazamiento en sistemas de partículas y cómo podemos evaluarlo. Discutiremos ahora algunas de las principales conclusiones.

CSPA, CMFA y entrelazamiento de pares. En la segunda parte de la tesis hemos analizado el comportamiento térmico de la concurrencia de pares en redes de sistema de espines $1/2$ en presencia de un campo transverso. Se discutió la forma óptima en que deben tratarse los términos de autointeracción a fin de limitar tanto como sea posible el error en la aproximación [CSPA](#), lo que redundará en una mejora también a nivel [CMFA](#).

En sistemas con invarianza traslacional, se mostró cómo la [CMFA](#) puede evaluarse en forma exacta, involucrando sólo la diagonalización de matrices de 2×2 . Una particularidad de esta técnica es que, a diferencia de lo que ocurre en otras técnicas, los cálculos no se vuelven más complejos al considerar redes en dimensiones espaciales más grandes, ni al aumentar el alcance de las interacciones. También se discutió la razón por la cual estas aproximaciones mejoran al aumentar el alcance de las interacciones y también al aumentar la intensidad del campo magnético. En particular, en el límite asintótico de campos magnéticos intensos, la aproximación [RPA](#) se vuelve exacta, permitiendo determinar correctamente el alcance del entrelazamiento de pares. En el caso de [CSPA](#) la temperatura también juega un papel importante en la correcta convergencia de la técnica.

Vía la aplicación al modelo XYZ completamente conectado, se comprobaron estos resultados. La [CMFA](#) fue capaz de reproducir en este sistema algunas propiedades importantes del comportamiento del entrelazamiento. Entre ellas, el decrecimiento logarítmico de las temperaturas límite (para acoplamientos que escalan como $1/N$), y el decrecimiento (crecimiento) al aumentar el campo magnético en el sector antiparalelo (paralelo), extendiéndose esto para campos arbitrariamente grandes. Este comportamiento fue previamente observado para tamaños pequeños en las temperaturas límites para las negatividades globales, para las cuales la temperatura límite de pares provee una cota inferior. También se observó que en arreglos con interacciones XYZ anisotrópicas, los pares se vuelven estrictamente separables sólo dentro de una ventana de campo finita a cualquier temperatura, la cual colapsa a $T = 0$ en el campo factorizante. Se observó además que los efectos de tamaño finito empobrecen la aproximación [CMFA](#) sólo en el límite XXZ, que el tratamiento [CSPA](#) completo nos permite recuperar. En el estudio de redes invariantes traslacionales se observó también que la aproximación comienza a dar resultados aceptables cuando el alcance de la interacción es mayor que 2.

Tratamiento RPA bosónico. En el capítulo 7 se mostró como el método RPA es capaz de proveer, a través de la representación bosónica, un aproximación tratable general para estimar, en el estado fundamental de una red de espines, la entropía de entrelazamiento de cualquier bipartición así como las negatividades asociadas a cualquier bipartición de cualquier subsistema. La aproximación se vuelve completamente analítica en sistemas con invarianza traslacional, donde no se requiere ninguna diagonalización numérica para obtener las matrices de contracciones básicas.

El tratamiento bosónico proporciona esencialmente el comportamiento exacto del sistema en el límite de espín grande. Las correcciones para el caso de espín finito pueden ser tenidas en cuenta mediante el correspondiente estado RPA de espín, el cual permite en particular implementar los no despreciables efectos de la restauración de simetría de paridad, rota a nivel de campo medio, pero que de otra forma provee resultados que se encuentran en completo acuerdo con el tratamiento bosónico a primer orden en las ocupaciones medias locales. Estas últimas son normalmente muy pequeñas lejos de las regiones críticas. Mediante la aplicación directa de este método, se obtienen directamente expresiones analíticas simples para la entropía de entrelazamiento y las negatividades para un par de espines s y para una red de N espines s completamente conectada en un campo uniforme, pudiendo expresarse estas cantidades en función de las energías RPA. Se mostró que este tratamiento predice correctamente que la negatividad de subsistemas no diverge en el punto crítico, a diferencia de la negatividad de una bipartición del sistema completo, o la entropía de entrelazamiento.

El acuerdo con los resultados numéricos exactos confirma que la aplicabilidad del método mejora al aumentar el espín s o la conectividad del sistema, observándose diferencias sólo en un región en torno al punto crítico, que se reduce al aumentar s o la conectividad. Una predicción general de importancia que surge de este tratamiento es que el entrelazamiento relacionado con las excitaciones elementales se aproxima a valores no nulos, independientes del espín a medida que el espín crece. Un régimen cuántico RPA, caracterizado por un entrelazamiento débil, emerge entonces entre el régimen estrictamente clásico y el cuántico fuertemente correlacionado.

El presente tratamiento puede ser aplicado también para la evaluación de negatividades y entropías de entrelazamiento para particiones arbitrarias en sistemas con interacciones de alcance arbitrario; en particular, una aplicación para la estimación de la entropía de entrelazamiento total para particiones “par-impar” en redes con interacciones de primeros vecinos ha sido realizada, y actualmente se encuentra en proceso de publicación [1].

Campos factorizantes. La aproximación RPA motivó el estudio detallado de este fenómeno. Hemos mostrado que la misma logra predecir el campo factorizante exacto así como las peculiares propiedades del entrelazamiento en su vecindad; en particular, el entrelazamiento de pares - y por lo tanto el de subsistemas arbitrarios - adquiere alcance completo en esa vecindad, alcanzando valores próximos a los máximos que admite la condición de monogamia, en el límite XXZ. En el caso de sistemas con simetría de paridad, fueron determinadas las condiciones rigurosas para su existencia, observándose que puede ser originado por diversas configuraciones del campo externo. De esta manera, se mostró que es posible “controlar” la distribución del entrelazamiento para un conjunto de acoplamientos determinados. Se observó además que el entrelazamiento en estas condiciones puede ser

descrito en términos de la “conurrencia”, ya que el estado local de cualquier subsistema se puede representar dentro de un espacio de Hilbert efectivo de 2×2 estados.

Perspectivas

Quedan sin embargo algunas preguntas abiertas. En primer lugar, el éxito de la aproximación [CSPA](#) plantea la pregunta de si es posible mejorar la convergencia en cálculos numéricos Monte Carlo al incluir el factor curvatura local (Ec. (4.8)) dentro del factor de peso estadístico: esto permitiría reducir el error en las integrales originado por la dispersión del integrando. Otra idea que también está en desarrollo es la posibilidad de evaluar directamente cantidades como la negatividad o la entropía de bloques mediante la aproximación Gaussiana de la traspuesta y de la traza parcial respectivamente de la integral exacta de Hubbard-Stratonovich, para recuperar luego el resultado en la aproximación Gaussiana. Se puede ver que en el caso de la traspuesta parcial, el problema [RPA](#) generalizado duplica la dimensión del problema [RPA](#) usual, ya que ahora el problema ya no es “local” en el “tiempo-euclídeo”.

Respecto a [RPA](#), algunas líneas sobre las que estamos trabajando actualmente están relacionadas con la idea de mejorar la aproximación al redefinir la “celda unidad”. En dimensión > 1 , esto no sólo mejora la aproximación al tener en cuenta en forma más precisa el entrelazamiento local, sino que además la conectividad entre las nuevas celdas es en general mayor que la de las celdas originales. También queda pendiente analizar la posibilidad de extender el esquema de bosonización [RPA](#) en el caso térmico, tema que también estamos desarrollando actualmente.

Parte VI
Apéndices

A

SISTEMAS INTEGRABLES EXACTAMENTE

En este apéndice, discutiremos algunos resultados exactos para los sistemas de espines que se utilizaron para comprobar las técnicas de aproximación usadas en el texto: el modelo de Lipkin y la cadena de primeros vecinos. Estos modelos representan dos casos límite en lo que respecta al rango de la interacción, pero que coinciden en el caso de sistemas de dos y tres espines.

A.1 El modelo de Lipkin-Meshkov-Glick

El modelo de LMG es descrito por el Hamiltoniano definido en la Ec. (5.16). Es posible reescribir este hamiltoniano en términos de las componentes del espín total $S_\mu = \sum_{i=1}^N S_{\mu i}$:

$$H = bS_z - \frac{1}{\hbar} \sum_{\mu} v_{\mu} (S_{\mu}^2 - N/4) \quad (\text{A.1})$$

por lo tanto, conmuta con el operador espín total $J^2 = S_{\mu} S^{\mu}$, con autovalores $j(j+1)$. Sin pérdida de generalidad podemos asumir $|v_y| \leq |v_x|$ y $b \geq 0$. Vamos a considerar aquí el caso atractivo $v_x > 0$ (con $|v_y| \leq v_x$) donde el estado fundamental tendrá espín máximo $S = n/2$. Como H es completamente simétrico y conmuta tanto con S^2 como con la paridad $S_z P = \exp[i\pi(S_z/\hbar + N/2)]$ (que representa una fase global) la función de partición a temperatura $T = \beta^{-1}$ (fijamos la constante de Boltzmann a $k = 1$) puede escribirse como

$$Z = \text{Tr} \exp[-\beta H] = \sum_{S=\delta_N}^{N/2} Y(S) \sum_{\nu=\pm, k} e^{-\beta E_{S k \nu}}, \quad (\text{A.2})$$

donde $Y(S) = \binom{N}{N/2-S} - \binom{N}{N/2-S-1}$, con $Y(N/2) = 1$, es la multiplicidad de estados con espín total S , tal que $\sum_{S=\delta_N}^{n/2} Y(S)(2S+1) = 2^N$ [$\delta_N = 0$ ($\frac{1}{2}$) para N par (impar)] y $E_{S k \nu}$ son los autovalores de H con espín total S y paridad ν [$k = 1, \dots, S + \frac{1}{2} + \nu(\frac{1}{2} - \delta_N)$]. Se debe notar que en la realización fermiónica [62], las multiplicidades $Y(S)$ serían diferentes (el número total de estados en el sistema fermiónico a medio llenado es $\binom{2N}{N}$ en vez de 2^N). El entrelazamiento de pares a $T > 0$ es determinado por la matriz densidad reducida de dos espines $\rho_{ij} = \text{tr}_{n-\{ij\}}[\rho]$ ($i \neq j$), donde $\rho = Z^{-1} \exp[-\beta H]$ es la matriz densidad global. En el presente sistema ρ_{ij} será la misma para cualquier par, y conmutará con el operador de

paridad local $\exp[i\pi(S_z^i + S_z^j + 1)]$ y el espín total $\sum_\mu (S_\mu^i + S_\mu^j)^2$, siendo en la base estándar de la forma

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} p_+ & 0 & 0 & \alpha_+ \\ 0 & p_0 & \alpha_- & 0 \\ 0 & \alpha_- & p_0 & 0 \\ \alpha_+ & 0 & 0 & p_- \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \alpha_\pm &= \langle S_+^i S_\pm^j \rangle = \alpha_x \mp \alpha_y \\ p_\pm &= \frac{1}{4} + \alpha_z \pm \langle S_z \rangle \hbar^{-1} \\ p_0 &= \frac{1}{4} - \alpha_z \end{aligned}$$

donde $S_\pm^i = S_x^i \pm iS_y^i$ y $(\mu = x, y, z)$

$$\alpha_\mu \equiv \langle S_\mu^i S_\mu^j \rangle \hbar^{-2} = \frac{T}{n-1} \frac{\partial \ln Z}{\partial v_\mu} \quad (i \neq j), \quad (\text{A.3})$$

$$\langle S_z \rangle \equiv \langle S_z^i \rangle = -\frac{T}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial b}. \quad (\text{A.4})$$

Nótese que $-\frac{1}{4(N-1)} \leq \alpha_\mu \leq \frac{1}{4}$ y que $\langle S_\mu^2 \rangle = \frac{N}{4} + n(N-1)\alpha_\mu$. Como la matriz densidad de subsistema es de la forma (2.34) la concurrencia puede evaluarse según las expresiones (2.35). Ya que todos los pares son igualmente entrelazados, el máximo valor que puede alcanzar C en el presente sistema es $2/n$ [64] (alcanzado por ejemplo en el estado $W |SM\rangle = |\frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1\rangle$) implicando que sólo la concurrencia reescalada $c = NC$ puede mantenerse finita en el límite termodinámico $n \rightarrow \infty$.

El límite XXZ

Cuando $v_x = v_y = v$ la diagonalización de cada uno de los multipletes con J definido puede realizarse exactamente, ya que en cada multiplete, el valor de S_z estará bien definido, con autovalores $m - \delta_n$ para m enteros tales que $-S \leq m \leq S$ en cada multiplete, siendo la paridad de los correspondientes estados igual a la paridad de m . La energía de tales estados vendrá dada por

$$\begin{aligned} E_{S m} &= b(m - \delta_n) - vs(s+1) + (v - v_z)(m - \delta_n)^2 + \frac{2v + v_z}{4} \\ &= (v - v_z) \left(m - \delta_n + \frac{b}{2(v - v_z)} \right)^2 - vs(s+1) + \frac{2v + v_z}{4} - \frac{b^2}{4(v - v_z)} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

De esta forma la Ec. (A.2) se reduce a

$$Z = e^{-\beta \frac{2v+v_z}{4} + \beta \frac{b^2}{4(v-v_z)}} \sum_{S=\delta_n}^{n/2} Y(S) e^{\beta vs(s+1)} \sum_{m=\delta_n-s}^{s-\delta_n} e^{-\beta(v-v_z)(m-m_0)^2}, \quad (\text{A.6})$$

siendo $m_0 = \delta_n - \frac{b}{2(v-v_z)}$. De esta manera, para el caso atractivo, si $b > v - v_z > 0$, el estado fundamental es un estado completamente alineado con el campo externo, de forma que en esa región de parámetros, el entrelazamiento será necesariamente térmico.

A.2 Hamiltonianos fermiónicos cuadráticos

Los sistemas de fermiones surgen naturalmente cuando tratamos con excitaciones que satisfacen el principio de exclusión de Pauli y son representados en términos de observables que cierran álgebras fermiónicas. Un álgebra fermiónica consiste en un conjunto de operadores f_i y f_i^\dagger que satisfacen relaciones de anticonmutación canónicas

$$\{f_i, f_j\} = \{f_i^\dagger, f_j^\dagger\} = 0 \quad \{f_i, f_j^\dagger\} = \mathbf{1}_i^j \quad (\text{A.7})$$

donde $\{A, B\} = A.B + B.A$ es el anticonmutador de los operadores A y B . Por las relaciones de conmutación, cualquier producto de operadores fermiónicos en los que se repita alguno de los operadores, se anula. Un hamiltoniano fermiónico cuadrático general tiene la forma

$$H_f = \sum_i \varepsilon_i f_i^\dagger f_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (V_{ij}^+ f_i^\dagger f_j + V_{ij}^- f_i^\dagger f_j^\dagger + h.c.) \quad (\text{A.8})$$

Para diagonalizar esta clase de hamiltonianos, observamos que H_F puede escribirse explícitamente como la forma cuadrática

$$H_{JW} = \frac{1}{2} \mathcal{Z}^\dagger \mathcal{H} \mathcal{Z} + \frac{\sum_i \varepsilon_i}{2} \quad (\text{A.9})$$

donde \mathcal{Z} es un "vector columna" de componentes $\begin{pmatrix} f_i \\ f_i^\dagger \end{pmatrix}$, mientras que

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_i \mathbf{1}_{ij} + V_+(i)(\mathbf{1}_{i+1;j} + \mathbf{1}_{ij+1}) & V_-(i) \mathbf{1}_{i+1;j} \\ V_-^*(i) \mathbf{1}_{j;i-1} & -\varepsilon_i \mathbf{1}_{ij} - V_+(i)(\mathbf{1}_{i+1;j} + \mathbf{1}_{ij+1}) \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

\mathcal{H} es hermítica, y por lo tanto es expresable como $U^\dagger \Lambda U$ con U una matriz unitaria

$$U = \begin{pmatrix} \mathcal{U} & \mathcal{V} \\ \mathcal{V}^* & \mathcal{U}^* \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

y Λ una matriz diagonal. Si ahora llamamos $\tilde{\mathcal{Z}} = \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = U \mathcal{Z}$, vemos que a y a^\dagger cierran nuevamente relaciones de conmutación fermiónicas. Por lo tanto, podemos reescribir H_F como

$$\begin{aligned} H_F &= \frac{1}{2} \tilde{\mathcal{Z}}^\dagger U^\dagger \Lambda U \mathcal{Z} + \frac{\sum_i \varepsilon_i}{2} \\ &= \sum_k \lambda_k \left(a_k^\dagger a_k - \frac{1}{2} \right) + \frac{\epsilon_k}{2} \end{aligned}$$

con λ_k los autovalores positivos de \mathcal{H} . El estado fundamental de este hamiltoniano es simplemente el vacío de las excitaciones a_k , con energía $E_0 = -\sum_k \frac{\lambda_k - \epsilon_k}{2}$. Los observables de la teoría pueden ahora construirse reescribiendo los operadores fermiónicos originales (f, f^\dagger) en términos de los nuevos (a, a^\dagger) .

A.3 La cadena de espín 1/2 XY con interacciones a primeros vecinos

Este modelo ha sido ampliamente estudiado ya que es uno de los pocos modelos solubles en baja dimensión, evaluable en el límite termodinámico, que presenta transiciones de fase tanto a nivel clásico como a nivel cuántico. En años recientes, se han podido implementar experimentalmente varios sistemas análogos, que permitirían implementar ciertas tareas de computación cuántica [84, 90], de manera que la solución de este problema comienza a tener además una aplicación práctica directa. En [60], Lieb, Schultz y Mattis analizaron en detalle esta clase de sistemas. En este apartado presentaremos sus principales resultados. El hamiltoniano del modelo viene dado por

$$H = \sum_i b(i) S_z(i) - \frac{v_x(i)}{\hbar} S_x(i) S_x(i+1) - \frac{v_y(i)}{\hbar} S_y(i) S_y(i+1) \quad (\text{A.12})$$

con $S_\mu(i)$ la componente μ del espín en el sitio i -ésimo. Este modelo admite una solución exacta a través de la transformación de Jordan - Wigner

$$S_+(i) = \hbar f_i^\dagger \mathcal{P}_i = S_-^\dagger(i) \quad (\text{A.13})$$

$$S_z(i) = \hbar(f_i^\dagger f_i - 1/2) \quad (\text{A.14})$$

$$\mathcal{P}_i = \prod_{k<i} \left(\frac{2}{\hbar} S_z(k)\right) = \prod_{k<i} (1 - 2f^\dagger(k) f_k) \quad (\text{A.15})$$

donde f_i, f_j^\dagger son operadores que cierran el álgebra fermiónica $[f_i, f_j]_+ = [f_i^\dagger, f_j^\dagger]_+ = 0$, $[f_i, f_j^\dagger]_+ = \mathbf{1}_{ij}$ y \mathcal{P}_i son operadores *no locales*, hermíticos y unitarios (y por lo tanto idempotentes), que conmutan con cualquier $S_z(j)$. En primer lugar, es fácil verificar que este mapeo genera el álgebra de espín:

$$\begin{aligned} [S_z(i), S_+(j)] &= \hbar^2 [f_i^\dagger f_i, f_j^\dagger \mathcal{P}_k] \\ &= \hbar^2 [f_i^\dagger f_i, f_j^\dagger] \mathcal{P}_k \\ &= \hbar^2 \left((f_i^\dagger f_i f_j^\dagger - f_j^\dagger f_i^\dagger f_i) \mathcal{P}_k \right) \\ &= \hbar^2 \left((f_i^\dagger f_i f_j^\dagger - f_i^\dagger f_i f_j^\dagger + f_i^\dagger \mathbf{1}_{ij}) \mathcal{P}_k \right) \\ &= \hbar \mathbf{1}_{ij} S_+(i) \end{aligned}$$

luego

$$[S_z(i), S_-(j)] = -\mathbf{1}_{ij} \hbar (S_-(i))$$

y finalmente,

$$\begin{aligned} [S_+(i), S_-(j)] &= \hbar^2 [f_i^\dagger \mathcal{P}_i, \mathcal{P}_j f_j] \\ &= \hbar^2 \left(f_i^\dagger \mathcal{P}_i \mathcal{P}_j f_j - \mathcal{P}_j f_j f_i^\dagger \mathcal{P}_i \right) \\ &= \hbar^2 \left(f_i^\dagger \mathcal{P}_i \mathcal{P}_j f_j + \mathcal{P}_j f_i^\dagger f_j \mathcal{P}_i - \mathcal{P}_j \mathcal{P}_i \mathbf{1}_{ij} \right) \\ &= \hbar^2 \left(\mathcal{P}_i f_i^\dagger f_j \mathcal{P}_j + \mathcal{P}_j f_i^\dagger f_j \mathcal{P}_i - \mathbf{1}_{ij} \right) \end{aligned}$$

consideremos ahora los dos casos: 1) $i = j$

$$[S_+(i), S_-(i)] = \hbar^2(2f_i^\dagger f_i - 1) = -2\hbar S_z(i)$$

2) $i \neq j$

$$\begin{aligned} [S_+(i), S_-(j)] &= \hbar^2 \left(\mathcal{P}_i \mathcal{P}_j (1 - 2f_i^\dagger f_i) f_i^\dagger f_j + \mathcal{P}_i \mathcal{P}_j f_i^\dagger f_j \right) \\ &= \hbar^2 \left(2\mathcal{P}_i \mathcal{P}_j (1 - f_i^\dagger f_i) f_i^\dagger f_j \right) \\ &= \hbar^2 \left(2\mathcal{P}_i \mathcal{P}_j f_i^\dagger (1 - f_i f_i^\dagger) f_j \right) \\ &= \hbar^2 \left(2\mathcal{P}_i \mathcal{P}_j f_i^\dagger (f_i^\dagger f_i) f_j \right) = \hbar^2 \left(2\mathcal{P}_i \mathcal{P}_j (f_i^\dagger f_i) f_i f_j \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Para completar la equivalencia, hacemos corresponder al estado de vacío fermiónico $b|0\rangle = 0$ con el estado de espín completamente alineado en contra del campo magnético $|-N/2\rangle$.

Con esta transformación, el Hamiltoniano (A.12) se mapea a un hamiltoniano fermiónico cuadrático

$$H_{JW} = \hbar \sum_i \left((b(i) f_i^\dagger f_i - \frac{1}{2}) - \frac{v_+(i)}{2} f_i^\dagger f_{i+1} - \frac{v_-(i)}{2} f_i^\dagger f_{i+1}^\dagger + h.c \right) - \quad (\text{A.16})$$

$$+ \hbar \mathcal{P} \left(\frac{v_+(N)}{2} f_N^\dagger f_1 + \frac{v_-(N)}{2} f_N^\dagger f_1^\dagger + h.c \right) \quad (\text{A.17})$$

con $v_\pm(i) = \frac{v_x(i) \pm v_y(i)}{2}$ y $\mathcal{P} = \mathcal{P}_N$ el operador paridad total. Si la cadena es abierta, el último término no está presente y el hamiltoniano es diagonalizable en forma analítica. En la cadena cíclica, el último término corresponde a un acoplamiento de N cuerpos. Sin embargo, como H_{JW} conmuta con la paridad total \mathcal{P} , es posible, dentro de cada subespacio de paridad definida, tratar a \mathcal{P} como un número (± 1), lo que nos permite reescribir H_{JW} como

$$H_{JW} = P^+ H_{JW}^+ P^+ + P^- H_{JW}^- P^- \quad (\text{A.18a})$$

$$H_{JW}^\pm = \hbar \sum_i \left((b(i) f_i^\dagger f_i - \frac{1}{2}) - \frac{v_+(i)}{2} f_i^\dagger f_{i+1} - \frac{v_-(i)}{2} f_i^\dagger f_{i+1}^\dagger + h.c \right) \mp \quad (\text{A.18b})$$

$$\mp \hbar \left(\frac{v_+(N)}{2} f_N^\dagger f_1 + \frac{v_-(N)}{2} f_N^\dagger f_1^\dagger + h.c \right) \quad (\text{A.18c})$$

$$P^\pm = \frac{\mathbf{1} \pm \mathcal{P}}{2} \quad (\text{A.18d})$$

H^\pm puede diagonalizarse por medio de una transformada de Fourier dependiente de paridad [91] $c_j^\dagger = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{N}} \sum_{k \in K_\pm} e^{-i\omega_{kj}} c_k'^\dagger$, donde $K_+ = \{\frac{1}{2}, \dots, N - \frac{1}{2}\}$, $K_- = \{0, \dots, N - 1\}$ (esto es, k semienteros (enteros) en el subespacio de paridad par (impar)), seguida de una transformación canónica (ver Sec. anterior) $c_k'^\dagger = u_k a_k^\dagger + v_k a_{n-k}$, $c_{n-k}' = u_k a_{n-k} - v_k a_k^\dagger$, con

$u_k^2, v_k^2 = \frac{1}{2}[1 \pm (b - v_+ \cos \omega_k)/\lambda_k]$ y a_k, a_k^\dagger un nuevo conjunto de operadores fermiónicos. Para $b \geq 0$ fijamos $\lambda_k \geq 0$ para $k \neq 0$ y $\lambda_0 = v_+ - b$, de forma que el vacío de cuasipartículas en H_{II}^- es par y de energía mínima para cada paridad. Las energías mínimas en cada subespacio de paridad resultan entonces $E_{II}^\pm = -\frac{\hbar}{2} \sum_{k \in K_\pm} \lambda_k$. En el campo factorizante $b = b_s = \sqrt{v_x v_y}$ (Ec. (5.40)), $\lambda_k = v_+ - b_s \cos \omega_k$ y $E_{II}^+ = E_{II}^- = -\frac{\hbar}{2} N v_+$, en total acuerdo con la Ec. (8.6). Las concurrencias asociadas a los vacíos con paridad definida pueden obtenerse en términos de las contracciones fermiónicas $f_l \equiv \langle c_l^\dagger c_j \rangle_\pm - \frac{1}{2} \mathbf{1}_{ij}$, $g_l \equiv \langle c_l^\dagger c_j^\dagger \rangle_\pm$ mediante el uso del teorema de Wick [60], obteniéndose $\langle s_z^i \rangle = \hbar f_0$, $\langle s_z^i s_z^j \rangle = \hbar(f_0^2 - f_l^2 + g_l^2)$ y $\alpha_l^\pm = \frac{\hbar}{4}[\det(A_l^+) \mp \det(A_l^-)]$, con $(A_l^\pm)_{ij} = 2(f_{i-j\pm 1} + g_{i-j\pm 1})$ matrices de $l \times l$.

B | ALGUNAS TÉCNICAS DE APROXIMACIÓN

En este apéndice repasaremos algunas técnicas de aproximación mencionada en el texto.

B.1 Métodos perturbativos

Consideremos un sistema cuyo Hamiltoniano H no es tratable exactamente, pero conocemos otro Hamiltoniano similar H_0 que si lo es. Definamos

$$H_\lambda = H_0 + \lambda(H - H_0) \quad (\text{B.1})$$

de forma que $H_1 = H$. Si ahora suponemos que los objetos que nos interese calcular (sus autoestados o su función de partición, por ejemplo) son funciones *analíticas* del parámetro λ , será posible expresarlos como un desarrollo en serie de potencias de λ , y eventualmente ser bien aproximados por el valor asociado a H_0 más unas pocas correcciones $\mathcal{O}(\lambda^n)$. Por ejemplo, si H_0 no presenta degeneración en su estado fundamental, la energía y el estado fundamental de H_λ vendrán dados por

$$E_\lambda^{(GS)} = E_0^{(GS)} + \lambda \langle V \rangle_0 - \lambda^2 \sum_k' \frac{|\langle 0|V|k\rangle_{GS}|^2}{E_0^{(k)} - E_0^{GS}} + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (\text{B.2})$$

$$|GS\rangle_\lambda = |GS\rangle_0 + (E_0^{(GS)} - H_0)^{-1} \lambda V |GS\rangle_0 + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (\text{B.3})$$

donde $V = H - H_0$ y la suma corre sobre k tal que $E_0^{(k)} \neq E_0^{(GS)}$ ¹. Típicamente, H_0 es una suma de hamiltonianos de partículas independientes (una combinación lineal de operadores locales) y V es una interacción entre estas partículas. De esta manera, $|GS\rangle_0$ será un estado separable, por lo que las propiedades de entrelazamiento del estado quedarán determinadas por las correcciones. Esta aproximación presenta varias dificultades. La más básica consiste en que eventualmente, para algún valor de λ , puede ocurrir un cruce de niveles. En ese caso es necesario remplazar $|GS\rangle_0$ por algún $|k\rangle_0$ adecuado. Una segunda dificultad está relacionada con la evaluación de observables cuyos valores medios son $\mathcal{O}(\lambda^2)$.

Una forma más simple de construir el estado fundamental (o, si el estado fundamental es degenerado, la mezcla estadística de todos los estados en ese subespacio) es a partir de obtener el límite $\lim_{\beta \rightarrow \infty} \rho_\lambda(\beta)$, donde

$$\rho_\lambda(\beta) = Z^{-1} \exp(-\beta H_\lambda) \quad Z = \text{tr} [\exp(-\beta H_\lambda)] \quad (\text{B.4})$$

¹ Si el Hamiltoniano tiene un **GS** degenerado, todavía es posible elegir la base de estados $|k\rangle_0$ de manera que dentro de cada subespacio degenerado $\langle k|V|k'\rangle$ sea diagonal, y eligiendo $|GS\rangle_0$ de manera que $E_\lambda^{(GS)}$ sea mínima.

es la matriz densidad para el sistema en equilibrio térmico a temperatura $T = 1/\beta$. Naturalmente, si el estado fundamental no es degenerado, $\lim_{\beta \rightarrow \infty} \rho(\beta) = |GS\rangle\langle GS|_1$. Obtener el operador densidad de equilibrio térmico para un sistema con interacciones es en general un problema intratable. Sin embargo, podemos desarrollar $\rho_\lambda(\beta) = \exp(-\beta H_\lambda)/Z_\lambda$ en torno a $\lambda = 0$, observando que

$$\frac{d}{d\beta} e^{\beta H_0} e^{-\beta H_\lambda} = e^{\beta H_0} (H_0 - H_\lambda) e^{-\beta H_\lambda} \quad (\text{B.5})$$

$$= -\lambda \tilde{V}(\beta) \exp(\beta H_0) \rho_\lambda(\beta) \text{ con} \quad (\text{B.6})$$

$$\tilde{V}(\tau) = e^{\tau H_0} (H - H_0) e^{-\tau H_0} \quad (\text{B.7})$$

De esta manera,

$$e^{\beta H_0} e^{-\beta H_\lambda} = \mathcal{T} \exp\left(-\lambda \int_0^\beta \tilde{V}(\tau) d\tau\right) = 1 - \lambda \int_0^\beta \tilde{V}(\tau) d\tau + \lambda^2 \int_0^\beta \int_0^\tau \tilde{V}(\tau) \tilde{V}(\tau') d\tau' d\tau + \mathcal{O}^3(\lambda)$$

donde \mathcal{T} representa el operador *Orden temporal*, de manera que finalmente obtenemos

$$\rho_\lambda(\beta) = \frac{Z_0}{Z_\lambda} \rho_0 \mathcal{T} \exp\left(-\lambda \int_0^\beta \tilde{V}(\tau) d\tau\right) \quad (\text{B.8a})$$

$$\frac{Z_\lambda}{Z_0} \approx \exp\left(-\beta\lambda \left(\langle \tilde{V}(\tau) V(0) \rangle_0 - \langle V \rangle_0^2\right) d\tau + \mathcal{O}^3(\lambda)\right) \quad (\text{B.8b})$$

$\langle \tilde{V}(\tau) V(0) \rangle_0 - \langle V \rangle_0^2$ es la correlación “temporal” (en tiempo imaginario) de las fluctuaciones de la perturbación, evaluada en el sistema sin interacciones².

El principal problema de este desarrollo es que, como se hace evidente en la Ec. (B.8), el verdadero parámetro perturbativo no es λ sino $\beta\lambda$, lo que frustra en general la expansión en el límite $\beta \rightarrow \infty$. La raíz de esta limitación radica en parte en el hecho de que, en sistemas con interacciones de corto alcance, las correlaciones de largo alcance aparecen como términos de orden alto en $\beta\lambda$. Una forma de salvar en parte esta dificultad se basa en aplicar técnicas de renormalización a la teoría de perturbaciones. Las técnicas de renormalización permiten re-sumar sub-series de términos a todo orden en $\beta\lambda$, y reescribirlos como cambios en las constantes de acoplamiento. Si bien por este camino es posible recuperar algunos observables clásicos, en general es insuficiente a la hora de realizar estimaciones de observables de entrelazamiento.

B.2 Métodos variacionales

Uno de los problemas que presentan los desarrollos perturbativos está relacionada con que el estado de partida $|GS\rangle_0$ (ρ_λ) no es un estado que aproxime adecuadamente al verdadero estado fundamental (estado de equilibrio térmico) del sistema.

² Esta expansión también es válida si reemplazamos $\exp(-\beta H_\lambda)$ por $\mathcal{T} \exp(-\int_0^\beta H_\lambda(\tau) d\tau)$, con H_0 independiente de τ .

Una manera diferente de encarar el problema se basa en reformular el problema como un problema variacional.

Si lo que buscamos es el **GS** del sistema, su reformulación es inmediata: por definición,

$$E_{GS} = \langle GS|H|GS \rangle \leq \langle \phi|H|\phi \rangle = \langle E \rangle_\phi \quad \forall |\phi\rangle$$

Por otro lado, un estado de equilibrio térmico satisface las *desigualdades de Bogoliubov*, esto es, $\rho_{Eq} \propto \exp(-\beta H)$ es aquél que minimiza la funcional *Energía Libre* [92] sobre los estados del sistema con energía media definida:

$$F[\rho] = \text{tr} \left[\left(H + \frac{1}{\beta} \ln \rho \right) \rho \right] > F[\rho_E] = -\frac{1}{\beta} \ln \text{tr} [\exp(-\beta H)] \quad (\text{B.9})$$

Demostración: Para ver esto, notamos primero que

$$F[\rho_{Eq}] = -\frac{1}{\beta} \ln \text{tr} [\exp(-\beta H)] \quad (\text{B.10})$$

y $H = -\frac{1}{\beta} \ln \rho_{Eq} + F[\rho_{Eq}]$. Remplazando en (B.9),

$$F[\rho] = \frac{1}{\beta} \text{tr} [(-\ln \rho_{Eq} + \ln \rho) \rho] + F[\rho_{Eq}] \quad (\text{B.11})$$

que es, a menos de una constante, una cantidad proporcional a la entropía relativa (Ec. (3.1)) del estado de equilibrio respecto de un estado ρ arbitrario.

Veamos ahora que el primer término es definido positivo. Para ello, vamos a considerar una base $|r\rangle$ de autoestados de ρ . De esta manera,

$$\text{tr} [(-\ln \rho_H + \ln \rho) \rho] = \sum_r p_r (\ln p_r - \ln \tilde{p}_r) = \sum_r p_r \ln(p_r / \tilde{p}_r)$$

donde $p_r = \langle r|\rho|r\rangle$ y $\tilde{p}_r = \langle r|\rho_{Eq}|r\rangle$ luego, usando la desigualdad $\ln(x) = \int_x^1 \frac{dt}{t} \geq -\int_x^1 \frac{dt}{t^2} = 1 - 1/x$, tenemos que

$$\text{tr} [(-\ln \rho_H + \ln \rho) \rho] \geq \sum_r \ln(p_r - \tilde{p}_r) = 0$$

que es lo que queríamos demostrar.

La reformulación en términos de un problema variacional nos permite buscar el estado que mejor aproxime al **GS** o al estado de equilibrio térmico ρ_{eq} , dentro de una familia de estados restringida, donde la evaluación de $\langle E \rangle_0$ y $F[\rho]$ sea un problema tratable.

Una aproximación variacional presenta varias ventajas respecto de un tratamiento perturbativo. Para empezar, el resultado de una aproximación variacional siempre es un estado físico, y la estimación del valor medio de la energía es un valor posible para el sistema. En un desarrollo perturbativo, por otro lado, la estimación de la energía puede ser divergente,

pudiendo tomar valores por debajo de la energía mínima del sistema. Lo mismo que con la energía, en general la estimación de las correlaciones obtenidas por medio de la teoría de perturbaciones pueden alcanzar valores que no son posibles para ningún estado del sistema. En la expansión térmica, además, el desarrollo perturbativo da en general estados con probabilidades no necesariamente definidas positivas y en general no hermíticos.

Por otro lado, en un esquema variacional, la estimación de la energía y de las correlaciones serán tan buenas como lo permitan el conjunto de estados de prueba. Si en un desarrollo perturbativo las correlaciones entre sitios no conectados por la interacción sólo surgen al desarrollar a un orden suficientemente alto, en una aproximación variacional bien pueden no ocurrir nunca.

Una método muy utilizado que se basa en el principio variacional consiste en buscar una aproximación al estado fundamental (estado de equilibrio térmico) dentro de los *estados producto* $|\phi\rangle = \otimes_i |\phi\rangle_i$ ($\rho = \otimes_i \rho_i$). Esta técnica es conocida como la **MFA**, y al estado $|\phi\rangle$ (ρ) que minimiza $\langle E \rangle_{|\phi\rangle}$ ($F[\rho]$) un *estado de campo medio* del sistema. Veamos en más detalle esta aproximación

b.2.1 La aproximación de Campo Medio

La principal idea en **MFA** es remplazar las interacciones entre las partes del sistema por una “interacción media” o “efectiva”. Esto reduce un problema de muchos cuerpos a una colección de problemas de un cuerpo, lo que permite obtener con poco esfuerzo computacional el comportamiento de varias propiedades importantes del sistema.

En general, la dimensionalidad del sistema juega un rol importante en determinar en que medida funciona una aproximación de campo medio para un problema particular. En **MFA**, muchas interacciones son remplazadas por una interacción efectiva con un campo externo. Es natural que cuanto mayor sea la conectividad de la interacción entre las partículas, las fluctuaciones en el campo medio serán cada vez menos importantes y por lo tanto, la aproximación será más exacta. Esto es cierto en sistemas con dimensionalidad espacial alta, o en presencia de interacciones de largo alcance.

Para derivar la aproximación, vamos a considerar estados de la forma

$$\rho[\Phi] = \otimes_i \rho_i(\Phi(i)) \quad \rho_i = \frac{\exp(-\beta\Phi^\mu(i)Q_\mu(i))}{\text{tr}[\exp(-\beta\Phi^\mu(i)Q_\mu(i))]} \quad (\text{B.12})$$

donde $Q_\mu(i)$, $\mu = 1, \dots, (\dim_i^2 - 1)$ son operadores que expanden una base completa del espacio de operadores hermíticos de traza nula sobre el espacio de estados de la i -ésima partícula, mientras que $\Phi^\mu(i)$ son coeficientes reales. La idea ahora es determinar los coeficientes $\Phi^\mu(i)$ en cada sitio, de manera que se cumpla la condición de extremo

$$\frac{\delta F[\rho]}{\delta \Phi} = \frac{\delta}{\delta \Phi} \langle H \rangle_\rho + \frac{1}{\beta} \frac{\delta}{\delta \Phi} \langle \ln \rho \rangle_\rho = 0$$

Observemos ahora lo siguiente: Dada la forma de ρ , podemos expresar el valor medio de un operador $Q_\mu(i)$ de la siguiente forma:

$$\langle Q_\mu(i) \rangle_\rho = \frac{\text{tr} [Q_\mu(i) \exp(-\beta\Phi^\mu(i)Q_\mu(i))]}{\text{tr} [\exp(-\beta\Phi^\mu(i)Q_\mu(i))]} = -\frac{1}{\beta} \frac{\delta}{\delta\Phi^\mu(i)} \ln \text{tr} [\exp(-\beta\Phi^\mu(i)Q_\mu(i))]$$

además,

$$\langle Q_\mu(i)Q_\nu(j) \rangle_\rho = \langle Q_\mu(i) \rangle \langle Q_\nu(j) \rangle_\rho \quad i \neq j.$$

Ahora, si H admite la expansión en serie de potencias³, donde a la base $Q_\mu(i)$ agregamos el operador identidad en cada sitio $I = Q_0(i)$

$$H = \sum_n \sum_{\mu_1, \dots, \mu_n} \alpha_{\mu_1, \dots, \mu_n} Q_{\mu_1} \cdots Q_{\mu_n} \quad (\text{B.13})$$

Por tratarse de un estado producto, $\langle H \rangle_\rho$ puede expresarse en función de los valores medios de estos operadores, reemplazando en H los observables por sus valores esperados

$$\langle H \rangle = \sum_n \sum_{\mu_1, \dots, \mu_n} \alpha_{\mu_1, \dots, \mu_n} \langle Q_{\mu_1} \rangle \cdots \langle Q_{\mu_n} \rangle \quad (\text{B.14})$$

por otro lado,

$$\langle \ln \rho \rangle = -\beta\Phi^\mu \langle Q_\mu \rangle - \ln \text{tr} [\exp(-\beta\Phi^\mu(i)Q_\mu(i))]$$

finalmente, se obtienen las Ecs. (4.21) De esta manera, observamos que la condición de extremo consiste en que, o bien $\frac{\delta \langle Q_\nu(i) \rangle}{\delta \Phi^\mu(i)} = 0$ (lo que significa que los valores medios de los observables no dependen de Φ) o $\Phi_\nu(i) = \frac{\delta \langle H \rangle}{\delta \langle Q_\nu(i) \rangle}$. Esta última condición es equivalente a haber elegido $\rho = \exp(-\beta\tilde{H})$, donde

$$\tilde{H} = Q_\nu \frac{\partial}{\partial \langle Q_\nu \rangle} \langle H \rangle = \sum_k \sum_{\mu_k} \Phi^{\mu_k}(k) Q_{\mu_k}(k) \quad (\text{B.15})$$

Observación: Si en vez de expandir una base completa de observables locales $Q_\mu(i)$ nos limitáramos solamente a los observables que aparecen en el Hamiltoniano, el resultado sería el mismo. Esto permite reducir mucho el esfuerzo computacional.

Observación: Para obtener el GS, se puede asumir desde el principio que el estado es un estado puro.

Una vez que reducido el problema a una minimización sobre un espacio de parámetros suficientemente pequeño, podemos encararlo directamente mediante métodos numéricos clásicos, como el método de gradiente conjugado[30].

³ En general, cualquier Hamiltoniano en física lo hace, si tenemos en cuenta que los términos de auto-interacción pueden escribirse siempre en términos de los operadores locales

Otra forma de encarar el problema consiste en resolver las ecuaciones

$$\langle Q_\mu(i) \rangle = \text{tr} [Q_\mu(i) \exp(-\beta\Phi^\mu(i)Q_\mu(i))] / \text{tr} [\exp(-\beta\Phi^\mu(i)Q_\mu(i))] \quad (\text{B.16a})$$

$$\Phi_\mu(i) = \frac{\delta\langle H \rangle}{\delta\langle Q_\nu(i) \rangle} \quad (\text{B.16b})$$

Este tipo de ecuaciones suelen llamarse de “autoconsistencia” ya que es equivalente a decir que los valores medios deben ser consistentes con la interacción efectiva originada por esos mismos valores medios.

Una forma de resolver el problema de encontrar un campo medio auto-consistente consiste en partir de un estado elegido al azar (llamémoslo $\rho^{(0)}$), evaluar los observables $\langle Q_\mu(i) \rangle_{\rho^{(0)}}$, y con estos evaluar $\Phi^{(1)}$. Construimos entonces la $\rho^{(1)}$ correspondiente a $\Phi^{(1)}$. Debido a la concavidad de F , es posible probar la convergencia de este método si $\Phi^{(0)}$ se elige dentro de un entorno de la solución verdadera Φ .

Restauración de simetría

Las Ecs. (B.16) no siempre tienen soluciones únicas. Esto ocurre en particular si una solución rompe alguna simetría presente en el Hamiltoniano original. Un estado de equilibrio exacto de un sistema debería conservar todas las simetrías del sistema original, ya que $\rho \propto \exp(-\beta H)$ es una función de H . Esto significa que un estado de campo medio con simetrías rotas no representa en general una buena aproximación para el estado, y en particular, para los observables no invariantes ante esa simetría.

Cuando construimos los observables del sistema vía derivación de la función de partición, la restauración de simetría puede implementarse de manera elemental si, cuando agregamos acoplamientos para estimar observables, evitamos incluir aquellos que rompan explícitamente la simetría.

A nivel del estado de campo medio, lo que corresponde es “promediar” todas las configuraciones con igual energía libre:

$$\rho_{RS} = \int_{\mathcal{X}} \rho(x) \quad (\text{B.17})$$

con dx elegida de manera de que $\int dx = 1$. Naturalmente, la función de partición será exactamente la misma que antes, ya que $Z_{MF} = \exp(-\beta \text{tr} [H\rho(x)] + \text{tr} [\rho(x) \ln \rho(x)]) = \text{cte}$. Si vamos más lejos, en el caso de que haya direcciones para las que la curvatura definida en la Ec. (4.24) sea muy pequeña (lo que ocurre en las regiones cercanas a una transición de fase), podemos integrar también sobre esos modos con $Z(x)/Z_{MF}$ como función de peso:

$$\rho_{RS \text{ aprox}} = \int_{\mathcal{X}} \left(\frac{Z(x)}{Z_{MF}} \rho(x) \right) \quad (\text{B.18})$$

Este resultado es completamente equivalente al resultado en la aproximación SPA. Una limitación de este procedimiento de “restauración de simetría” proviene del hecho de que el estado resultante no es una “superposición coherente”. Una aproximación más precisa

se obtiene por medio de la técnica de “proyección”: Si S es un operador que *genera* las transformaciones asociadas a la simetría rota, dado que todo autoestado del sistema deberá serlo también de S , podemos mejorar la aproximación al estado fundamental “proyectando” el estado con simetría rota sobre los diferentes subespacios propios de S y eligiendo aquél que corresponda con el mínimo de la energía. Una forma de hacer esto es construyendo el proyector en la “representación de Fourier”

$$\mathcal{P}_s = \int \exp(-ix(S - s)) \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{B.19})$$

que naturalmente se anula sobre cualquier estado propio de S con autovalor diferente de s . De esta manera, el estado

$$\rho_s \propto \int \int \exp(-ixS) \rho(x_0) \exp(ix'S) \exp(is(x - x')) \frac{dx dx'}{2\pi} \quad (\text{B.20})$$

donde $\rho(x_0)$ es cualquiera de las soluciones del problema variacional de campo medio. Si integramos sobre s , lo que es equivalente a una mezcla estadística sobre todos los estados ρ_s con igual peso, obtenemos

$$\rho_{RS} = \frac{\int \rho_s ds}{\int ds} \propto \int \exp(-ixS) \rho(x_0) \rho(ixS) dx \quad (\text{B.21})$$

que coincide con la expresión de la Ec. (B.17). Vale notar que a diferencia de (B.17), los estados (B.20) ya no son en general una mezcla de estados producto, y por lo tanto, pueden dar cuenta del entrelazamiento del estado exacto.

B.3 Quantum Monte Carlo

Quantum Monte Carlo[52] es una familia de técnicas que se basan en descomponer el problema de evaluar $\exp(-\beta H)$ en dos pasos:

1. Aproximar $\exp(-\beta H)$ como un producto (o suma de productos) de un número definido de operadores de la forma $\exp(-\beta A_i)$, que sí puedan evaluarse. Vamos a llamar “rebanada”⁴ a cada uno de los factores del producto. El elemento de matriz $\langle i | \exp(-\beta H) | j \rangle$ se escribe ahora como

$$\langle i | \exp(-\beta H) | j \rangle = \sum_{\{j_m\}} \prod_m \langle j_m | \exp(-\beta H) | j_{m+1} \rangle$$

2. La suma (o integral) sobre productos del miembro derecho se aproxima mediante técnicas de integración Monte Carlo[30]. Estas técnicas se basan en el hecho de que una integral/ suma multidimensional puede representarse como

$$\int f(x) \rho(x) d\Omega = \frac{\int f(x) \rho(x) d\Omega}{\int \rho(x) d\Omega} \left(\int \rho(x) d\Omega \right) = \left(\int \rho(x) d\Omega \right) \langle f \rangle_\rho \quad (\text{B.22})$$

⁴ En inglés se suele usar el término “slice”

En la práctica, el método es aplicable si somos capaces de generar números aleatorios con una distribución de probabilidad de forma que $f(x) \approx \text{cte}$. Como la dispersión en la media muestral es proporcional a su desviación estandar, e inversamente proporcional a la raíz cuadrada del número de muestras, el método será convergente siempre y cuando $\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$ se mantenga finito.

La forma integral (3.4) es particularmente apropiada para formularse en términos de Quantum Monte Carlo (QMC): si la temperatura es suficientemente alta respecto de los acoplamientos, U varía poco dentro del soporte efectivo de la integral, mientras que el peso Gaussiano es fácilmente implementable en un generador de números aleatorios [30]. Podemos estimar entonces la integral funcional reemplazando el límite $n \rightarrow \infty$ por la evaluación para un número de factores n fijo. Sin embargo, conforme la temperatura baja, el soporte efectivo de la integral crece a una zona en la que U ya no puede aproximarse por una constante. Peor aún, los elementos de matriz de U (que no tienen por qué ser positivos) comienzan a cambiar su fase rápidamente. Esto es un hecho conocido como el *problema del signo* [93], y está relacionado (aunque no determinado) por el entrelazamiento del estado que se quiere aproximar. Esto limita la aplicación de la técnica a temperaturas suficientemente altas. La forma más simple de QMC consiste en usar una única "rebanada", QMC. Si sólo nos interesa evaluar operadores locales y correlaciones de dos cuerpos, basta con ser capaces de calcular Z y sus derivadas respecto a ciertos acoplamientos. Esto da origen a la Aproximación de camino estático (Static Path Approximation) que discutimos en el Cap. 3.

Para ilustrar estos conceptos, aplicaremos la técnica QMC al caso más simple de todos: el estado de equilibrio térmico de un sistema formado por un par de espines $\frac{1}{2}$, acoplados por una interacción XY, dentro de un campo magnético, definido por el Hamiltoniano

$$H_{XY} = bS_z - v_x \sigma_x \otimes \sigma_x - v_y \sigma_y \otimes \sigma_y \quad (\text{B.23})$$

$$S_z = (\sigma_3 \otimes \sigma_0 + \sigma_0 \otimes \sigma_3) \quad (\text{B.24})$$

donde los operadores σ_v son representados por las matrices de Pauli

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \sigma_x &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_y &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} & \sigma_z &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

Este Hamiltoniano presenta una simetría respecto a la transformación de "Paridad- S_z ", generada por el operador $P_z = \exp(-i\pi S_z)$, donde $S_\mu = \sigma_\mu \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \sigma_\mu$ es el operador "espín total", lo que permite desbloquear el Hamiltoniano en dos subespacios de 2×2 :

$$H_{XY} = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 & v_x/4 + v_y/4 \\ 0 & 0 & v_x/4 - v_y/4 & 0 \\ 0 & v_x/4 - v_y/4 & 0 & 0 \\ v_x/4 + v_y/4 & 0 & 0 & -b \end{pmatrix}, \quad (\text{B.26})$$

siendo H_{XY} representado en la base de estados separables $\{| \downarrow \rangle | \downarrow \rangle, | \uparrow \rangle | \downarrow \rangle, | \downarrow \rangle | \uparrow \rangle, | \uparrow \rangle | \uparrow \rangle\}$. En esa base, la matriz densidad toma la forma

$$\rho = Z^{-1} \left(e^{\beta\lambda_+} |1\rangle\langle 1| + e^{-\beta\lambda_+} |2\rangle\langle 2| + e^{\beta\lambda_-} |3\rangle\langle 3| + e^{-\beta\lambda_-} |4\rangle\langle 4| \right) \quad (\text{B.27})$$

$$Z = 2 (\cosh(\beta\lambda_+) + \cosh(\beta\lambda_-)) \quad (\text{B.28})$$

donde $\lambda_+ = \sqrt{b^2 + (v_x + v_y)^2/16}$, $\lambda_- = |v_x - v_y|/4$

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= \frac{1}{2\lambda_+\sqrt{1+b/\lambda_+}} \left(\frac{v_x + v_y}{4} |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle - (\lambda_+ + b) |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \right) \\
 |2\rangle &= \frac{1}{2\lambda_+\sqrt{1-b/\lambda_+}} \left(\frac{v_x + v_y}{4} |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle - (\lambda_+ - b) |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \right) \\
 |3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle + |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle) \\
 |4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle - |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle)
 \end{aligned} \tag{B.29}$$

Nótese que el estado $|4\rangle = |\text{singlete}\rangle$ que describimos en el proceso de teleportación. La correspondiente matriz densidad es de la forma (2.34), por lo que la concurrencia del estado es una función analítica de los parámetros (Ec. (2.35)–(2.37)).

Digamos que ahora queremos evaluar observables por medio de la técnica “Quantum Monte Carlo”. Una forma de determinar en general cuán buena es la aproximación (para un número fijo N de rebanadas) al aplicarla a *cualquier* observable consiste en comparar cuanto se parecen el estado estimado ρ_{MC} al estado exacto (B.27). Naturalmente, algunos observables podrán ser estimados mejor que otros, pero vamos a considerar el peor caso. Una medida de cuánto se parecen dos estados viene dada por la entropía relativa definida como [15]:

$$S_{rel}(\rho, \sigma) = \text{tr} [\rho (\ln(\rho) - \ln(\sigma))] \tag{B.30}$$

que se anula en el caso de que ambos estados sean idénticos y se iguala (a menos de una constante) a la entropía estadística de ρ si σ es un estado completamente mezclado. En las figuras 22-23 se muestran algunos resultados para el caso particular $v_x = 1$ y $v_y = 0$. En la figura 22 observamos como el costo computacional, medido en el logaritmo del número de paths Monte Carlo evaluados para alcanzar la convergencia muestra una tendencia creciente al aumentar el entrelazamiento. Esto está relacionado con el “problema del signo”: para alcanzar la convergencia de la integral Monte Carlo, se requieren cada vez una estadística mayor, debido al aumento de la dispersión del integrando. A la vez, para alcanzar la convergencia respecto del aumento en el número de rebanadas se requieren además de ellas, lo que implica aumentar aún más el costo computacional. Estos resultados naturalmente se vuelven mucho más costosos al aumentar el número de componentes y la cantidad de estados por sitio. Esto implica la necesidad de limitar el número de rebanadas, de campos auxiliares y de estadística, lo que impone fuertes límites a la convergencia. En esta tesis desarrollamos en cambio métodos analíticos para tratar estas integrales, que no sólo reducen significativamente el esfuerzo numérico sino que además nos permitieron recuperar aspectos conceptuales en los sistemas a estudiar, que quedan opacados en un tratamiento completamente numérico.

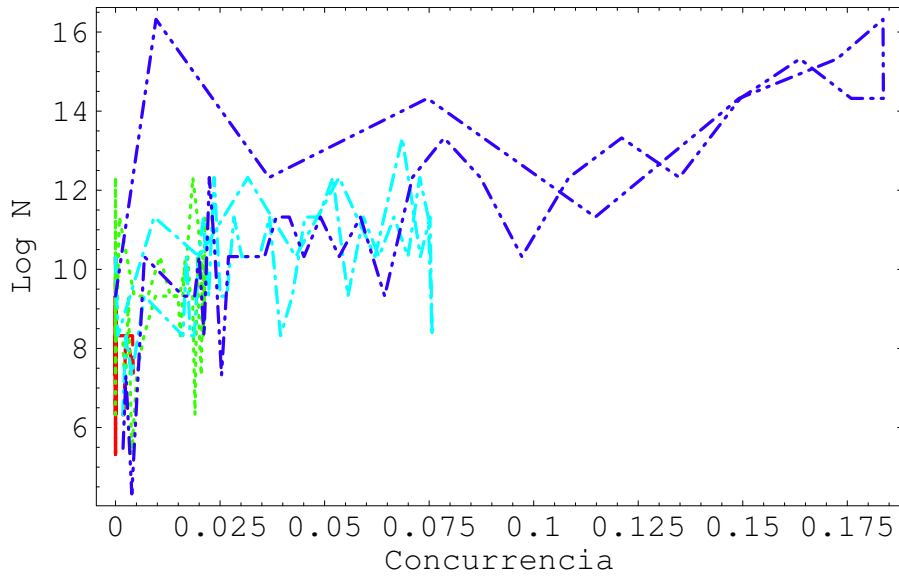


Figura 22: Número necesario de corridas QMC para alcanzar la convergencia en un sistema de dos espines acoplados por una interacción $\sigma_x^1 \sigma_x^2$ vs. el entrelazamiento del sistema para diferentes temperaturas ($\beta = 1$, $\beta = 4$ y $\beta = 8$, representadas por las líneas roja, verde y azul respectivamente). La condición de convergencia aplicada fue $\|\rho' - \rho\| < 0,02$ (donde $\|A\| = \sqrt{A^\dagger A}$ es la Norma \mathcal{L}_2), para ρ y ρ' dos estimaciones de la correspondiente integral

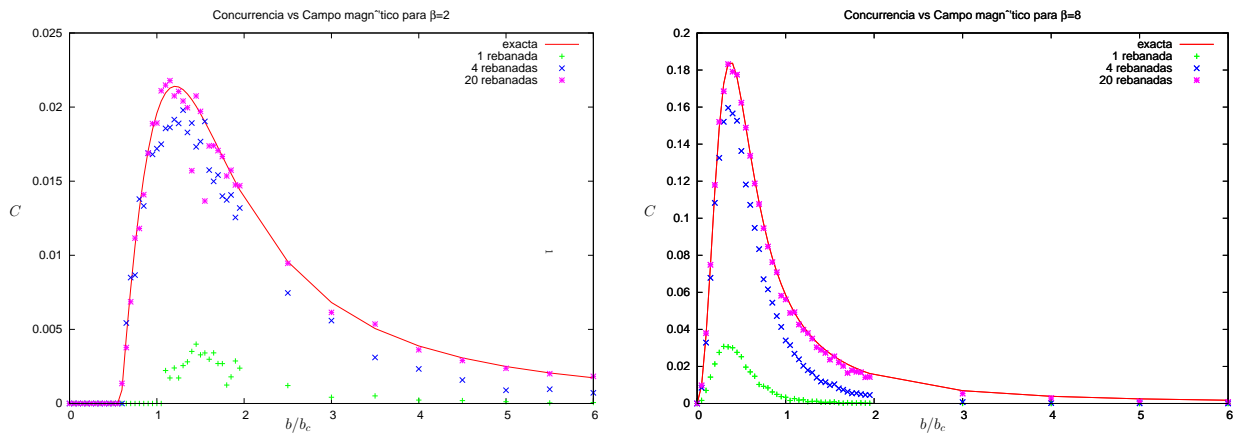


Figura 23: Concurrencia exacta en función del campo magnético para $\beta = 2$ (izquierda) y $\beta = 8$ (derecha) y su estimación en QMC. La línea continua (en rojo) representa el resultado exacto y las líneas punteadas los resultados para 1 rebanada (verde), 4 rebanadas (azul) y 20 rebanadas (rojo).

BIBLIOGRAFÍA

- [1] R. Rossignoli, N. Canosa, and J. M. Matera. Even-odd entanglement in boson and spin systems. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 2011.
- [2] J. M. Matera, R. Rossignoli, and N. Canosa. Evaluation of ground-state entanglement in spin systems with the random phase approximation. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 82(5):052332, 2010.
- [3] N. Canosa, R. Rossignoli, and J. M. Matera. Separability and entanglement in finite dimer-type chains in general transverse fields. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 81(5):054415, 2010.
- [4] R. Rossignoli, N. Canosa, and J. M. Matera. Factorization and entanglement in general xyz spin arrays in nonuniform transverse fields. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 80(6):062325, 2009.
- [5] J. M. Matera, R. Rossignoli, and N. Canosa. Evaluation of pairwise entanglement in translationally invariant systems with the random phase approximation. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 78(4):042319, 2008.
- [6] J. M. Matera, R. Rossignoli, and N. Canosa. Thermal entanglement in fully connected spin systems and its random-phase-approximation description. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 78(1):012316, 2008.
- [7] R. Rossignoli, N. Canosa, and J. M. Matera. Entanglement of finite cyclic chains at factorizing fields. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 77(5):052322, 2008.
- [8] N. Canosa, J. M. Matera, and R. Rossignoli. Description of thermal entanglement with the static path plus random-phase approximation. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 76(2):022310, 2007.
- [9] E. Schrödinger. Discussion of probability relations between separated systems. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 31:555–563, 1935. ib idem, 32, 446 (1936).
- [10] David Deutsch. The church-turing principle and the universal quantum computer. In *Proceedings of the Royal Society of London A*, volume 400, London, 1985. Royal Society.
- [11] JOHN S. BELL. On the problem of hidden variables in quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, 38(3):447–452, Jul 1966. doi: 10.1103/RevModPhys.38.447.
- [12] Alain Aspect, Philippe Grangier, and Gérard Roger. Experimental tests of realistic local theories via bell's theorem. *Phys. Rev. Lett.*, 47(7):460–463, Aug 1981. doi: 10.1103/PhysRevLett.47.460.

- [13] Alain Aspect, Philippe Grangier, and Gérard Roger. Experimental realization of einstein-podolsky-rosen-bohm gedankenexperiment: A new violation of bell's inequalities. *Phys. Rev. Lett.*, 49(2):91–94, Jul 1982. doi: 10.1103/PhysRevLett.49.91.
- [14] Alain Aspect, Jean Dalibard, and Gérard Roger. Experimental test of bell's inequalities using time-varying analyzers. *Phys. Rev. Lett.*, 49(25):1804–1807, Dec 1982. doi: 10.1103/PhysRevLett.49.1804.
- [15] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 1 edition, October 2000. ISBN 0521635039.
- [16] Charles H. Bennett, Gilles Brassard, Claude Crépeau, Richard Jozsa, Asher Peres, and William K. Wootters. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and einstein-podolsky-rosen channels. *Phys. Rev. Lett.*, 70(13):1895–1899, Mar 1993. doi: 10.1103/PhysRevLett.70.1895.
- [17] Roger Balian. *From Microphysics to Macrophysics: Methods and Applications of Statistical Physics. Vol. 1*. Texts and monographs in physics. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [18] Leonid Gurvits and Howard Barnum. Largest separable balls around the maximally mixed bipartite quantum state. *Phys. Rev. A*, 66(6):062311, Dec 2002. doi: 10.1103/PhysRevA.66.062311.
- [19] Leonid Gurvits and Howard Barnum. Separable balls around the maximally mixed multipartite quantum states. *Phys. Rev. A*, 68(4):042312, Oct 2003. doi: 10.1103/PhysRevA.68.042312.
- [20] Asher Peres. Separability criterion for density matrices. *Phys. Rev. Lett.*, 77(8):1413–1415, Aug 1996. doi: 10.1103/PhysRevLett.77.1413.
- [21] G. Vidal and R. F. Werner. Computable measure of entanglement. *Phys. Rev. A*, 65(3):032314, Feb 2002. doi: 10.1103/PhysRevA.65.032314.
- [22] Gerardo Adesso. *Entanglement of Gaussian States*. PhD thesis, Dipartimento di Fisica "E. R. Caianiello" Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali, 2006.
- [23] Gerardo Adesso and Fabrizio Illuminati. Genuine multipartite entanglement of symmetric gaussian states: Strong monogamy, unitary localization, scaling behavior, and molecular sharing structure. *Phys. Rev. A*, 78(4):042310, Oct 2008. doi: 10.1103/PhysRevA.78.042310.
- [24] H. Attias and Y. Alhassid. The perturbed static path approximation at finite temperature: observables and strength functions. *Nuclear Physics A*, 625(3):565 – 597, 1997. ISSN 0375-9474. doi: DOI:10.1016/S0375-9474(97)00486-7. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVB-3SPXRRX-20/2/67bfd5d811101a59aa3cc29acd910914>.
- [25] R. Rossignoli and N. Canosa. The rpa correlations in the presence of thermal fluctuations. *Physics Letters, Section B: Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics*, 394(3-4):242–246, 1997.

- [26] R. Rossignoli, N. Canosa, and P. Ring. Fluctuations and odd-even effects in small superfluid systems. *Annals of Physics*, 275(1):1–26, 1999.
- [27] David Bohm and David Pines. A collective description of electron interactions: Iii. coulomb interactions in a degenerate electron gas. *Phys. Rev.*, 92(3):609–625, Nov 1953. doi: 10.1103/PhysRev.92.609.
- [28] H. Thomas J. Kurmann and G. Müller. Antiferromagnetic long-range order in the anisotropic quantum spin chain. *Physica A*, 112, 1982.
- [29] L. Amico, F. Baroni, A. Fubini, D. Patanè, V. Tognetti, and Paola Verrucchi. Divergence of the entanglement range in low-dimensional quantum systems. *Phys. Rev. A*, 74(2):022322, Aug 2006. doi: 10.1103/PhysRevA.74.022322.
- [30] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in C++: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, February 2002. ISBN 0521750334. URL <http://www.worldcat.org/isbn/0521750334>.
- [31] W. Dür, G. Vidal, and J. I. Cirac. Three qubits can be entangled in two inequivalent ways. *Phys. Rev. A*, 62(6):062314, Nov 2000. doi: 10.1103/PhysRevA.62.062314.
- [32] Charles H. Bennett, David P. DiVincenzo, John A. Smolin, and William K. Wootters. Mixed-state entanglement and quantum error correction. *Phys. Rev. A*, 54(5):3824–3851, Nov 1996. doi: 10.1103/PhysRevA.54.3824.
- [33] Michał Horodecki, Paweł Horodecki, and Ryszard Horodecki. Mixed-state entanglement and distillation: Is there a “bound” entanglement in nature? *Phys. Rev. Lett.*, 80(24):5239–5242, Jun 1998. doi: 10.1103/PhysRevLett.80.5239.
- [34] John A. Smolin. Four-party unlockable bound entangled state. *Phys. Rev. A*, 63(3):032306, Feb 2001. doi: 10.1103/PhysRevA.63.032306.
- [35] Peter W. Shor, John A. Smolin, and Ashish V. Thapliyal. Superactivation of bound entanglement. *Phys. Rev. Lett.*, 90(10):107901, Mar 2003. doi: 10.1103/PhysRevLett.90.107901.
- [36] W. Dür. Multipartite bound entangled states that violate bell’s inequality. *Phys. Rev. Lett.*, 87(23):230402, Nov 2001. doi: 10.1103/PhysRevLett.87.230402.
- [37] Andrew C. Doherty, Pablo A. Parrilo, and Federico M. Spedalieri. Complete family of separability criteria. *Phys. Rev. A*, 69(2):022308, Feb 2004. doi: 10.1103/PhysRevA.69.022308.
- [38] Scott Hill and William K. Wootters. Entanglement of a pair of quantum bits. *Phys. Rev. Lett.*, 78(26):5022–5025, Jun 1997. doi: 10.1103/PhysRevLett.78.5022.

- [39] A. Fubini, T. Roscilde, V. Tognetti, M. Tusa, and P. Verrucchi. Reading entanglement in terms of spin configurations in quantum magnets. *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, 38:563–570, 2006. ISSN 1434-6060. URL <http://dx.doi.org/10.1140/epjd/e2006-00090-6>. 10.1140/epjd/e2006-00090-6.
- [40] Karol Zyczkowski, Pawel Horodecki, Anna Sanpera, and Maciej Lewenstein. Volume of the set of separable states. *Phys. Rev. A*, 58(2):883–892, Aug 1998. doi: 10.1103/PhysRevA.58.883.
- [41] M. B. Plenio. Logarithmic negativity: A full entanglement monotone that is not convex. *Phys. Rev. Lett.*, 95(9):090503, Aug 2005. doi: 10.1103/PhysRevLett.95.090503.
- [42] Jens Eisert. *Entanglement in Quantum Information Theory*. PhD thesis, University of Potsdam, 2001.
- [43] R. F. Werner and M. M. Wolf. Bound entangled gaussian states. *Phys. Rev. Lett.*, 86(16):3658–3661, Apr 2001. doi: 10.1103/PhysRevLett.86.3658.
- [44] R. Simon. Peres-horodecki separability criterion for continuous variable systems. *Phys. Rev. Lett.*, 84(12):2726–2729, Mar 2000. doi: 10.1103/PhysRevLett.84.2726.
- [45] Lu-Ming Duan, G. Giedke, J. I. Cirac, and P. Zoller. Inseparability criterion for continuous variable systems. *Phys. Rev. Lett.*, 84(12):2722–2725, Mar 2000. doi: 10.1103/PhysRevLett.84.2722.
- [46] K. Audenaert, J. Eisert, M. B. Plenio, and R. F. Werner. Entanglement properties of the harmonic chain. *Phys. Rev. A*, 66(4):042327, Oct 2002. doi: 10.1103/PhysRevA.66.042327.
- [47] Gerardo Adesso, Alessio Serafini, and Fabrizio Illuminati. Quantification and scaling of multipartite entanglement in continuous variable systems. *Phys. Rev. Lett.*, 93(22):220504, Nov 2004. doi: 10.1103/PhysRevLett.93.220504.
- [48] Peter Ring and Peter Schuck. *The Nuclear Many-Body Problem (Theoretical and Mathematical Physics)*. Springer, May 2005. ISBN 354021206X.
- [49] N. Canosa and R. Rossignoli. Global entanglement in xxz chains. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 73(2):022347, 2006.
- [50] Sandu Popescu, Anthony J. Short, and Andreas Winter. Entanglement and the foundations of statistical mechanics. *Nat Phys*, 2(11):754, October 2006.
- [51] R. L. Stratonovich. ?? *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 115, 1957. [Sov. Phys. Dokl. 2, 458 (1958)]; J. Hubbard, *Phys. Rev. Lett.* 3, 77 (1959).
- [52] T. Kashiwa, Y. Ohnuki, and M. Suzuki. *Path Integral Methods*. Oxford University Press, USA, 2nd edition, October 1997. ISBN 0198517718.

- [53] G. Puddu, P. F. Bortignon, and R. A. Broglia. The rpa-spa approximation to level densities. *Annals of Physics*, 206(2):409 – 439, 1991. ISSN 0003-4916. doi: DOI:10.1016/0003-4916(91)90006-T. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6WB1-4DDR4J9-YP/2/02d2ee1b5e36a8cb96a7ccc8aa8f628e>.
- [54] R. Rossignoli, N. Canosa, and P. Ring. Thermal and quantal fluctuations for fixed particle number in finite superfluid systems. *Physical Review Letters*, 80(9):1853–1856, 1998.
- [55] K. Kaneko and M. Hasegawa. Contour integral method for thermal and quantal fluctuations. *Phys. Rev. C*, 72(6):061306, Dec 2005. doi: 10.1103/PhysRevC.72.061306.
- [56] N. Canosa and R. Rossignoli. Effects of repulsive forces on thermal fluctuations. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 56(2):791–799, 1997.
- [57] D. DiVincenzo, D. Bacon, J. Kempe, G. Burkard, and K.B. Whaley. Universal quantum computation with the exchange interaction. *Nature*, 408, 2000. doi: 10.1038/35042541.
- [58] Daniel Loss and David P. DiVincenzo. Quantum computation with quantum dots. *Phys. Rev. A*, 57(1):120–126, Jan 1998. doi: 10.1103/PhysRevA.57.120. *Phys. Rev. B* 59, 2070 (1999).
- [59] Simon C. Benjamin and Sougato Bose. Quantum computing with an always-on heisenberg interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 90(24):247901, Jun 2003. doi: 10.1103/PhysRevLett.90.247901. *Phys. Rev. A* 70, 032314 (2004).
- [60] Elliott Lieb, Theodore Schultz, and Daniel Mattis. Two soluble models of an anti-ferromagnetic chain. *Annals of Physics*, 16(3):407 – 466, 1961. ISSN 0003-4916. doi: DOI:10.1016/0003-4916(61)90115-4. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6WB1-4DF520B-1J6/2/9fa7a2285d82e7db7386ac37243f0d77>.
- [61] Tobias J. Osborne and Michael A. Nielsen. Entanglement in a simple quantum phase transition. *Phys. Rev. A*, 66(3):032110, Sep 2002. doi: 10.1103/PhysRevA.66.032110.
- [62] H. J. Lipkin, N. Meshkov, and A. J. Glick. Validity of many-body approximation methods for a solvable model : (i). exact solutions and perturbation theory". *Nuclear Physics*, 62(2):188 – 198, 1965. ISSN 0029-5582. doi: DOI:10.1016/0029-5582(65)90862-X.
- [63] Julien Vidal. Concurrence in collective models. *Phys. Rev. A*, 73(6):062318, Jun 2006. doi: 10.1103/PhysRevA.73.062318.
- [64] Masato Koashi, Vladimír Bužek, and Nobuyuki Imoto. Entangled webs: Tight bound for symmetric sharing of entanglement. *Phys. Rev. A*, 62(5):050302, Oct 2000. doi: 10.1103/PhysRevA.62.050302.
- [65] Tobias J. Osborne and Frank Verstraete. General monogamy inequality for bipartite qubit entanglement. *Phys. Rev. Lett.*, 96(22):220503, Jun 2006. doi: 10.1103/PhysRevLett.96.220503.

- [66] Yuriy Makhlin, Gerd Schön, and Alexander Shnirman. Quantum-state engineering with josephson-junction devices. *Rev. Mod. Phys.*, 73(2):357–400, May 2001. doi: 10.1103/RevModPhys.73.357.
- [67] J. I. Cirac, M. Lewenstein, K. Mølmer, and P. Zoller. Quantum superposition states of bose-einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 57(2):1208–1218, Feb 1998. doi: 10.1103/PhysRevA.57.1208.
- [68] Julien Vidal, Guillaume Palacios, and Rémy Mosseri. Entanglement in a second-order quantum phase transition. *Phys. Rev. A*, 69(2):022107, Feb 2004. doi: 10.1103/PhysRevA.69.022107.
- [69] Julien Vidal, Guillaume Palacios, and Claude Aslangul. Entanglement dynamics in the lipkin-meshkov-glick model. *Phys. Rev. A*, 70(6):062304, Dec 2004. doi: 10.1103/PhysRevA.70.062304.
- [70] Sébastien Dusuel and Julien Vidal. Continuous unitary transformations and finite-size scaling exponents in the lipkin-meshkov-glick model. *Phys. Rev. B*, 71(22):224420, Jun 2005. doi: 10.1103/PhysRevB.71.224420.
- [71] R. Rossignoli and N. Canosa. Global thermal entanglement in qubit systems. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 72(1):012335, 2005.
- [72] T. Holstein and H. Primakoff. Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. *Phys. Rev.*, 58(12):1098–1113, Dec 1940. doi: 10.1103/PhysRev.58.1098.
- [73] Abraham Klein and E. R. Marshalek. Boson realizations of lie algebras with applications to nuclear physics. *Rev. Mod. Phys.*, 63(2):375–558, Apr 1991. doi: 10.1103/RevModPhys.63.375.
- [74] Julien Vidal, Sébastien Dusuel, and Thomas Barthel. Entanglement entropy in collective models. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2007(01):P01015, 2007. URL <http://stacks.iop.org/1742-5468/2007/i=01/a=P01015>.
- [75] Salvatore M. Giampaolo, Gerardo Adesso, and Fabrizio Illuminati. Theory of ground state factorization in quantum cooperative systems. *Phys. Rev. Lett.*, 100(19):197201, May 2008. doi: 10.1103/PhysRevLett.100.197201.
- [76] Luigi Amico, Rosario Fazio, Andreas Osterloh, and Vlatko Vedral. Entanglement in many-body systems. *Rev. Mod. Phys.*, 80(2):517–576, May 2008. doi: 10.1103/RevModPhys.80.517.
- [77] José I. Latorre, Román Orús, Enrique Rico, and Julien Vidal. Entanglement entropy in the lipkin-meshkov-glick model. *Phys. Rev. A*, 71(6):064101, Jun 2005. doi: 10.1103/PhysRevA.71.064101.
- [78] Hannu Wichterich, Julien Vidal, and Sougato Bose. Universality of the negativity in the lipkinmeshkovglick model. *Phys. Rev. A*, 81(3):032311, Mar 2010. doi: 10.1103/PhysRevA.81.032311.

- [79] Thomas Barthele, Sébastien Dusuel, and Julien Vidal. Entanglement entropy beyond the free case. *Phys. Rev. Lett.*, 97(22):220402, Nov 2006. doi: 10.1103/PhysRevLett.97.220402.
- [80] Gerhard Müller and Robert E. Shrock. Implications of direct-product ground states in the one-dimensional quantum xyz and xy spin chains. *Phys. Rev. B*, 32(9):5845–5850, Nov 1985. doi: 10.1103/PhysRevB.32.5845.
- [81] Tommaso Roscilde, Paola Verrucchi, Andrea Fubini, Stephan Haas, and Valerio Tognetti. Studying quantum spin systems through entanglement estimators. *Phys. Rev. Lett.*, 93(16):167203, Oct 2004. doi: 10.1103/PhysRevLett.93.167203.
- [82] Salvatore M. Giampaolo and Fabrizio Illuminati. Characterization of separability and entanglement in $(2 \times d)$ - and $(3 \times d)$ -dimensional systems by single-qubit and single-qutrit unitary transformations. *Phys. Rev. A*, 76(4):042301, Oct 2007. doi: 10.1103/PhysRevA.76.042301.
- [83] Gian Luca Giorgi. Ground-state factorization and quantum phase transition in dimerized spin chains. *Phys. Rev. B*, 79(6):060405, Feb 2009. doi: 10.1103/PhysRevB.79.060405.
- [84] Jaeyoon Cho, Dimitris G. Angelakis, and Sougato Bose. Simulation of high-spin heisenberg models in coupled cavities. *Phys. Rev. A*, 78(6):062338, Dec 2008. doi: 10.1103/PhysRevA.78.062338.
- [85] F. T. Arecchi, Eric Courtens, Robert Gilmore, and Harry Thomas. Atomic coherent states in quantum optics. *Phys. Rev. A*, 6(6):2211–2237, Dec 1972. doi: 10.1103/PhysRevA.6.2211.
- [86] Pranaw Rungta and Carlton M. Caves. Concurrence-based entanglement measures for isotropic states. *Phys. Rev. A*, 67(1):012307, Jan 2003. doi: 10.1103/PhysRevA.67.012307.
- [87] F. Franchini et al. Separability and ground state factorization in quantum spin systems. *J. Phys. A*, 40, 2007.
- [88] Reinhard F. Werner. Quantum states with einstein-podolsky-rosen correlations admitting a hidden-variable model. *Phys. Rev. A*, 40(8):4277–4281, Oct 1989. doi: 10.1103/PhysRevA.40.4277.
- [89] Valerie Coffman, Joydip Kundu, and William K. Wootters. Distributed entanglement. *Phys. Rev. A*, 61(5):052306, Apr 2000. doi: 10.1103/PhysRevA.61.052306.
- [90] Michael J. Hartmann, Fernando G. S. L. Brandão, and Martin B. Plenio. Effective spin systems in coupled microcavities. *Phys. Rev. Lett.*, 99(16):160501, Oct 2007. doi: 10.1103/PhysRevLett.99.160501.
- [91] N. Canosa and R. Rossignoli. Entanglement between distant qubits in cyclic xx chains. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 75(3), 2007.

- [92] Richard Feynman. *Statistical Mechanics*. W. A. Benjamin, New York, 1972. ISBN 0805325093.
- [93] Matthias Troyer and Uwe-Jens Wiese. Computational complexity and fundamental limitations to fermionic quantum monte carlo simulations. *Phys. Rev. Lett.*, 94(17): 170201, May 2005. doi: 10.1103/PhysRevLett.94.170201.

Colofón

Esta tesis fue editada en L^AT_EX_{2 ϵ} usando el estilo `classicthesis.sty`

Final Version as of 28 de abril de 2013 at 0:14.

Juan Mauricio Matera: *Entrelazamiento cuántico en sistemas de muchos cuerpos*, Tesis de Doctorado en Ciencias Exactas, © 19 de mayo de 2011

director:
Dr. Raúl Rossignoli

location:
La Plata

time frame:
19 de mayo de 2011