

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

DEPARTAMENTO DE FISICA

Trabajo de Tesis Doctoral:

Entrelazamiento en Sistemas de Espines y en Modelos Cuánticos de Tiempo

Tesista: Alan Boette

Director: Raúl Rossignoli

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Departamento de Física

Entrelazamiento en Sistemas de Espines y en Modelos Cuánticos de Tiempo

Tesis Doctoral

Alan Boette Director: Raúl Rossignoli

2018



Entrelazamiento en Sistemas de Espines y en Modelos Cuánticos de Tiempo

Tesista: Alan Boette Director: Raúl Rossignoli

2018

Tesis presentada para optar al grado de Doctor

de la

Facultad de Ciencias Exactas Departamento de Física Universidad Nacional de La Plata

Resumen

En el presente trabajo de Tesis se examina el entrelazamiento cuántico y su rol en sistemas de espines y en modelos cuánticos de tiempo. En primer lugar, se aborda el problema de la determinación del entrelazamiento cuántico en sistemas de espines interactuantes por medio de aproximaciones de campo medio no convencionales. Un primer objetivo fue lograr una descripción física simple pero consistente de sistemas de espines en los que la aproximación de campo medio convencional (basada en espines independientes) no logra proporcionar siquiera una descripción básica razonable del estado fundamental, tal como sucede en sistemas dimerizados. En la segunda parte, se considera la aplicación del concepto de entrelazamiento al propio problema de la definición de tiempo y de la cuantificación de la evolución. Se presenta y analiza un modelo cuántico de evolución discreta basado en correlaciones cuánticas entre un sistema dado y un sistema reloj de referencia, logrando incorporar la noción de tiempo dentro de la teoría cuántica como consecuencia del entrelazamiento entre dos partes de un estado en principio atemporal. Estas dos partes se encuentran vinculadas, ya que los estados de cadenas de espines dimerizados se pueden considerar, gracias al modelo discreto de tiempo propuesto, como relojes cuánticos de espines. Finalmente, se presenta un esquema experimental de fotón individual y un modulador espacial para simular un estado historia sistema-tiempo, realizado en colaboración con el Laboratorio de Procesado de Imágenes.

Índice general

1	Ιντι	RODUCC	CIÓN	1				
2	Entrel azamiento Cilántico							
	2.1	Operador Densidad y Entropía de Von Neumann						
	2.2	Sistem	as Compuestos v Estados Reducidos	7				
	2.3	Información Mutua y Entropía Condicional						
	2.4	Entrel	azamiento de Estados Puros	9				
	2.5	Entrelazamiento de Estados no Puros						
	2.6	Criterios Básicos de Senarabilidad						
	2.7	Medid	las de Entrelazamiento	12				
	2.,	2.7.1	Concurrencia	13				
		2.7.2	Negatividad	13				
	2.8	Fidelic	lad	14				
3	Aproximación General de Campo Medio							
	3.1	Forma	lismo	17				
	3.2	Sistemas Compuestos						
	3.3	Límite $T = 0$ y Correctiones Perturbativas						
	3.4	Sistemas con Invariancia Traslacional						
	3.5	Estados Reducidos						
	3.6	Ruptura de Simetría						
	3.7	3.7 Aplicación a Sistemas de Espines						
		3.7.1	Aproximación de Campo Medio Estándar	24				
		3.7.2	Aproximación de Campo Medio Generalizada	26				
		3.7.3	Campos Transversos y Conservación de Paridad	27				
		3.7.4	Campo Factorizante	29				
		3.7.5	Entrelazamiento en Campos Factorizantes	30				
4	Aplicación a Cadenas Dimerizadas de Espín $1/2$							
	4.1 Cadena de Espín $1/2$ Dimerizada							
	4.2	Aproximación de Campo Medio Estándar						
	4.3	Aprox	imación de Campo Medio de Pares	37				
		4.3.1	El Caso $\alpha = 0^{1}$	38				
		4.3.2	Caso General	39				

		4.3.3	Acoplamientos de Mayor Alcance y Redes	42			
		4.3.4	Acoplamientos XYZ	43			
	4.4	Estado	s Reducidos	45			
		4.4.1	Campo Medio Estándar	45			
		4.4.2	Campo Medio Generalizado	46			
	4.5	Resultados Para Cadenas de Espín $s=1/2$					
		4.5.1	Concurrencia de Pares Fuertemente Acoplados	48			
		4.5.2	Entrelazamiento de un par de Espines con el Resto de la Cadena	48			
		4.5.3	Entrelazamiento de un Espín y de un Par débilmente acoplado,				
			con el Resto de la Cadena	53			
		4.5.4	Concurrencia y Entrelazamiento de Pares Débilmente Acoplados	56			
		4.5.5	Comportamiento en Función de $lpha$	56			
		4.5.6	Predicciones Para la Energía	57			
		4.5.7	Resultados Para Escaleras y Redes de Espines	60			
		4.5.8	Resultados Para el Caso XYZ	62			
5	Apli	ICACIÓN	n a Cadenas Dimerizadas de Espín s	65			
	5.1	Formal	lismo	66			
		5.1.1	Campo Medio de Pares y Ruptura de Simetría de Paridad en				
			Cadenas Dimerizadas de Espín General <i>s</i>	66			
		5.1.2	Entrelazamiento	69			
	5.2	Result	ados	70			
		5.2.1	El Caso de Espín $s = 1$	70			
		5.2.2	El Caso de Espín <i>s</i> General	77			
6	Ent	ITRELAZAMIENTO SISTEMA-TIEMPO 8					
	6.1	Formal	lismo	88			
	6.2	Evolución con Operador Constante					
	6.3	Entrela	zamiento Sistema-Tiempo	91			
		6.3.1	Relaciones de Incerteza Energía-Tiempo	95			
		6.3.2	Estados Mixtos	96			
		6.3.3	Un Qubit Como Reloj	97			
		6.3.4	El Límite Continuo	98			
7	Esta	TADOS HISTORIA DE SISTEMAS Y OPERADORES 10					
	7.1	Estado	s Historia Discretos	102			
		7.1.1	Representaciones de Estados Historia	103			
		7.1.2	Base Completa de Operadores Evolución	107			
		7.1.3	Entrelazamiento Sistema-Tiempo: Expresión Analítica	109			
		7.1.4	Entrelazamiento Sistema-Tiempo: Cota Superior e Inferior	111			
	7.2	Entrelazamiento de Operadores y Representación de Estado Puro 11					

7.3 Operadores Generadores y Estados Historia de Operadores			115			
	7.4	Entrelazamiento de Operador y Poder Entrelazante (<i>Entangling Power</i>)	118			
	7.5	Midiendo los <i>Overlaps</i> del Operador	120			
8	Simulación experimental					
	8.1	Simulación en Cadenas de Espines	123			
	8.2	Simulación de Estados Historia por Medios Ópticos	125			
		8.2.1 Generación de Estados Historia Discretos	128			
		8.2.2 Evolución del Sistema y Valores Medios	130			
		8.2.3 Operadores Evolución y Poder Entrelazante	131			
9	Con	CLUSIONES	135			
Ар	ÉNDIC	CES	143			
	1	Campo Factorizante en Cadenas Dimerizadas	143			
	2	Transformación de Jordan-Wigner	144			
	3	Trayectoria de Entrelazamiento Mínimo	147			

1 INTRODUCCIÓN

"Si usted decide comenzar, vaya hasta el final, de lo contrario tendrá una asignatura pendiente de por vida."

Chögyam Trungpa

En el último tiempo ha habido un crecimiento exponencial en el interés en la teoría de la información cuántica y computación cuántica. Numerosas organizaciones gubernamentales y privadas (Google, IBM, Nasa, D-Wave, Microsoft, Russian Quantum Center, Chinese Academy of Sciences, European Flagship Initiative on Quantum Technology, etc.) han estado invirtiendo cifras exorbitantes impulsando la "carrera" en búsqueda de la computadora cuántica.

Lo que a principios de los años ochenta surgía como la idea "peculiar" de utilizar sistemas cuánticos para realizar una tarea en forma más eficiente que cualquier algoritmo clásico [1], hoy claramente se ve como un incipiente cambio de paradigma tecnológico. Entre los algoritmos más notables que surgieron inicialmente, se pueden mencionar el de factorización de Shor [2], que logra una reducción exponencial en el número de pasos requeridos, y el algoritmo cuántico de búsqueda de Grover [3], que mostraron el potencial de una computación basada en la mecánica cuántica (qubits en lugar de bits [4]). Puede mencionarse también el algoritmo de muestreo bosónico (boson sampling) de Arhikonov [5], que también logra una reducción exponencial. El protocolo de teleportación cuántica [6] demostró que la mecánica cuántica podía también utilizarse para generar nuevas formas de transmisión de información. Hoy en día son innumerables los desarrollos que se hacen continuamente, tanto a nivel teórico, experimental como incluso a través de la fabricación de dispositivos (como ejemplo de criptografía cuántica: en 2016 China lanzó el satélite QUESS: Quantum Experiments at Space Scale, capaz de recibir y transmitir claves encriptadas).

Entre las características de los sistemas cuánticos que hacen posible estos avances sobresale el entrelazamiento cuántico, término establecido por Edwin Schrödinger en 1935 [7] para referirse a la capacidad de sistemas cuánticos compuestos de exhibir correlaciones entre sus componentes sin análogo clásico.

La determinación exacta del entrelazamiento entre las distintas partes de un sistema compuesto en interacción, es un problema extraordinariamente difícil ya que requiere

1 Introducción

recursos que crecen exponencialmente con el número de componentes. Un primer objetivo de esta tesis fue investigar la capacidad de una aproximación de *Campo Medio Generalizado* autoconsistente para sistemas compuestos, basada en una definición general de subsistemas independientes, para la descripción de correlaciones y entrelazamiento cuántico en los mismos [8]. A diferencia del enfoque de campo medio tradicional, que omite las correlaciones, el esquema propuesto permite incorporar correlaciones en forma exacta dentro de determinados subsistemas, al redefinir el "sitio" o unidad, permaneciendo a la vez tratable. En otras palabras, los recursos requeridos aquí crecen linealmente con el número de componentes.

El formalismo propuesto será aplicado a un sistema de interés tal como es el de una cadena de espines dimerizada, que en el caso de espín 1/2 permite además ser cotejado por medio de la solución exacta obtenida mediante la transformación de Jordan-Wigner. No obstante, también se investiga en detalle su aplicación a sistemas dimerizados de espín s [9]. Un aspecto importante que fue considerado es la ruptura de simetría en el presente contexto general. La ruptura de simetría en la aproximación de campo medio permite describir incluso regiones complejas de transición entre fases dimerizadas y plateaus de magnetización, como se discutirá en los capítulos correspondientes. También se analiza el comportamiento con el espín s y el límite de espín grande.

En la segunda parte de la tesis, se considera la aplicación del concepto de entrelazamiento al propio problema de la definición de tiempo y de la cuantificación de la evolución. El tiempo es la evolución de un sistema respecto de otro de referencia. Desde el principio de la historia, el hombre se las ingenió para tener maneras de cuantificar esta evolución. Ya sea observando los astros u otros sistemas de referencia cada vez más precisos, llamados relojes.

Al ser la física una ciencia que pretende predecir el comportamiento de sistemas, el tiempo mantuvo desde sus inicios un rol preferencial, a tal punto que se desarrolló un problema de compatibilidad en el tratamiento de dicha coordenada.

El estatus especial del tiempo en mecánica clásica, se ve en que es tratado como un parámetro externo al sistema de estudio. Consideración que se mantiene en la formulación estándar de la mecánica cuántica. Es visto como un marco clásico dado a priori, con un valor bien definido. De hecho, el tratamiento clásico del tiempo está profundamente conectado con la interpretación de Copenhagen de la mecánica cuántica y por ende con los fundamentos conceptuales de la teoría cuántica. Según la misma, todas las medidas de observables son hechas en cierto instante de tiempo y solo se asignan probabilidades a dichas medidas.

La relatividad especial modificó la noción de tiempo. Pero desde un punto de vista de un observador fijo, permanece siendo un parámetro externo global absoluto. La noción newtoniana del tiempo esencialmente se traslada a la relatividad especial, escondida en la estructura de espacio-tiempo.

La incorporación del tiempo dentro de una teoría completamente cuántica [10] ha atraído gran atención últimamente [11-20]. Por un lado, por tratarse de un problema

fundamental y un aspecto clave en la conexión con relatividad general. Por otro lado, una descripción cuántica del tiempo nos permitiría explotar las características cuánticas como superposición y entrelazamiento para desarrollar nuevos modelos de simulación paralelos en el tiempo [16].

Como hemos dicho el concepto de tiempo está vinculado a la cuantificación de evolución a través de un sistema físico, llamado reloj. Históricamente las lecturas de este reloj proveían un parámetro externo, llamado tiempo. No obstante, si queremos introducir al tiempo dentro de una teoría completamente cuántica, el reloj debe ser un sistema cuántico él mismo.

En este sentido, presentamos en esta tesis una descripción del sistema y el reloj de referencia por medio de un estado historia sistema-tiempo discreto, el cual impone una evolución unitaria a los estados del sistema. Además, para un estado inicial fijo se muestra que existe siempre una selección adecuada de la base del reloj para la cual la evolución resultante corresponde a un Hamiltoniano constante. Esto define una base especial de tiempo por la que el estado historia satisface una versión discreta de una ecuación tipo Wheeler-DeWitt [21].

El entrelazamiento del estado historia es una medida de número de estados ortogonales del sistema visitados en tiempos ortogonales [16]. Depende en general del estado inicial del sistema y de los operadores evolución. Sin embargo, se muestra que cuando los últimos forman una base ortogonal, el entrelazamiento es siempre *máximo*, independientemente del estado inicial. El estado historia correspondiente se puede generar de forma simple por medio de un esquema de dos relojes, donde los relojes están vinculados a sistemas de variables conjugadas.

Luego, se analiza la entropía de entrelazamiento cuadrática de los estados historia, mostrando que se puede evaluar analíticamente para Hamiltonianos constantes y que está acotada superiormente por la entropía de la dispersión de energía del estado inicial. Por otro lado, se ve que se encuentra acotada inferiormente por la de la evolución geodésica que conecta estados inicial y final [22]. Se observa que su promedio sobre todo estado inicial del sistema es directamente proporcional a la entropía de entrelazamiento cuadrática del operador unitario que genera el estado historia. A través de la dualidad *channel-state* [23, 24], se ve también que el estado puro que representa al último es en sí un estado historia de operador, cuyo entrelazamiento cuadrático determina su *entangling power*. Conjuntamente, se muestra que a través de medidas en el reloj es posible utilizar los estados historia de sistema y de operador para determinar de forma eficiente el *overlap* entre estados del sistema y también la traza del operador evolución para dos tiempos cualesquiera. Lo cual se reduce a la traza del operador unitario (resultado del circuito "Deterministic Quantum Computation With One Quantum Bit: DQC1" [25]) para el caso simple en el que el reloj es un *qubit*.

Finalmente, se discute la posible simulación experimental de estados historia. En primer lugar, se muestra que mediante la aproximación de campo medio de pares, es posible visualizar el estado fundamental de una cadena de espines dimerizada como un estado his-

1 Introducción

toria gracias al formalismo de tiempo propuesto y de esta forma considerar la utilización de estos sistemas como relojes cuánticos de espines.

A su vez, se presenta una realización experimental en la cual se ven reflejadas las principales características del modelo a través de un experimento de óptica cuántica realizado en colaboración con el *Laboratorio de Procesado de Imágenes - UBA* [26]. El mismo consta principalmente de un láser altamente atenuado para poder trabajar a nivel de fotón individual y un modulador de luz espacial.

PUBLICACIONES

Las investigaciones descriptas en esta tesis dieron lugar a las publicaciones científicas indicadas a continuación:

- A. Boette, R. Rossignoli, N. Canosa y J. Matera. «Generalized mean field treatment for dimerized spin chains». *Phys. Rev. B* 91, 2015, pág. 064428. DOI: 10.1103/PhysRevB.91.064428
- A. Boette, R. Rossignoli, N. Canosa y J. Matera. «Pair entanglement in dimerized spin-s chains». *Phys. Rev. B* 94, 2016, pág. 214403. DOI: 10.1103/PhysRevB.94. 214403
- A. Boette, R. Rossignoli, N. Gigena y M. Cerezo. «System-time entanglement in a discrete-time model». *Phys. Rev. A* 93, 2016, pág. 062127. DOI: 10.1103/PhysRevA. 93.062127
- A. Boette y R. Rossignoli. «History states of systems and operators». *Phys. Rev.* A 98, 3 2018, pág. 032108. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.032108

2 Entrelazamiento Cuántico

" Solo sé que no sé nada y, al saber que nada sé, algo sé."

Sócrates

Como se mencionó con anterioridad, una propiedad clave que caracteriza el comportamiento de los sistemas en el régimen cuántico es el llamado Entrelazamiento cuántico. Esta propiedad puede entenderse como la imposibilidad de representar las correlaciones existentes en un sistema cuántico en términos de una distribución estadística sobre posibles configuraciones del sistema, especificables en términos de estados locales definidos. Para entender cómo esta noción es fundamental en la descripción clásica de los sistemas físicos, consideremos por ejemplo el sistema Tierra-Luna-Sol. Para la mecánica newtoniana, estos tres astros son entes distintos, con propiedades independientes. Así, en cada instante el Sol, la Tierra y la Luna cuentan con posiciones y velocidades bien definidas. El efecto de la interacción entre estos cuerpos se reduce entonces a cambiar las velocidades de estos cuerpos en función de las posiciones de los otros. Este marco de trabajo, que podemos llamar *reduccionista*, permite describir y predecir el comportamiento de la mayoría de los sistemas físicos macroscópicos en forma a la vez computacionalmente eficiente y precisa. Sin embargo, al tratar de aplicarlo a sistemas en la escala atómica comienza a mostrar sus fallas: en esta escala, el entrelazamiento implica que para ciertos estados del sistema, las propiedades de las partes no estén bien definidas. Por ejemplo, el estado típico de una molécula de Hidrógeno no puede en general describirse en términos de los estados de los átomos que la conforman: existen observables globales (la energía de la molécula, el impulso angular) que no son compatibles con los observables asociados a los átomos por separado. Esto nos obliga en mecánica cuántica a tratar los sistemas compuestos desde una perspectiva holística, en el sentido de que debemos tratar al sistema como un todo. Una consecuencia inmediata es que la descripción exacta de los sistemas cuánticos se vuelve mucho más compleja que la de su equivalente clásico.

Sin embargo, no todos los sistemas cuánticos parecen requerir de una descripción que aborde toda esa complejidad potencial. Por ejemplo, el sistema Tierra-Sol-Luna en sí es un sistema cuántico. La clave del éxito de su descripción clásica consiste en que en su evolución el estado de cada una de sus partes permanece bien definido. Decimos entonces que el sistema admite descripción en términos de *estados separables*. Por otro lado, la molécula de Hidrógeno típicamente se encuentra en un estado en el que el estado de sus partes

2 Entrelazamiento Cuántico

no está bien definido. Decimos por esto que su descripción requiere considerar *estados entrelazados*. Podemos decir entonces que cuanto más entrelazados se encuentren los estados típicos de un sistema (en un dado régimen) más nos costará representarlos en forma precisa y eficiente a la vez.

La definición y evaluación de medidas que cuantifiquen el grado de entrelazamiento presente en un sistema es una tarea bastante más compleja, tanto desde un punto de vista formal como práctico. En lo que resta del capítulo daremos una definición más formal de lo que es un *estado cuántico entrelazado* [4, 27-29]. Se introducirán entonces algunos elementos de la teoría de la información que nos permitirán definir medidas de entrelazamiento y de correlaciones cuánticas entre partes de un sistema. En los capítulos siguientes, utilizaremos estas cantidades para estudiar algunos aspectos del comportamiento cadenas de espines en el régimen cuántico, así como para analizar la aplicabilidad de la aproximación de *Campo Medio Generalizado* para su descripción.

2.1. Operador Densidad y Entropía de Von Neumann

El estado de un sistema cuántico se puede caracterizar por un *operador densidad* (o matriz densidad) ρ , el cual es un operador hermítico de traza 1 y con todos sus autovalores no negativos:

$$\rho \ge 0, \quad \mathrm{T}r\rho = 1. \tag{2.1}$$

Este operador determina el valor medio de cualquier observable *O*:

$$\langle O \rangle = \operatorname{Tr} \rho O \,. \tag{2.2}$$

La probabilidad de encontrar al sistema en un estado particular $|i\rangle$, (que supondremos normalizado) es entonces

$$p_i = \langle P_i \rangle = \operatorname{Tr} \rho P_i = \langle i | \rho | i \rangle,$$
 (2.3)

donde $P_i = |i\rangle\langle i|$ es el proyector ortogonal sobre el estado $|i\rangle$.

En el caso de un sistema cuántico en un estado puro $|i\rangle$, ρ es entonces el proyector ortogonal sobre el espacio generado por $|i\rangle$:

$$\rho = |i\rangle\langle i|\,,\tag{2.4}$$

y satisface $\rho^2 = \rho$. En el caso general, la descomposición espectral de ρ la escribiremos como

$$\rho = \sum_{i} p_{i} |i\rangle \langle i|, \qquad (2.5)$$

6

donde $\{p_i, i = 1, ..., n\}$ son los autovalores de ρ $(p_i \ge 0, \sum_i p_i = 1)$ y $\{|i\rangle, i = 1, ..., n\}$ los correspondientes autovectores normalizados $(\langle i|i'\rangle = \delta_{ii'})$. El caso puro corresponde a $p_i = 1$ para un cierto estado y 0 para todos los demás. En el caso general, tenemos $\rho^2 \le \rho$ (es decir, $\rho^2 - \rho$ es un operador con autovalores $-p_i(1 - p_i)$ negativos o nulos).

La entropía de von Neumann[4, 30, 31] se define como

$$S(\rho) = -\operatorname{Tr} \rho \log \rho \tag{2.6}$$

$$= -\sum_{i} p_i \log p_i , \qquad (2.7)$$

y es una medida de la falta de información asociada al estado ρ . Tenemos $S(\rho) \ge 0$, con $S(\rho) = 0$ únicamente si ρ es un estado puro ($\rho^2 = \rho$). $S(\rho)$ será por el contrario máxima ($S(\rho) = \log n$ si el espacio de Hilbert del sistema tiene dimensión n) si el estado ρ es máximamente "mezclado" $\rho_n = I_n/n$, donde I_n denota el operador identidad, tal que $p_i = 1/n \forall i$.

2.2. SISTEMAS COMPUESTOS Y ESTADOS REDUCIDOS

Dados dos sistemas cuánticos distinguibles, que denotaremos como A y B, con sendos espacios de Hilbert H_A y H_B y espacio de Hilbert conjunto $H_A \otimes H_B$, el estado conjunto estará determinado por una cierta *matriz densidad conjunta* ρ_{AB} . La entropía conjunta es por lo tanto

$$S(A,B) = S(\rho_{AB}) = -\operatorname{Tr} \rho_{AB} \log \rho_{AB}.$$
(2.8)

Un observable *local* en el sistema A es un observable de la forma $O_A \equiv o_A \otimes I_B$, donde I_B denota la identidad en H_B . Su valor medio es entonces

$$\langle O_A \rangle = \operatorname{Tr} \rho_{AB} O_A = \operatorname{Tr}_A \rho_A o_A,$$
 (2.9)

donde hemos definido la matriz densidad reducida [4, 30]

$$\rho_A = \operatorname{Tr}_B \rho_{AB} \tag{2.10}$$

la cual determina completamente los valores medios de todo observable local en A. Explícitamente, $\langle i|\rho_A|j\rangle = \sum_k \langle ik|\rho_{AB}|jk\rangle$, donde $|ik\rangle \equiv |i\rangle \otimes |k\rangle$ son los estados de una base producto ortonormal de $H_A \otimes H_B$. Análogamente,

$$\rho_B = \operatorname{Tr}_A \rho_{AB} \,,$$

determina los valores medios de cualquier operador local O_B en B. Las entropías locales son

$$S(A) = -\operatorname{Tr} \rho_A \log \rho_A, \quad S(B) = -\operatorname{Tr} \rho_B \log \rho_B.$$

El estado conjunto es no correlacionado si y solo si $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$, es decir, si y solo si es un estado producto, en cuyo caso sus autovalores son $p_{ij} = p_i^A p_j^B$ con p_i^A y p_j^B los autovalores de ρ_A y ρ_B respectivamente. En tal caso las entropías satisfacen S(A, B) =S(A) + S(B), como es fácil ver de la definición (2.8).

2.3. Información Mutua y Entropía Condicional

Podemos ahora definir la información mutua como

$$I(A:B) = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}).$$
(2.11)

Esta cantidad es una medida de la correlación (total) entre A y B [4, 30]. Si $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$, $S(\rho_{AB}) = S(\rho_A) + S(\rho_B)$ y por lo tanto I(A : B) = 0. En caso contrario I(A : B) > 0.

Esta positividad de I(A : B) es conceptualmente evidente: S(A) + S(B) es una medida de la falta de información cuando sólo se dispone de información sobre los valores medios de todos los observables locales (es decir, cuando se conoce sólo $\rho_A y \rho_B$), mientras que S(A, B) mide la falta de información cuando se conoce además toda la información sobre las correlaciones, es decir, sobre todos los valores medios de observables generales del tipo $O_{AB} = o_A \otimes o_B$. Por lo tanto $S(A, B) \leq S(A) + S(B)$.

Clásicamente, es decir, para sistemas descriptos por densidades de probabilidad, se tiene además

$$S(A,B) \ge S(A), \quad S(A,B) \ge S(B) \tag{2.12}$$

Las entropías condicionales S(A|B) y S(B|A) pueden definirse como

$$S(A|B) = S(A,B) - S(B), \quad S(B|A) = S(A,B) - S(A)$$
(2.13)

y son por lo tanto cantidades no negativas en sistemas clásicos.

Sin embargo, la desigualdad (2.12) no sigue siendo válida en sistemas cuánticos, es decir, en sistemas descriptos por operadores densidad. En otras palabras, en sistemas cuánticos la entropía global puede ser menor que las entropías locales, y las entropías condicionales definidas como en (2.13) pueden por lo tanto ser negativas.

A modo de ejemplo, consideremos un par de qubits o espines 1/2 en un estado de Bell, por ejemplo

$$|\Psi\rangle = \frac{|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}, \qquad (2.14)$$

donde $|\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$ denota un estado con ambos espines en la dirección z positiva. El estado $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ es un estado puro y por lo tanto,

$$S(\rho_{AB}) = 0.$$

No obstante, los estados reducidos son máximamente mezclados:

$$\rho_A = \rho_B = \frac{1}{2}I_2 = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|).$$

Por lo tanto,

$$S(\rho_A) = S(\rho_B) = 1$$
, (2.15)

tomando el logaritmo en base 2. Esto implica S(A) = S(B) > S(A, B) = 0, a diferencia de cualquier sistema clásico. Más aun, los estados locales están máximamente mezclados (es decir, máximamente "desordenados") a pesar de que el estado global es puro (es decir, máximamente "ordenado"). Para este estado tenemos entonces

$$I(A:B) = 2$$
$$S(A|B) = S(B|A) = -1.$$

Como veremos a continuación, la violación de las desigualdades clásicas (2.12) puede darse solo cuando el estado ρ es entrelazado.

2.4. Entrelazamiento de Estados Puros

Si un estado cuántico puro $|\Psi_{AB}\rangle$ de un sistema conjunto A + B se puede escribir como estado producto, no posee entrelazamiento y se lo denomina *separable*. Por otro lado un estado *entrelazado* no puede descomponerse en un producto de estados:

$$|\Psi_{AB}\rangle = |\Psi_A\rangle|\Psi_B\rangle \Rightarrow |\Psi_{AB}\rangle \ separable$$
 (2.16)

$$|\Psi_{AB}\rangle \neq |\Psi_{A}\rangle|\Psi_{B}\rangle \Rightarrow |\Psi_{AB}\rangle entrelazado$$
 (2.17)

Las entropías de los subsistemas de un estado puro son idénticas (véase (2.22) y permiten definir la *entropía de entrelazamiento* [4, 28], que cuantifica el entrelazamiento de un estado cuántico puro bipartito, como

$$E(A, B) = S(A) = S(B).$$
 (2.18)

E(A, B) es una medida de las correlaciones cuánticas en el estado. Si $|\Psi_{AB}\rangle$ es separable, entonces $\rho_A = |\Psi_A\rangle\langle\Psi_A|, \rho_B = |\Psi_B\rangle\langle\Psi_B|$ y E(A, B) = 0.

2 Entrelazamiento Cuántico

En el caso puro E(A, B) es menos la entropía condicional:

$$S(A|B) = S(B|A) = -E(A,B),$$
 (2.19)

pues S(A, B) = 0. Mientras que la correspondiente información mutua es

$$I(A:B) = S(A) - S(A|B) = 2S(A) = 2E(A,B).$$
(2.20)

Podemos considerar a I(A : B) como una medida de todas las correlaciones en el sistema, mientras que a E(A, B) como una medida de correlaciones puramente cuánticas.

Una forma de determinar si un estado cuántico es entrelazado es a través de la *descomposición de Schmidt* del estado [4]: Existen siempre bases locales $\{|k_A\rangle\}$ y $\{|k_B\rangle\}$ ortonormales, en las que $|\Psi\rangle$ puede escribirse en la forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{n_s} \sigma_k |k_A\rangle |k_B\rangle, \qquad (2.21)$$

donde n_s es el número de Schmidt y $\sigma_k > 0$, $\sum_{k=1}^{n_s} \sigma_k^2 = 1$. Las matrices densidad reducidas están entonces dadas por

$$\rho_A = \sum_k \sigma_k^2 |k_A\rangle \langle k_A|, \quad \rho_B = \sum_k \sigma_k^2 |k_B\rangle \langle k_B|. \quad (2.22)$$

Estas son isospectrales por lo que S(A) = S(B). El caso separable corresponde a $n_s = 1$, donde E(A, B) = 0, mientras que el caso entrelazado a $n_s \ge 2$, en el que

$$E(A, B) = -\sum_{k=1}^{n_s} \sigma_k^2 \log(\sigma_k^2)$$
 (2.23)

La descomposición de Schmidt puede obtenerse a partir de la descomposición en valores singulares de la matriz de los coeficientes de expansión de $|\Psi\rangle$ en una base producto ortogonal, arbitraria [4], siendo los σ_k los valores singulares de dicha matriz. En el caso del estado de Bell (ecuación 2.14), ya está expresado en una base de Schmidt, con $n_s = 2$ y $\sigma_1 = \sigma_2 = 1/\sqrt{2}$.

El entrelazamiento es considerado un *recurso esencial* en información cuántica [4, 27], ya que permite formas radicalmente nuevas de intercambio y procesamiento de la información, tales como la teleportación cuántica [32] y la computación cuántica [4].

2.5. Entrelazamiento de Estados no Puros

La definición de entrelazamiento cuántico es más compleja para estados ρ generales no necesariamente puros ($\rho^2 \leq \rho$). De hecho, en el caso general no es posible obtener un método general para determinar si el estado es entrelazado, en un número finito de pasos. Por lo tanto tampoco es posible obtener una medida computable del mismo.

Según la definición introducida por R.F. Werner en 1989 [33], un estado cuántico general es *entrelazado* si no es *separable* o *clásicamente correlacionado*, en cuyo caso puede ser escrito como una combinación convexa de estados producto, es decir, una superposición estadística de estados no correlacionados:

$$\rho = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \rho_A^{\alpha} \otimes \rho_B^{\alpha}, \ q_{\alpha} \ge 0, \quad \Rightarrow \quad \rho \ separable \tag{2.24}$$

$$\rho \neq \sum_{\alpha} q_{\alpha} \rho_A^{\alpha} \otimes \rho_B^{\alpha}, \quad q_{\alpha} \ge 0, \quad \Rightarrow \quad \rho \ entrelazado$$
(2.25)

donde $\sum_{\alpha} q_{\alpha} = 1$. En particular, un estado producto $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$, es decir, un estado no correlacionado, es un estado separable. Pero también lo es cualquier combinación convexa de los mismos. El argumento [33] es que los estados separables pueden ser generados mediante operaciones locales y comunicación clásica (es decir, por (*LOCC: Local Operations and Classical Communication*) [4]) y por lo tanto no contienen correlaciones cuánticas.

En otras palabras, dos personas a cierta distancia pueden, a través de comunicación clásica, acordar preparar un estado producto $|\Psi_A\rangle|\Psi_B\rangle$, pero también una combinación estadística de estados producto: A tira un dado y de acuerdo al valor de este prepara $|\Psi_A^{\alpha}\rangle$, $\alpha = 1, \ldots, 6$ y avisa a B, quien prepara el correspondiente estado $|\Psi_B^{\alpha}\rangle$, originando así una combinación convexa del tipo (2.24) ($\rho = \sum_{\alpha=1}^{6} \frac{1}{6} |\Psi_A^{\alpha}\rangle \langle \Psi_A^{\alpha}| \otimes |\Psi_B^{\alpha}\rangle \langle \Psi_B^{\alpha}|$).

Por otro lado un estado entrelazado no puede ser escrito de la forma anterior con coeficientes q_{α} positivos. Estos se generan únicamente por medio de una interacción cuántica entre los sistemas. Pueden generarse como autoestados de un Hamiltoniano que contenga términos de interacción $\sum_{\alpha} o^{\alpha}_{A} \otimes o^{\alpha}_{B}$, o haciendo evolucionar un estado inicialmente separable con un Hamiltoniano del tipo anterior [4, 34] (de forma que el operador evolución $U(t) = \exp[-iHt/\hbar]$ no sea un producto de operadores de evolución locales $U_{A}(t) \otimes U_{B}(t)$).

Los estados ρ diagonales en una base producto: $\rho = \sum_{i,j} p_{ij} |ij\rangle \langle ij|$ son un caso particular de estado separable. En el caso general, los distintos términos en (2.24) no son necesariamente conmutantes.

En el caso puro, la definición (2.24) coincide por supuesto con la previa dada en la ecuación (2.17): Si $\rho_{AB}^2 = \rho_{AB}$, la combinación convexa (2.24) es necesariamente un estado producto $\rho_A \otimes \rho_B$, con ρ_A y ρ_B puros.

2.6. Criterios Básicos de Separabilidad

En general, excepto en casos simples como el de dos qubits, no es fácil determinar si un estado no puro, es separable o entrelazado. En realidad es un problema considerado en general "*hard*" [35].

El criterio de la traspuesta parcial, introducido por Asher Peres en 1996 [36], proporciona un criterio de separabilidad simple, computable y necesario, pero en general no suficiente. Es decir,

$$\rho_{AB} \ separable \ \Rightarrow \rho_{AB}^{t_A} \ge 0 \,,$$
(2.26)

donde t_A denota trasposición parcial [4] ($\langle ij | \rho_{AB}^{t_A} | kl \rangle = \langle kj | \rho_{AB} | il \rangle$). Es decir, si $\rho_{AB}^{t_A}$ tiene algún autovalor negativo entonces ρ_{AB} es entrelazado. Pero si todos sus autovalores son no-negativos puede ser aún entrelazado. Sólo en el caso de dos qubits o qubit/qutrit, el presente criterio es necesario y suficiente [36, 37].

El criterio entrópico estándar se basa en que los estados separables al igual que los sistemas clásicos, son siempre más desordenados globalmente que localmente [37]:

$$\rho \text{ separable } \Rightarrow S(A, B) \ge S(A),$$
(2.27)

y análogamente, $S(A, B) \ge S(B)$. Corresponden pues a entropías condicionales S(A|B)y S(B|A) positivas.

Los estados entrelazados pueden satisfacer, como vimos, S(A, B) < S(A), pero a diferencia del caso puro, en el caso no puro esta condición no es necesaria: Existen también estados entrelazados que son más desordenados globalmente que localmente (S(A, B) >S(A), S(A, B) > S(B)). Notemos también que en el caso no puro, S(A) no es necesariamente igual a S(B).

El presente criterio entrópico (ρ_{AB} separable $\Rightarrow S(A, B) \geq S(A)$) puede generalizarse en realidad a otras entropías mucho más generales (por ejemplo, del tipo $S(\rho) =$ $\text{Tr}f(\rho)$, con f cóncava y f(0) = f(1) = 0 [38]), dando lugar al criterio entrópico generalizado [39], que es más fuerte que el criterio entrópico basado en la entropía de von Neumann [37] y equivalente al criterio general de desorden [40].

2.7. Medidas de Entrelazamiento

La medida de entrelazamiento en estados no puros es un tema que no está cerrado y es aún más difícil. Usualmente se utiliza como medida el entrelazamiento de formación, definido por la denominada "*Convex Roof Extension*" de la definición para estados puros [27, 29]:

$$E(A,B) \equiv E(\rho_{AB}) = \min_{\sum_{i} q_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i| = \rho_{AB}} \sum_{i} q_i E(|\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|)$$
(2.28)

es decir, es el mínimo, entre todas las representaciones posibles de ρ_{AB} como combinación convexa de estados puros $|\Psi_i\rangle$ (no necesariamente ortogonales), del promedio del entrelazamiento en los mismos, definido de acuerdo a (2.18). En general, la cantidad (2.28) no es computable de forma exacta.

2.7.1. Concurrencia

La gran excepción es el caso de dos qubits (o sea, dos sistemas con espacio de Hilbert local de dimensión 2, tal como un par de espines 1/2), donde W.K. Wootters logró obtener una fórmula general computable en 1998 por medio de la llamada concurrencia C_{AB} [41]:

$$E(A,B) = -\sum_{\nu=\pm} q_{\nu} \log q_{\nu}, \qquad (2.29)$$

donde

$$q_{\nu} = \frac{1 \pm \sqrt{1 - C^2(A, B)}}{2},$$
 (2.30)

$$C(A,B) = \operatorname{Max}[2\lambda_M - \operatorname{Tr} R, 0]. \qquad (2.31)$$

Aquí λ_M es el autovalor máximo de la matriz $R = \sqrt{\rho_{AB}^{1/2} \tilde{\rho}_{AB} \rho_{AB}^{1/2}}$, con $\tilde{\rho}_{AB} = \sigma_y \otimes \sigma_y \rho_{AB}^* \sigma_y \otimes \sigma_y$ en la base estándar, compuesta por los autoestados producto de $\sigma_z \otimes \sigma_z$. Aquí $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ denota las matrices de Pauli.

Se verifica

$$0 \le C(A, B) \le 1, \ 0 \le E(A, B) \le 1$$
 (2.32)

con E(A, B) = C(A, B) = 1 para un estado de Bell (que es, por lo tanto, un estado máximamente entrelazado), y E(A, B) = C(A, B) = 0 para un estado separable, siendo E(A, B) una función estrictamente creciente de C(A, B).

Para el caso de un estado puro arbitrario de dos qubits, se ve que (2.29) se reduce a la entropía S(A) = S(B) de cualquiera de los qubits, dada por la expresión (2.23) con $n_s = 2$. En tal caso $C(A, B) = 2\sqrt{\sigma_1 \sigma_2}$.

2.7.2. Negatividad

La negatividad es un estimador de entrelazamiento computable para estados mixtos de cualquier dimensión [42-44], definida por

$$N_{AB} = (\text{Tr} |\rho_{AB}^{t_A}| - 1)/2, \qquad (2.33)$$

2 Entrelazamiento Cuántico

donde $\rho_{AB}^{t_2}$ denota la traspuesta parcial de ρ_{AB} . La Ec. (2.33) es simplemente el valor absoluto de la suma de los autovalores negativos de $\rho_{AB}^{t_A}$. Si ρ_{AB} es un estado puro ($\rho_{AB} = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$), la Ec. (2.33) se reduce a una entropía de entrelazamiento generalizada,

$$N_{AB} = [(\text{Tr}\,\sqrt{\rho_A})^2 - 1]/2 = \sum_{i < j} \lambda_i^1 \lambda_j^1$$
(2.34)

donde $\rho_A = \text{Tr}_B |\psi_0\rangle \langle \psi_0 |$ es el estado reducido de A y λ_i^1 sus autovalores. En este caso el estado es entrelazado si y solo si $N_{AB} > 0$. Consecuentemente, la Ec. (2.34) se anula para ρ_A puro ($|\psi_0\rangle$ separable), y alcanza su máximo para ρ_A máximamente mezclado (es decir, $|\psi_0\rangle$ máximamente entrelazado), en cuyo caso $N_{AB} = (d-1)/2$, con $d = \text{Min}[d_A, d_B]$ (en particular, $N_{AB} = s$ para un par de espines s).

En el caso mixto general, $N_{AB} > 0$ implica entrelazamiento de ρ_{AB} , pero $N_{AB} = 0$ no implica necesariamente separabilidad, salvo para sistemas qubit-qubit o qubit-qutrit [37], ya que existen ciertos estados mixtos entrelazados (*bound entangled states*) que igualmente cumplen $N_{AB} = 0$. No obstante, dada su computabilidad, N_{AB} es corrientemente utilizada como una medida o estimador de entrelazamiento de estados mixtos.

2.8. Fidelidad

La fidelidad [4] es una medida de la distancia entre dos estados cuánticos (puros o no puros). Se define como

$$F(\rho, \rho') = \text{Tr} \sqrt{\rho^{1/2} \rho' \rho^{1/2}}$$
 (2.35)

Para estados puros $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|, \rho' = |\psi'\rangle\langle\psi'|, F(\rho, \rho')$ se reduce al modulo del *overlap*:

$$F(\rho, \rho') = |\langle \psi | \psi' \rangle|.$$
(2.36)

En ambos casos, la fidelidad es un número entre 0 y 1,

$$0 \le F \le 1\,,$$

con $F(\rho, \rho') = 1$ si y solo si $\rho = \rho'$ y $F(\rho, \rho') = 0$ si y solo si ρ y ρ' tienen soportes ortogonales.

La fidelidad está relacionada con otra cantidad que mide cuan diferentes son dos estados, conocida como medida o métrica de Wootters. Esta última puede evaluarse en función de la primera por la relación

$$B(\rho, \rho') = \arccos F(\rho, \rho') \tag{2.37}$$

Esta medida define una distancia entre los operadores estadísticos, ya que es una cantidad semidefinida positiva y simétrica que satisface la desigualdad triangular ($B(\rho, \rho') \leq B(\rho, \rho'') + B(\rho'', \rho')$).

3 Aproximación General de Campo Medio

"On ne voit bien qu'avec le coeur. L'essentiel est invisible pour les yeux."

Antoine de Saint-Exupéry

En este capítulo se introduce una aproximación de campo medio generalizado autoconsistente para sistemas compuestos, basada en una definición general de subsistemas independientes [8, 45-51], para la descripción de correlaciones y entrelazamiento cuántico en los mismos. Remarquemos que resolver de forma exacta estos sistemas es extremadamente difícil y requiere recursos que crecen exponencialmente con el tamaño del sistema. A diferencia del enfoque de campo medio tradicional, que omite las correlaciones, el esquema propuesto permite incorporar correlaciones en forma exacta dentro determinados subsistemas, al redefinir el "sitio" o unidad, permaneciendo a la vez tratable. En otras palabras, los recursos requeridos aquí crecen linealmente con el número de componentes.

3.1. Formalismo

El estado térmico canónico para un sistema a temperatura T descripto por un Hamiltoniano H es

$$\rho_H = \exp[-\beta H]/Z_H \,, \tag{3.1}$$

donde $\beta = 1/kT$ y Z_H es la función de partición (Tr $\rho_H = 1$). Como es sabido, este estado minimiza la energía libre funcional

$$F(\rho) = \langle H \rangle_{\rho} - TS(\rho) , \qquad (3.2)$$

donde $\langle H \rangle_{\rho} = \text{Tr } \rho H$ y $S(\rho) = -k \text{Tr} \rho \log \rho$ es la entropía de von Neumann, con ρ un estado mezcla general, normalizado. La energía libre exacta es entones $F(\rho_H) = -kT \ln Z_H$.

3 Aproximación General de Campo Medio

Se puede formular una aproximación variacional general para la Ec. (3.1), basada en el estado de prueba

$$\rho_h = \exp[-\beta h]/Z_h, \quad h = \sum_i \lambda_i O_i \,, \tag{3.3}$$

donde $\{O_i, i = 1, ..., m\}$ es un conjunto restringido de operadores linealmente independientes y λ_i son parámetros optimizables, determinados a través de la minimización de $F(\rho_h)$. En esta instancia es conveniente considerar los promedios $\langle O_i \rangle_{\rho_h} \equiv \text{Tr}\rho_h O_i$, funciones de λ_i , como parámetros independientes, dado que $\partial S(\rho_h) / \partial \langle O_i \rangle_{\rho_h} = \beta \lambda_i$. Las condiciones $\frac{\partial F(\rho_h)}{\partial \langle O_i \rangle_{\rho_h}} = 0$ dan lugar a las ecuaciones de *autoconsistencia* [8, 46-48]

$$\lambda_i = \frac{\partial \langle H \rangle_{\rho_h}}{\partial \langle O_i \rangle_{\rho_h}}, \qquad (3.4)$$

que implican la expresión general de autoconsistencia

$$h = \sum_{i} \frac{\partial \langle H \rangle_{\rho_h}}{\partial \langle O_i \rangle_{\rho_h}} O_i \,, \tag{3.5}$$

tal que *h* dependa de los promedios que determina. Si los O_i forman un conjunto completo, *H* es una función lineal de éstos y Ec. (3.5) da lugar a h = H (Ec. (3.1)). Sin embargo, en el caso de aproximación general, la Ec. (3.5) no es lineal y puede proveer distintas soluciones, de las cuales se debe seleccionar la que minimice $F(\rho_h)$.

La Ec. (3.5) es fácil de aplicar cuando $\langle H \rangle_h$ puede ser expresado explícitamente en términos del conjunto restringido de promedios $\langle O_i \rangle_{\rho_h}$. Por ejemplo, en un sistema fermiónico las Ecs. (3.4) devienen las ecuaciones térmicas de Hartree-Fock-Bogoliubov si los $O'_i s$ están restringidos a operadores de un cuerpo generales (es decir, $c^{\dagger}_{\mu}c_{\nu}, c^{\dagger}_{\mu}c^{\dagger}_{\nu} y c_{\mu}c_{\nu})$ y las trazas están tomadas en el ensamble gran canónico (con $H \rightarrow H - \mu N, N = \sum_{\nu} c^{\dagger}_{\nu} c_{\nu}$, tal que F deviene el gran potencial), en cuyo caso $\langle H \rangle_{\rho_h}$ puede ser fácilmente expresable en términos de contracciones de un cuerpo a través del teorema de Wick. Se pueden utilizar consideraciones similares para el caso bosónico.

3.2. Sistemas Compuestos

En esta instancia estamos interesados en aplicar el enfoque general a un sistema compuesto formado por N subsistemas distinguibles, como por ejemplo espines o arreglos de espines en diferentes sitios, donde el espacio de Hilbert total es $\bigotimes_{i=1}^{N} S_i$, con S_i el correspondiente al subsistema i. Para un Hamiltoniano general que contenga acoplamientos entre los subsistemas, se debería considerar una aproximación basada en operadores "locales" $O_{i\mu}$, tal que $[O_{i\mu}, O_{j\nu}] = \delta_{ij}O_{i\mu\nu}$ y

$$h = \sum_{i} h_{i}, \quad h_{i} = \sum_{\mu} \lambda_{i\mu} O_{i\mu}, \quad (3.6)$$

$$\rho_h = \bigotimes_{i=1}^n \rho_i, \quad \rho_i = \exp[-\beta h_i]/Z_{h_i}.$$
(3.7)

El esquema previo da lugar al estado producto óptimo ρ_h (en el sentido de que que minimiza F) si los $O_{i\mu}$ forman un conjunto completo $\forall i$. Por ejemplo, si H solo contiene términos locales y acoplamientos de "dos sitios",

$$H = \sum_{i,\mu} B_{i\mu} O_{i\mu} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j,\mu,\nu} J_{i\mu j\nu} O_{i\nu} O_{j\mu} , \qquad (3.8)$$

donde $V_{i\mu j\nu} = V_{j\nu i\mu}$, luego $\langle O_{i\mu}O_{j\nu}\rangle_{\rho_h} = \langle O_{i\mu}\rangle_{\rho_i}\langle O_{j\nu}\rangle_{\rho_j}$ para $i \neq j$ y

$$\lambda_{i\mu} = B_{i\mu} - \sum_{j,\nu} J_{i\mu j\nu} \langle O_{j\nu} \rangle_{\rho_j} \,. \tag{3.9}$$

Estas son las ecuaciones de campo medio autoconsistente generales, que dan lugar a

$$h_i = \sum_{\mu} \left[B_{i\mu} - \sum_{j \neq i,\nu} J_{i\mu j\nu} \langle O_{j\nu} \rangle_j \right] O_{i\mu} \,. \tag{3.10}$$

El Hamiltoniano efectivo local h_i depende así del estado de los sitios restantes. Esto, a su vez, permite reescribir H como

$$H = h + \langle V \rangle_h - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j, \mu, \nu} J_{i\mu j\nu} \tilde{O}_{i\mu} \tilde{O}_{j\nu} , \qquad (3.11)$$

donde $V = \frac{1}{2} \sum_{i,\mu,j,\nu} J_{i\mu j\nu} O_{i\mu} O_{j\nu}$, $\tilde{O}_{i\mu} = O_{i\mu} - \langle O_{i\mu} \rangle_{\rho_i}$. El último término en (3.11) es la interacción residual.

En un sistema de espines, la aproximación de campo medio estándar corresponde a identificar el "sitio" con un *solo* espín. El presente enfoque permite considerar a su vez sitios *compuestos*, tales como *pares de espines* o *arreglos de espines arbitrarios*. Esto es obviamente conveniente si estos pares o arreglos están internamente fuertemente acoplados, pero interactúan solo débilmente entre ellos. El esquema tratará entonces a los acoplamientos internos de forma exacta, dejando la aproximación de campo medio solo para los acoplamientos débiles. Luego, el campo medio va a depender fuertemente de la definición del sitio.

3.3. Límite T = 0 y Correcciones Perturbativas

Aquí nos enfocamos en el caso particular del límite $T \to 0$, donde ρ_h pasa a ser proporcional al proyector sobre el subespacio del estado fundamental de h. Si es no-degenerado, ρ_h deviene un proyector producto de estados puros $|0_h\rangle\langle 0_h|$, donde

$$|0_h\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |0_i\rangle \tag{3.12}$$

 $\operatorname{con} |0_i\rangle$ el estado fundamental del Hamiltoniano autoconsistente local h_i . El presente tratamiento proporciona entonces el estado producto con la mínima energía media $\langle H \rangle_{\rho_h}$. Tal estado, de manera evidente, va a depender fuertemente de la definición de sitio utilizada.

No obstante, denotando como $|n_i\rangle$ a los autoestados de h_i ,

$$h_i |n_i\rangle = \varepsilon_{n_i} |n_i\rangle,$$
 (3.13)

se puede ver de la Ec. (3.11) que H conectará $|0_h\rangle$ solo con excitaciones de *dos sitios* $|n_im_j\rangle$, $i \neq j, nm \neq 0$, donde todos los sitios están en su estado fundamental, excepto los sitios i y j, los cuales están en estados excitados n y m respectivamente. El estado fundamental de campo medio es entonces siempre estable frente excitaciones de *un sitio*, sin importar si el sitio está definido como espín solo, un par o un arreglo de espines.

Explícitamente, para excitaciones de un sitio tenemos que el elemento de matriz $\langle n_i 0_j | H | 0_i 0_j \rangle$ es nulo: de la Ec. (3.11) podemos ver que de los tres términos que aparecen, los dos primeros se anulan trivialmente mientras que el último da lugar a una sumatoria sobre términos $\langle n_i | \tilde{O}_{i\mu} | 0_i \rangle \langle 0_j | \tilde{O}_{j\nu} | 0_j \rangle$, donde claramente se ve que se anula el segundo factor. Esto no sucede para excitaciones de dos sitios en las cuales el estado $\langle 0_j |$ pasa a ser $\langle m_j |$.

Las correcciones de primer orden (en la interacción residual) proporcionan el estado fundamental perturbado

$$|0_{H}^{1}\rangle \propto |0_{h}\rangle + \sum_{i < j,m,n > 0} \alpha_{in,jm} |n_{i}m_{j}\rangle,$$
 (3.14)

$$\alpha_{in,jm} = \sum_{\mu,\nu} J_{i\mu j\nu} \frac{\langle n_i | O_{i\mu} | 0_i \rangle \langle m_j | O_{j\nu} | 0_j \rangle}{\varepsilon_{n_i} - \varepsilon_{0_i} + \varepsilon_{m_j} - \varepsilon_{0_j}} \,. \tag{3.15}$$

Correlaciones entre "sitios" pueden estimarse de esta forma, aunque aquellas dentro del sitio ya son descriptas por $|0_i\rangle$ si el sitio es compuesto [8].

3.4. SISTEMAS CON INVARIANCIA TRASLACIONAL

Consideremos ahora el caso en el que todos los sitios son idénticos, es decir, todos tienen el mismo espacio de Hilbert S_i . Además, supondremos primero un sistema de una dimensión donde

$$B_{i\mu} = B_{\mu}, \quad J_{i\mu j\nu} = J_{\mu\nu}(i-j) = J_{\nu\mu}(j-i),$$
(3.16)

tal que H sea invariante frente a traslaciones si el sistema es infinito o cíclico (el sitio N + ies equivalente al sitio i, con $J_{\mu\nu}(-l) = J_{\mu\nu}(N - l)$). Si esta simetría no es rota por el campo medio, es decir, si $\lambda_{i\mu} = \lambda_{\mu} \forall i$, luego $\langle O_{i\mu} \rangle_i \equiv \langle O_{\mu} \rangle$ pasa a ser independiente de i y la Ec. (3.9) deviene

$$\lambda_{\mu} = B_{\mu} - \sum_{\nu} J_{\mu\nu} \langle O_{\nu} \rangle, \ \ J_{\mu\nu} \equiv \sum_{l>0} J_{\mu\nu}(l) \,.$$

En otras palabras, el enfoque se vuelve equivalente a un problema de campo medio *local* con acoplamientos $J_{\mu\nu}$ (acoplamiento "total"). Lo mismo vale para redes infinitas o cíclicas, de dos o tres dimensiones (simplemente reemplazando l por l). El estado perturbado (3.14) pasa a ser

$$|0_{H}^{1}\rangle \propto |0_{h}\rangle + \sum_{l>0,m,n>0} \alpha_{nm}(l) |nm(l)\rangle, \qquad (3.17)$$

$$\alpha_{nm}(l) = \sum_{\mu,\nu} J_{\mu\nu}(l) \frac{\langle n|O_{\mu}|0\rangle \langle m|O_{\nu}|0\rangle}{\varepsilon_n + \varepsilon_m - 2\varepsilon_0} , \qquad (3.18)$$

donde $|nm(l)\rangle = \sum_{i} |n_i m_{i+l}\rangle$ son los estados invariantes frente a traslaciones (sin normalizar) asociados a excitaciones de pares con separación l.

La excitación de un sitio $|n_i\rangle$ se vuelve N veces degenerada a nivel de campo medio $(\varepsilon_{n_i} = \varepsilon_n)$ para una cadena de N sitios invariante frente a traslaciones. Correcciones de primer orden proporcionan la energías de excitación

$$E_n^{1k} \approx \varepsilon_n - \varepsilon_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} J_{\mu\nu}^k \langle n | O_\mu | 0 \rangle \langle 0 | O_\nu | n \rangle$$
(3.19)

donde k = 0, ..., N - 1 y

$$J_{\mu\nu}^{k} = \sum_{l} e^{-i2\pi k l/N} J_{\mu\nu}(l)$$
 (3.20)

21

son las transformadas de Fourier discretas (*DFT: Discrete Fourier Transform*) de los acoplamientos $J_{\mu\nu}(l)$. Los estados excitados correspondientes son $|n_k\rangle = \sum_j e^{i2\pi k j/N} |n_j\rangle/\sqrt{N}$. En redes de dimensión $d, e^{-i2\pi k l/N} \rightarrow e^{-i2\pi k \cdot \tilde{l}}$, con $\boldsymbol{k} = (k_1, \ldots, k_d), \boldsymbol{l} = (l_1/N_1, \ldots, l_d/N_d)$.

3.5. Estados Reducidos

En esta parte del presente trabajo de Tesis, nos enfocamos principalmente en la capacidad de la aproximación general de campo medio para predecir estados locales y sus correlaciones. Usando el estado perturbado (3.14), se puede obtener el estado reducido del sitio *i* como

$$\rho_i^1 = \operatorname{Tr}_{\overline{i}} |0_H^1\rangle \langle 0_H^1|$$

= $|0_i\rangle \langle 0_i|(1-\sum_{n>0}\beta_{nn}^i) + \sum_{n,m>0}\beta_{nm}^i|n_i\rangle \langle m_i|$ (3.21)

donde $\beta_{nm}^i = (\alpha \alpha^{\dagger})_{in,im}$. Correlaciones a $\rho_i^0 = |0_i\rangle\langle 0_i|$ son de orden $O(J^2)$. Este estado ya no es más puro, y su entropía

$$S(\rho_i) = -\mathrm{Tr}\rho_i \ln \rho_i \,, \tag{3.22}$$

mide el entrelazamiento entre el sitio i y el resto de la cadena.

Con el fin de analizar las correlaciones entre sitios débilmente correlacionados, necesitaremos, a su vez, el estado reducido de dos sitios

$$\rho_{ij}^{1} = \operatorname{Tr}_{ij} |0_{H}^{1}\rangle \langle 0_{H}^{1}| = |0_{i}0_{j}\rangle \langle 0_{i}0_{j}|(1-\gamma)
+ \sum_{n,m>0} [\beta_{nm}^{jj}|0_{i}n_{j}\rangle \langle 0_{i}m_{j}| + \beta_{nm}^{ii}|n_{i}0_{j}\rangle \langle m_{i}0_{j}|
+ (\beta_{mn}^{ij}|n_{i}0_{j}\rangle \langle 0_{i}m_{j}| + h.c.)]
+ \sum_{n,m,p,q>0} \alpha_{in,jm} \bar{\alpha}_{ip,jq}|n_{i}m_{j}\rangle \langle p_{i}q_{j}|$$
(3.23)

donde $\beta_{nm}^{ij} = \sum_{l \neq i, j, p > 0} \alpha_{in, lp} \bar{\alpha}_{jm, lp}$, y $\gamma = \sum_{n > 0} \beta_{nn}^{ii} + \beta_{nn}^{jj} + \sum_{n, m > 0} |\alpha_{in, jm}|^2$. Se verifica que $\rho_i^1 = \text{Tr}_j \rho_{ij}^1$. Para un sistema invariante frente a traslaciones ρ_{ij} dependerá obviamente solo de j - i.

3.6. Ruptura de Simetría

Por supuesto, el "poder" real de la aproximación de campo medio subyace en la posibilidad de romper alguna simetría esencial del Hamiltoniano. Esta ruptura es la única forma de describir, a nivel de campo medio, efectos no perturbativos debidos a la interacción entre sitios (no de los internos, los cuales son tratados de forma exacta). Usualmente, en la ρ_H exacta tenemos $\langle O_{i\mu}O_{j\nu}\rangle \neq 0$ pero $\langle O_{i\mu}\rangle = \langle O_{j\nu}\rangle = 0$, anulación que se debe normalmente a cuestiones de simetría básicas. En tal caso el enfoque de campo medio tratará de producir una solución que rompa la simetría con $\langle O_{i\mu}\rangle \neq 0$, $\langle O_{j\nu}\rangle \neq 0$ si el acoplamiento es de magnitud suficiente. Este tipo de solución será degenerada, y un estado correcto será obtenido por la superposición de las soluciones de campo medio degeneradas con la simetría adecuada. Esta superposición no será un estado producto y contendrá de por sí correlaciones.

En este caso, estamos esencialmente interesados en una ruptura de simetría discreta (simetría de paridad de espín) tal que la aproximación de campo medio proveerá un par de soluciones degeneradas ρ_{h_+} , ρ_{h_-} correspondientes a los Hamiltonianos autoconsistentes h_+ , h_- , dando lugar a signos opuestos en algunos de los promedios $\langle O_{\mu i} \rangle_{h_+}$.

Para esta situación, podemos construir, a partir de los estados de campo medio que rompen simetría $|0_{h_{\pm}}\rangle$, los estados que preservan simetría como [8]

$$|0_{\pm}\rangle = \frac{|0_{h_{\pm}}\rangle \pm |0_{h_{-}}\rangle}{\sqrt{2(1 \pm \operatorname{Re}[\langle 0_{h_{\pm}}|0_{h_{-}}\rangle])}} \,.$$
 (3.24)

Aquí el *overlap* $\langle 0_{h_+} | 0_{h_-} \rangle = \prod_i \langle 0_{i+} | 0_{i-} \rangle$ es muy pequeño si $|0_{h\pm}\rangle$ no están muy próximos y el sistema no es muy chico ($\langle 0_{h_+} | 0_{h_-} \rangle = \langle 0_+ | 0_- \rangle^N$ en un campo medio invariante frente a traslaciones de N sitios). Los estados (3.24) están ya *entrelazados*, y dan lugar a correlaciones no perturbativas, no nulas, entre estados individuales

Por ejemplo, despreciando el *overlap*, el correspondiente estado reducido de sitio individual deviene

$$\rho_{i} = \operatorname{Tr}_{\bar{i}}|0_{\pm}\rangle\langle 0_{\pm}| = \frac{1}{2}(|0_{i+}\rangle\langle 0_{i+}| + |0_{i-}\rangle\langle 0_{i-}|)$$
(3.25)

el cual es independiente del signo \pm . Esta ρ_i es un estado mezcla de rango 2 con autovalores

$$p_{\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm |\langle 0_+ | 0_- \rangle|).$$

Por ende, la entropía (3.22), $S(\rho_i) = -\sum_{\nu=\pm} p_{\nu} \ln p_{\nu}$, es distinta de cero. Luego, una ruptura de simetría en campo medio es una señal de entrelazamiento *no despreciable* (y no perturbativo) entre un sitio individual y el resto de la cadena (asumiendo un estado fundamental no degenerado y por ende con buena simetría).

Dejamos los detalles para la próxima sección, donde será necesario romper una simetría relevante específica (paridad de S_z) a nivel de campo medio en *algunos* regímenes. Solo mencionamos que, nuevamente despreciando el *overlap* $\langle 0_{h_+}|0_{h_-}\rangle$, podríamos también

usar los estados perturbados (3.14) para cada campo medio h_{\pm} (en lugar de solo $|0_{h_{\pm}}\rangle$) en el estado que preserva simetría (3.24).

3.7. Aplicación a Sistemas de Espines

Las redes de espines constituyen una atractiva representación escalable de qubits para explorar e implementar esquemas de procesamiento cuántico de información [52-54] y pueden ser realizadas en diversos sistemas físicos. En este trabajo consideraremos como redes de espines a sistemas de espines (representaciones de SU(2)), acoplados entre ellos por interacciones de pares. Nos concentraremos en interacciones de Heisenberg tipo XYZ. Supondremos además, que la red de espines se encuentre inmersa en un campo magnético externo, que actúa como parámetro de control.

El Hamiltoniano del sistema es de la forma

$$H = \sum_{i} \mathbf{B}^{i} \cdot \mathbf{s}_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\mu = x, y, z} J^{ij}_{\mu} s^{\mu}_{i} s^{\mu}_{j}$$
(3.26)

donde $s_i = (s_i^x, s_i^y, s_i^z)$ denota el operador espín i-ésimo, B_i es proporcional al campo magnético externo aplicado al espín i y J_{μ}^{ij} , $\mu = x, y, z$, las constantes de acoplamiento entre los espines i y j. Los espines pueden, por ejemplo, estar ubicados en una red monodimensional, bidimensional, o tridimensional, y el espín s_i de cada sitio (tal que $s_i \cdot s_i = s_i(s_i + 1)$) puede ser arbitrario (no necesariamente uniforme).

En el caso en que J_z^{ij} es igual a cero $\forall ij$, el acoplamiento se denomina usualmente XY, y si $J_x^{ij} = J_y^{ij}$ (isotropía en plano XY), se denomina XX. En este último caso $[H, S^z] = 0$, donde $S^z = \sum_i s_i^z$ es el espín total en la dirección z. En este trabajo nos concentraremos en interacciones anisotrópicas tipo XY o XYZ.

3.7.1. Aproximación de Campo Medio Estándar

La aproximación de campo medio estándar en este sistema corresponde a la asignación natural de un "sitio" para cada espín individual *i*. En este caso, tenemos

$$\rho = \exp[-\beta h]/Z_h = \bigotimes_{i=1}^n \rho_i, \ \rho_i = \exp[-\beta h_i]/Z_{h_i}$$

siendo el Hamiltoniano autoconsistente de campo medio h de la forma

$$h = \sum_{i} h_{i} \qquad (3.27)$$

$$h_{i} = \mathbf{B}^{i} \cdot \mathbf{s}_{i} - \sum_{j \neq i} \sum_{\mu=x,y,z} J^{ij}_{\mu} \langle s^{\mu}_{j} \rangle s^{\mu}_{i}$$

$$= (\mathbf{B}^{i} - \mathbf{J}^{i}) \cdot \mathbf{s}_{i} \qquad (3.28)$$

donde

$$J^i_\mu = \sum_{j \neq i} J^{ij}_\mu \langle s^\mu_j \rangle$$

La condición autoconsistente es precisamente

$$\langle \boldsymbol{s}_i \rangle = Z_{h_i}^{-1} \operatorname{Tr} \exp[-\beta h_i] \boldsymbol{s}_i = \boldsymbol{n}_i g(\beta |\boldsymbol{B} - \boldsymbol{J}_i|), \quad i = 1, \dots, n$$
 (3.29)

donde n_i es el vector unitario en la dirección de $(B^i - J^i)$ y $g(u) = -\frac{d}{du} \frac{\sinh u(s+1/2)}{\sinh u/2}$, con s el espín del sitio i. Recordemos que la función de partición de cada espín está dado por:

$$Z_{h_i} = \operatorname{Tr} \exp[-\beta h_i] = \frac{\sinh[\beta |\boldsymbol{B}^i - \boldsymbol{J}^i|(s+1/2)]}{\sinh(\beta |\boldsymbol{B}^i - \boldsymbol{J}^i|/2)}$$
(3.30)

El valor medio de la energía es

$$\langle H \rangle = \sum_{i} \boldsymbol{B}_{i} \cdot \langle \boldsymbol{s}_{i} \rangle - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\mu} J_{\mu}^{ij} \langle \boldsymbol{s}_{i}^{\mu} \rangle \langle \boldsymbol{s}_{j}^{\mu} \rangle$$
$$= \sum_{i} (\boldsymbol{B}^{i} - \frac{1}{2} \boldsymbol{J}^{i}) \cdot \langle \boldsymbol{s}_{i} \rangle$$
(3.31)

En el límite $T \to 0$ la aproximación conduce a una aproximación completamente separable del estado fundamental, de la forma

$$|0_h\rangle = \otimes_i |0_i\rangle$$

con $|0_i\rangle$ el estado fundamental de h_i , es decir el estado con $n_i \cdot s_i = -s$, tal que $n_i \cdot s_i |0_i\rangle = -s|0_i\rangle$. Este estado no contiene correlaciones entre los espines. No obstante, la restauración de simetría en las fases con simetría rota conduce, como se ha discutido previamente, a un estado entrelazado.

3.7.2. Aproximación de Campo Medio Generalizada



Figura 3.1: Esquema de conjuntos de espines disjuntos

La aproximación de campo medio basada en sitios individuales puede no resultar satisfactoria en sistemas fuertemente interactuantes, como veremos luego explícitamente. La aproximación de campo medio generalizada permite, no obstante, también considerar como sitios a conjuntos disjuntos C_{ν} de un determinado número m_{ν} de espines, tal que $\sum_{\nu} m_{\nu} = n$, Las interacciones entre los espines del conjunto son en este caso tratadas *en forma exacta*.

El Hamiltoniano autoconsistente será de la forma

$$h = \sum_{\nu} h_{\nu}$$

con

$$h_{\nu} = \sum_{i \in C_{\nu}} \boldsymbol{B}^{i} \cdot \boldsymbol{s}_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j \in C_{\nu}} J^{ij}_{\mu\nu} s^{\mu}_{i} s^{\nu}_{j} - \sum_{j \notin C_{\nu}} J^{ij}_{\mu\nu} \langle s^{\mu}_{j} \rangle s^{\nu}_{i}$$
(3.32)

$$= \sum_{i \in C_{\nu}} (\boldsymbol{B}^{i} - \tilde{\boldsymbol{J}}^{i}) \cdot \boldsymbol{s}_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j \in C_{\nu}} J^{ij}_{\mu\nu} s^{\mu}_{i} s^{\nu}_{j}$$
(3.33)

donde ahora

$$\tilde{J}^i_{\mu} = \sum_{j \notin C_{\nu}} J^{ij}_{\mu} \langle s^{\mu}_j \rangle$$

26
En esta aproximación las interacciones entre los espines de cada conjunto C_{ν} se toman en cuenta *exactamente* (el segundo término de (3.32) y (3.33)) y la aproximación de campo medio se aplica solo a las interacciones entre espines de distintos conjuntos (el tercer término de (3.32)).

La correspondiente energía media es

$$\langle H \rangle = \sum_{\nu} \sum_{i \in C_{\nu}} [\boldsymbol{B}^{i} \cdot \boldsymbol{s}_{i} - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i, j \in C_{\nu}} J^{ij}_{\mu} \langle s^{\mu}_{i} s^{\mu}_{j} \rangle - \frac{1}{2} \sum_{j \notin C_{\nu}} J^{ij}_{\mu} \langle s^{\mu}_{i} \rangle \langle s^{\mu}_{j} \rangle]$$

$$= \sum_{\nu} \sum_{i \in C_{\nu}} [(\boldsymbol{B}^{i} - \frac{1}{2} \tilde{\boldsymbol{J}}^{i}) \cdot \boldsymbol{s}_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j, i, j \in C_{\nu}} J^{ij}_{\mu} \langle s^{\mu}_{i} s^{\mu}_{j} \rangle].$$

$$(3.34)$$

Las condiciones generales de autoconsistencia pueden expresarse como

$$\langle \boldsymbol{s}_i \rangle = Z_h^{-1} \operatorname{Tr} \exp[-\beta h] \boldsymbol{s}_i = Z_\nu^{-1} \operatorname{Tr} \exp[-\beta h_\nu] \boldsymbol{s}_i$$
(3.35)

donde $i \in \nu$ y ν enumera todas las celdas o conjuntos. El Hamiltoniano local h_{ν} depende de los valores medios de espines en otras celdas a través del tercer término de (3.32).

Para $T \rightarrow 0$, esta aproximación corresponde al estado

$$|0_h\rangle = \otimes_{\nu} |0_{\nu}\rangle$$

donde $|0_{\nu}\rangle$ es el estado fundamental de h_{ν} . Este estado será normalmente entrelazado, es decir, no será un estado producto en los espines del sitio.

3.7.3. Campos Transversos y Conservación de Paridad

Consideremos el caso en que el campo en todos los sitios está en la dirección de un mismo eje principal, que podemos elegir como z. El Hamiltoniano (4.1) se reescribe entonces como

$$H = \sum_{i} B^{i} s_{i}^{z} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\mu = x, y, z} J_{\mu}^{ij} s_{i}^{\mu} s_{j}^{\mu}$$
(3.36)

que podemos expresar también como

$$H = \sum_{i} B^{i} s_{i}^{z} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} [J_{z}^{ij} s_{i}^{z} s_{j}^{z} - J_{+} s_{i}^{+} s_{j}^{-} - \frac{1}{2} J_{+} (s_{i}^{+} s_{j}^{+} + s_{i}^{-} s_{j}^{-})] \quad (3.37)$$

donde $J_{\pm} = (J_x \pm J_y)/2$ y $s_j^{\pm} = s_j^x \pm i s_j^y$.

Tanto de (3.36) como de (3.37), podemos ver que

$$[P_z, H] = 0$$

27

donde

$$P_z = \exp[-i\pi(S_z - S)] \tag{3.38}$$

$$= \otimes_{j} P_{j}^{z}, \quad P_{j}^{z} = \exp[-i\pi(s_{j}^{z} - s_{i})]$$
(3.39)

es el operador de paridad total de espín, con $S_z = \sum_i s_i^z$ y $S = \sum_i s_i$. De este modo, $P_j^z = +1$ si $m_j - s_j$ es par y $P_j^z = -1$ si esta diferencia es impar, donde $s_j^z |m_j\rangle = m_j |m_j\rangle$. P_z es obviamente proporcional a una rotación global de ángulo π alrededor del eje z.

Por lo tanto, los autoestados exactos de *H* poseen paridad definida si no están degenerados (y pueden elegirse con paridad definida si lo están). Esto implica que

$$\langle s_i^x \rangle = \langle s_i^y \rangle = 0$$

tanto en el estado térmico $\rho \propto \exp[-\beta H]$ como en todo autoestado no degenerado $(P_z s_i^{\mu} P_z = -s_i^{\mu} \text{ para } \mu = x, y).$

No obstante, en la aproximación de campo medio estándar, es necesario *violar* esta simetría para obtener un valor medio no nulo de cualquier término de interacción $s_i^x s_j^x$ o $s_i^y s_j^y (i \neq j)$, ya que en la misma $\langle s_i^\mu s_j^\mu \rangle = \langle s_i^\mu \rangle \langle s_j^\mu \rangle$. La solución con simetría de paridad rota corresponde pues a

 $[h, P_z] \neq 0$

y es obviamente degenerada: $h^- = P_z h P_z$ será también un Hamiltoniano autoconsistente, con valores opuestos de $\langle s_i^x \rangle$ y $\langle s_i^y \rangle$.

A T = 0 esto implica que si $|0_{h_+}\rangle$ (estado fundamental de $h_+ = h$) es un estado producto autoconsistente que viola esta simetría, $|0_{h_-}\rangle = P_z |0_{h_+}\rangle$ será también otro estado autoconsistente. Tal como se mencionó previamente, podemos formar estados con buena paridad de la forma

$$|0_{h}^{\pm}\rangle = \frac{|0_{h_{\pm}}\rangle \pm |0_{b_{\pm}}\rangle}{\sqrt{2(1 - \operatorname{Re}\langle 0_{h_{\pm}}|0_{h_{\pm}}\rangle)}}$$
(3.40)

con $P_z |0_h^{\pm}\rangle = \pm |0_h^{\pm}\rangle$. Estos estados son entrelazados y conducen a correlaciones no nulas entre espines.

En cambio, en la aproximación generalizada de campo medio, la ruptura de la simetría de paridad será necesaria solo para obtener un valor medio no nulo de la interacción entre los conjuntos C_{ν} . Las correlaciones internas son tenidas en cuenta exactamente y no involucran ruptura de simetría. En otras palabras, la ruptura de simetría se producirá solo en regímenes donde las correlaciones externas (aquellas entre los conjuntos C_{ν}) son apreciables y no perturbativas.

En fases con simetría de paridad rota en la aproximación generalizada, valen por supuesto las consideraciones anteriores. Podemos restaurar la simetría mediante estados análogos a (3.40), que contendrán correlaciones entre los conjuntos C_{ν} . Es decir, contienen entrelazamiento tanto entre espines internos como entre los conjuntos C_{ν} .

Es importante destacar finalmente que la simetría de paridad *global* de espín implica la misma simetría nivel *local*. Si el estado global ρ tiene paridad definida o conmuta con ella $([P_z, \rho] = 0)$ entonces el estado reducido de cualquier subsistema C,

$$\rho_C = \operatorname{Tr}_{\bar{C}} \rho$$

donde \overline{C} denota el complemento de C, conmuta también con la correspondiente paridad local de espín:

$$[\rho_C, P_C^z] = 0$$

donde $P_C^z = \bigotimes_{j \in C} P_j^z$. Esto implica restricciones muy fuertes en la forma de los estados locales.

3.7.4. CAMPO FACTORIZANTE

A pesar de que en general los esquemas de campo medio descriptos previamente proveen una descripción aproximada del estado fundamental exacto, en ciertos sistemas inmersos en un campo magnético externo existe un valor particular finito del campo en el cual las aproximaciones de campo medio (incluyendo la estándar) resultan exactas. Este campo se denomina campo *factorizante* o campo de separabilidad. En el mismo, dicho sistema de espines posee un estado fundamental exactamente separable, es decir, un estado producto de espines individuales.

Discutiremos aquí el caso de un campo magnético transversal. Consideremos nuevamente el Hamiltoniano de una red de espines arbitraria de la forma (3.36). Buscaremos condiciones para que estos sistemas posea un *autoestado separable con simetría de paridad rota* de la forma [55-57]

$$|\Theta\rangle = \bigotimes_{i=1}^{N} \exp[i\theta^{i} s_{iy}]|0_{i}\rangle$$
(3.41)

$$= \otimes_{i=1}^{N} \left[\sum_{k=0}^{2s_i} \sqrt{\binom{2s_i}{k}} \cos^{2s_i - k} \frac{\theta^i}{2} \sin^k \frac{\theta^i}{2} |k_i\rangle \right], \qquad (3.42)$$

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 [58]. La elección de ycomo 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 cierta "rotación" con valores complejos de θ^i en (3.41)¹. Reemplazando $s_{i\mu}$ en (3.36) por $e^{-i\theta^i s_{iy}} s_{i\mu} e^{i\theta^i s_{iy}}$, la ecuación $H|\Theta\rangle = E_{\Theta}|\Theta\rangle$, esto

¹En 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 $c = e^{-is(\alpha+\gamma)} (\frac{\cos \beta/2}{\cos \theta/2})^{2s}$ (Ec. (3.42)). ϕ puede obviamente ser restringida al plano x, y.

3 Aproximación General de Campo Medio

es, $H_{\Theta}|0\rangle = E_{\Theta}|0\rangle \operatorname{con}|0\rangle = \otimes_{i=1}^{N}|0_{i}\rangle \operatorname{y} H_{\Theta} = e^{-i\sum_{i}\theta^{i}s_{iy}}He^{i\sum_{i}\theta^{i}s_{iy}}$, lleva a las igualdades

$$J_y^{ij} = J_x^{ij} \cos \theta^i \cos \theta^j + J_z^{ij} \sin \theta^i \sin \theta^j , \qquad (3.43)$$

$$B^{i}\sin\theta^{i} = \sum_{j} (s_{j} - \frac{1}{2}\delta_{ij}) (J_{x}^{ij}\cos\theta^{i}\sin\theta^{j} - J_{z}^{ij}\sin\theta^{i}\cos\theta^{j}), \quad (3.44)$$

que determinan, por ejemplo, el valor de J_y^{ij} y B^i en términos de J_x^{ij} , J_z^{ij} , s_i y θ^i . En estas condiciones, la energía del estado correspondiente está dada por

$$E_{\Theta} = -\sum_{i} s_{i} [B^{i} \cos \theta^{i} + \frac{1}{2} \sum_{j} (s_{j} - \frac{1}{2} \delta_{ij}) (J_{x}^{ij} \sin \theta^{i} \sin \theta^{j} + J_{z}^{ij} \cos \theta^{i} \cos \theta^{j}) + \frac{1}{4} (J_{x}^{ii} + J_{y}^{ii} + J_{z}^{ii})].$$
(3.45)

Para una cadena cíclica (1D) de espín s con acoplamientos de primeros vecinos $(J^{ij}_{\mu} = J_{\mu}\delta^{i,(j\pm 1)})$ en un campo magnético uniforme $(B^i = B)$ recobramos la condición de separabilidad original de la Ref. [59] tanto para el caso ferromagnético $(J^{\mu} \ge 0, \theta^i = \theta)$ como para el antiferromagnético $(J^{\mu} \le 0, \theta^i = (-1)^i\theta)$. Las Ecs. (3.43)–(3.45) son sin embargo completamente generales y se mantienen válidas también para valores *complejos* de θ^i, J^{ij}_{μ} y B^i : Si se satisfacen $\forall i, j, H$ tendrá un autoestado separable (3.41) con autovalor dado por la Ec. (3.45).

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

$$|-\Theta\rangle = P_z |\Theta\rangle = \bigotimes_{i=1}^N \exp[-i\theta^i s_{iy}] |0_i\rangle, \qquad (3.46)$$

será otro autoestado exacto de H con la misma energía (3.45). Los puntos en el espacio de parámetros donde los autoestados $|\pm\Theta\rangle$ son autoestados exactos corresponden pues necesariamente a cruces de niveles con paridad opuesta.

Para valores reales de θ^i , la Ec. (3.44) es solo la condición estacionaria para la energía (3.45) para B^i , J^{ij}_{μ} fijos. El estado (3.41) puede entonces considerarse como un estado de prueba de campo medio, siendo (3.44) la ecuación de autoconsistencia asociada. La Ec. (3.43), que es independiente del espín (para J^{ij}_{μ} 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, lo que garantiza la estabilidad de la solución ante fluctuaciones locales.

3.7.5. Entrelazamiento en Campos Factorizantes

En un arreglo finito, el estado fundamental exacto de H no será, en general, exactamente degenerado fuera del punto factorizante, y tendrá una *paridad* S_z definida. Los límites laterales correctos en el campo factorizante están entonces provistos por los estados normalizados con paridad definida

$$|\Theta^{\pm}\rangle = \frac{|\Theta\rangle \pm |-\Theta\rangle}{\sqrt{2(1 \pm \langle -\Theta|\Theta\rangle)}}, \qquad (3.47)$$

donde $\langle -\Theta | \Theta \rangle = \prod_{i=1}^{n} \cos^{2s_i} \theta_i$ es el *overlap* entre los autoestados degenerados separables. Los estados (3.47) satisfacen $P_z | \Theta^{\pm} \rangle = \pm | \Theta^{\pm} \rangle$ y también son obviamente autoestados exactos cuando las Ecs. (3.43) y (3.44) se cumplen.

Estos estados están entrelazados, con rango de Schmidt[4] 2 para *cualquier* bipartición (A, \overline{A}) del sistema completo[57] (aquí A denota un subconjunto de espines y \overline{A} el subconjunto complementario). Además, el estado reducido de cualquier subsistema de dos o más espines puede ser efectivamente considerado como un estado mezcla de dos qubits respecto de cualquier bipartición[57]. El entrelazamiento entre dos subsistemas cualesquiera, puede ser medido entonces por medio de la *concurrencia*, una medida de entrelazamiento originalmente introducida para sistemas de dos qubits[60] (en los cuales puede ser computada de forma exacta, ver 2.7.1), y luego extendida a estados mezcla de sistemas bipartitos generales a través de la extensión de "techo convexo" de la expresión generalizada de estado puro [61, 62]. La concurrencia entre dos espines cualesquiera i, jen los estados $|\Theta^{\pm}\rangle$ se puede ver que es [57]

$$C_{ij}^{\pm} = \frac{\sqrt{(1 - \cos^{4s_i} \theta_i)(1 - \cos^{4s_j} \theta_j)} \langle -\Theta_{\overline{ij}} | \Theta_{\overline{ij}} \rangle}{1 \pm \langle -\Theta | \Theta \rangle}, \qquad (3.48)$$

donde $\langle -\Theta_{ij} | \Theta_{ij} \rangle = \prod_{k \neq i,j} \cos^{4k} \theta_k$ denota el *overlap* complementario. C_{ij}^{\pm} puede ser apreciable para ángulos suficientemente pequeños θ_k si $\theta_i, \theta_j \neq 0$. No obstante, para sistemas no muy pequeños será despreciable debido a que el *overlap* complementario será típicamente muy pequeño.

4 Aplicación a Cadenas Dimerizadas de Espín 1/2

"Solo nosotros sabemos estar distantemente juntos."

Julio Cortázar

El estudio del entrelazamiento en sistemas de espines interactuantes se ha mostrado como un área de gran interés en los últimos años [63, 64]. El entrelazamiento proporcionó una perspectiva novedosa en el análisis de correlaciones y transiciones de fase cuánticas [63-65], siendo a su vez esencial en la determinación del potencial de estos sistemas en el campo de la información cuántica [4]. El interés en los sistemas de espines ha aumentado por el importante avance en las técnicas de control de sistemas cuánticos [66], que han hecho posible simular modelos de espines interactuantes con diferentes tipos de acoplamientos a través de: trampas de iones, junturas de Josephson y átomos fríos en redes ópticas [67-73].

En particular, los sistemas dimerizados, caracterizados por pares de espines fuertemente acoplados, surgen a través de distintos acoplamientos y configuraciones geométricas [9, 55, 74-85] y son de gran interés ya que proveen un marco para estudiar *plateaus* de magnetización y comportamientos magnéticos no triviales [85]. Estas configuraciones han sido recientemente simuladas por medio de átomos fríos en redes ópticas [86]. Mientras que el caso básico involucra pares de singletes en sistemas tipo antiferromagnéticos [87, 88], otros tipos de dimerización puedan aparecer en el estado fundamental de sistemas con acoplamientos no uniformes, como cadenas de espines con acoplamientos XYZ [9, 55, 74-76, 79, 80, 83]. En estos sistemas, una aproximación de campo medio convencional basada en espines individuales independientes claramente falla, como veremos, en el intento de predecir las características más elementales del estado fundamental y su comportamiento magnético. En su lugar, mostraremos que un enfoque de campo medio de pares es capaz de proveer una descripción básica correcta. Se trata de un caso particular de tratamiento de campo medio generalizado cuyo estado es determinado de forma autoconsistente y que admite una ruptura de simetría relevante. Veremos también que en cadenas dimerizadas de espín 1/2 con acoplamientos anisotrópico XY y XYZ, el enfoque es completamente analítico y capaz de proporciona un diagrama de fases que difiere del obtenido a través de campo medio estándar, conteniendo una fase dimerizada para campos débiles y condiciones apropiadas [9]. Las predicciones están en buen acuerdo con los resultados exactos, que en el caso especial de cadenas de espín 1/2 con acoplamientos a primeros vecinos XY pueden obtenerse de forma analítica por medio de la fermionización de Jordan-Wigner [55, 74, 75, 89].

En este capítulo aplicaremos el formalismo de campo medio generalizado a la descripción de correlaciones cuánticas en una cadena de espín 1/2 con acoplamientos tipo XY (anisotrópico) de primeros vecinos no uniforme en un campo externo. Esta cadena podrá exhibir dimerización en el límite de campo bajo, en el cual el estado fundamental será esencialmente un estado de pares fuertemente acoplados. Por consiguiente, podemos utilizar el esquema de campo medio generalizado para introducir naturalmente una aproximación de campo medio de pares. Este sistema, además de ser de interés en información y física de estado sólido ofrece la ventaja de admitir un tratamiento analítico exacto (aunque complejo) por medio de la fermionización de Jordan-Wigner [55, 89], que se discute en detalle en el apéndice respectivo. El mismo puede ser utilizado para comprobar el grado de confiabilidad de la aproximación de campo medio generalizado, que como veremos resulta también analítica (y simple).

Las investigaciones descriptas en este capítulo dieron lugar a la publicación científica [8].

4.1. Cadena de Espín 1/2 Dimerizada

Consideraremos una cadena de espín 1/2 en un campo transverso uniforme, acoplada a través de acoplamientos XY a primeros vecinos, tal que el sistema pueda ser visto, al menos para campo cero, como pares fuertemente acoplados interactuando débilmente con los pares vecinos (Fig. 4.1). El Hamiltoniano se puede escribir como

$$H = \sum_{i} Bs_{i}^{z} - J_{x}^{i}s_{i}^{x}s_{i+1}^{x} - J_{y}^{i}s_{i}^{y}s_{i+1}^{y}, \qquad (4.1)$$

donde s_i^{μ} denota la componente de espín en el sitio *i* y

$$J^{i}_{\mu} = \begin{cases} -J_{\mu} & , \ para \, i \, impar \\ -\alpha J_{\mu} & , \ para \, i \, par \end{cases}$$
(4.2)

con $|\alpha| \leq 1$. Acoplamientos débiles de ordenes superiores serán considerados más adelante.

Sin pérdida de generalidad podemos suponer $\alpha \ge 0$, tanto en una cadena abierta con n pares como en una cíclica $(s_{2n+i}^{\mu} = s_i^{\mu})$ con un número n par de pares, dado que el signo de α en estos casos puede ser invertido efectuando una rotación de ángulo π alrededor



Figura 4.1: Esquema de una Cadena de Dímeros.

del eje z de ambos espines en pares pares (tal que $s_i^{\mu} \to -s_i^{\mu}$ para $\mu = x, y$ si i = 2j o 2j - 1, con j par). Tal rotación no afectará al acoplamiento interno de pares. También podemos considerar $J_x \ge 0$, dado que su signo se puede invertir a través de una rotación de un ángulo π alrededor del eje z de todos los espines en sitios i pares (asumiendo un número par de espines en el caso cíclico), y fijar $|J_y| \le J_x$ eligiendo el eje y en la dirección del acoplamiento más débil. El signo de B puede obviamente cambiarse a través de una rotación global de ángulo π alrededor del eje x, lo cual no afectará los acoplamientos. En resumen, el caso general puede reducirse al caso especial

$$B \ge 0, \ 0 \le |J_y| \le J_x, \ \alpha \ge 0,$$
 (4.3)

es decir, acoplamientos de tipo ferromagnético atractivo, a través de operaciones locales que no afectarán ni los niveles de energía, ni el entrelazamiento, ni ninguna otra medida de correlaciones cuánticas.

Vamos a enfocarnos por simplicidad en el caso cíclico, en el cual el sistema permanece invariante frente a traslaciones de dos sitios, sin embargo las siguientes consideraciones se pueden extender, con mínimas correcciones de borde, al caso abierto. Señalamos que el Hamiltoniano (4.1) conmuta con la paridad total de espín

$$P_{z} = \exp[-i\pi(S_{z}+n)] = \bigotimes_{i=1}^{2n} (2s_{i}^{z}), \qquad (4.4)$$

donde $S_z = \sum_i s_i^z$ es la componente total del espín, la cual solo cuenta la paridad del número de espines para arriba y es equivalente a una rotación global en π alrededor del eje z. Esto implica que $\langle s_i^{\mu} \rangle = 0$ para $\mu = x, y$ y para cualquier autoestado no degenerado. Cualquier cadena de espines con acoplamientos XY o XYZ en un campo transverso exhibe esta simetría discreta independientemente de la geometría, el rango de acoplamiento o el valor del espín. Su ruptura (es decir, $\langle s_i^{\mu} \rangle \neq 0$ para $\mu = x$ o y) es esencial en todas las descripciones basadas en campo medio.

4.2. Aproximación de Campo Medio Estándar

Recordemos primero el campo medio estándar o aproximación de "Hartree" para el estado fundamental de esta cadena, que significa simplemente proponer un estado fundamental producto

$$|0_{\rm mf}\rangle = \otimes_{i=1}^{2n} |0_i\rangle \,. \tag{4.5}$$

Esto se corresponde con considerar espines individuales como los sitios del enfoque general (3.12), con $|0_i\rangle$ el estado fundamental asociado al Hamiltoniano local autoconsistente

$$h_i = Bs_i^z - \sum_{\mu} (J_{\mu}^i \langle s_{i+1}^{\mu} \rangle + J_{\mu}^{i-1} \langle s_{i-1}^{\mu} \rangle) s_i^{\mu}$$

Para el caso cíclico y para los signos (4.3), asumiremos a los estados locales $|0_i\rangle$ independientes del sitio y reales en la base estándar de los autoestados de s_i^z , es decir,

$$|0_i\rangle = |\theta\rangle \equiv \cos\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle, \qquad (4.6)$$

a fin de obtener la menor energía media $E_{\rm mf} = \langle 0_{\rm mf} | H | 0_{\rm mf} \rangle$. Tal estado da lugar a $\langle s_i^y \rangle = 0$ y $\langle s_i^x \rangle = \frac{1}{2} \sin \theta$. Luego, es evidente ver que $E_{\rm mf} = \langle 0_{\rm mf} | H | 0_{\rm mf} \rangle$ toma la forma

$$E_{\rm mf} = \sum_{i} [B\langle s_i^z \rangle - \sum_{\mu=x,y} J_{\mu}^i \langle s_i^{\mu} \rangle \langle s_{i+1}^{\mu} \rangle]$$

= $-n[B\cos\theta + \frac{1}{4}J_x(1+\alpha)\sin^2\theta].$ (4.7)

Esta expresión se minimiza, si $B \ge 0$, para

$$\begin{aligned} \theta &= 0, \qquad B > B_c^{\alpha}, \\ \cos \theta &= B/B_c^{\alpha}, \qquad B < B_c^{\alpha}, \end{aligned}$$

$$(4.8)$$

donde $B_c^{\alpha} = J_x(1+\alpha)/2$. Estos valores son, por supuesto, soluciones de la condición autoconsistente

$$\langle s_i^x \rangle = \frac{1}{2} \sin \theta = \frac{1}{2} \frac{B_c^{\alpha} \sin \theta}{\sqrt{B^2 + B_c^{\alpha^2} \sin^2 \theta}},$$

la que asegura que $|0_i\rangle$ sea autoestado de h_i . El campo medio está entonces completamente alineado con la dirección z del campo si $B > B_c^{\alpha}$, y a lo largo de un eje formando un ángulo θ con z si $B < B_c^{\alpha}$. La última es la solución con *ruptura de paridad*, dando lugar a $\langle s_i^x \rangle \neq 0$, y es obviamente degenerada ya que el signo de θ es arbitrario. La correspondiente energía mínima es

$$E_{\rm mf} = \begin{cases} -nB & , \quad B > B_c^{\alpha} \\ -\frac{1}{2}nB_c^{\alpha}(\frac{B^2}{B_c^{\alpha^2}} + 1) & , \quad B < B_c^{\alpha} \end{cases}$$
(4.9)

Esta aproximación simple ignora la estructura de dímeros de la cadena (es de hecho la misma que para una cadena uniformemente acoplada con acoplamiento $J_x(1 + \alpha)/2$), y tampoco registra la presencia de acoplamientos J_y , proporcionando simplemente un enfoque básico de orden cero.

Aún así, es notable que proporcione un *estado fundamental exacto* en el *campo factorizante*: Se puede demostrar (ver apéndice) que para

$$B = B_s^{\alpha} \equiv \sqrt{J_y J_x} (1+\alpha)/2 = \sqrt{J_y/J_x} B_c^{\alpha}, \qquad (4.10)$$

donde $\cos \theta = \sqrt{J_y/J_x}$, el presente sistema exhibe un *estado fundamental degenerado*, siendo el subespacio del estado fundamental precisamente generado por ambos estados producto de campo medio. El estado fundamental exacto para un sistema de *n* pares es normalmente no degenerado y por consiguiente tendrá una paridad definida $P_z = \pm 1$. Al aumentar el campo desde 0, se observarán *n* transiciones de paridad, donde los niveles más bajos de cada paridad se cruzan, y el campo factorizante corresponde a la *última transición de paridad*. Notablemente, en este punto no queda ninguna evidencia de la estructura dimerizada del Hamiltoniano en el estado fundamental exacto.

4.3. Aproximación de Campo Medio de Pares

Con el fin de mejorar la aproximación de campo medio anterior más allá del campo factorizante, consideraremos una aproximación de campo medio de *pares*, basada en un estado fundamental de prueba producto de estados que representan pares de espines, en lugar de estados de espín individual:

$$|\Psi_{\rm mf}^p\rangle = \otimes_{i=1}^n |\psi_i^p\rangle, \qquad (4.11)$$

donde $|\psi_i^p\rangle$ son estados de prueba de dos espines. La Ec. (4.11) es obviamente exacta en el límite completamente "dimerizado" $\alpha = 0$ (pares independientes), por lo que es de esperar que proporcione al menos una buena descripción básica en el régimen débilmente acoplado $|\alpha| \ll 1$.

Nuevamente, en el caso cíclico y para los signos escogidos (4.3), asumimos que $|\psi_i^p\rangle$ es independiente del sitio. La mínima energía se obtendrá para $|\psi_i^p\rangle$ real en la base producto estándar de autoestados de $s_1^z s_2^z$. El estado de dos espines más general de este tipo puede escribirse como

$$|\psi_i^p\rangle = \cos\frac{\beta}{2}|\psi_{\theta\phi}\rangle + \sin\frac{\beta}{2}\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \qquad (4.12)$$

$$|\psi_{\theta\phi}\rangle = \cos\frac{\theta}{2}(\cos\frac{\phi}{2}|\downarrow\downarrow\rangle + \sin\frac{\phi}{2}|\uparrow\uparrow\rangle) + \sin\frac{\theta}{2}\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \qquad (4.13)$$

donde $|\psi_{\theta\phi}\rangle$ es simétrica frente a permutaciones de pares. No obstante, para los signos (4.3) es evidente que el estado singlete no estará ocupado, por lo que podemos fijar $\beta = 0$. Para $E_{\rm mf}^p = \langle \Psi_{\rm mf}^p | H | \Psi_{\rm mf}^p \rangle$ obtenemos de hecho

$$E_{\rm mf}^{p} = n[\langle B\langle s_{1}^{z} + s_{2}^{z} \rangle - \sum_{\mu=x,y} J_{\mu}(\langle s_{1}^{\mu}s_{2}^{\mu} \rangle + \alpha \langle s_{1}^{\mu} \rangle \langle s_{2}^{\mu} \rangle)] \\ = -\cos^{2}\frac{\beta}{2}[(B\cos\phi + J_{-}\sin\phi)\cos^{2}\frac{\theta}{2} + J_{+}\sin^{2}\frac{\theta}{2}] \\ + J_{+}\sin^{2}\frac{\beta}{2} - \frac{1}{8}\alpha J_{x}[\cos^{4}\frac{\beta}{2}\sin^{2}\theta(1 + \sin\phi) \\ -\sin^{2}\beta\cos^{2}\frac{\theta}{2}(1 - \sin\phi)], \qquad (4.14)$$

verificándose que el mínimo de energía para la elección (4.3) corresponde a $\beta = 0$, con $\phi \in [0, \pi/2]$. La Ec. (5.9) es independiente del signo de θ , en concordancia con la simetría de paridad de espín de $H(P_z|\psi_{\theta\phi}\rangle = |\psi_{-\theta\phi}\rangle)$. Notar que el estado de un par tendrá paridad de espín definida solo si $\beta = \theta = 0$ ($P_z = 1$) o bien $\theta = \pi$ o $\beta = \pi$ ($P_z = -1$).

4.3.1. El Caso $\alpha = 0$

Es conveniente examinar primero el caso $\alpha = 0$ (pares independientes), donde la Ec. (4.11) es exacta. Es fácil ver que el estado fundamental corresponde a $\beta = 0$ y

$$\theta = 0, \ \tan \phi = \frac{J_{-}}{B} , \quad B \ge B_s^0 = \sqrt{J_x J_y}/2 , \\ \theta = \pi, \ (\phi \ \text{arbitrario}) , \quad B \le B_s^0$$

$$(4.15)$$

donde $J_{\pm} = \frac{J_x \pm J_y}{4}$, tal que

$$|\psi_i^p\rangle = \begin{cases} \cos\frac{\phi}{2}|\downarrow\downarrow\rangle + \sin\frac{\phi}{2}|\uparrow\uparrow\rangle &, B \ge B_s^0 \\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} &, 0 \le B \le B_s^0 \end{cases},$$
(4.16)

$$E_{\rm mf}^p = \begin{cases} -n\sqrt{B^2 + J_-^2} & , \quad B \ge B_s^0 \\ -nJ_+ & , \quad 0 \le B \le B_s^0 \end{cases} .$$
(4.17)

Por lo tanto, en primer lugar se ve que el estado fundamental de pares sufre una *tran*sición de paridad en el campo factorizante B_s^0 a $\alpha = 0$, cambiando del estado con $P_z = -1$, $|\psi_{\pi 0}\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$ para $B < B_s^0$, al estado con $P_z = 1$, $|\psi_{0\phi}\rangle$ para $B > B_s^0$. Si $B = B_s^0$, estos dos estados tienen la misma energía, y aunque no son estados producto, son justamente la combinación lineal de estados producto de campo medio (4.5)–(4.6) con paridad definida:

$$\frac{|\theta\theta\rangle \pm |-\theta-\theta\rangle}{\sqrt{2(1\pm\cos^2\theta)}} = \begin{cases} \cos\frac{\phi}{2}|\downarrow\downarrow\rangle + \sin\frac{\phi}{2}|\uparrow\uparrow\rangle\\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

donde la identidad superior es válida siempre que $\cos \theta = B_s^0/B_c^0$ y $\tan \phi = J_-/B_s^0$ es decir, $\tan \phi = \frac{1}{2} \tan \theta \sin \theta$). En otras palabras, para $B = B_s^0$ pueden formarse estados producto con ruptura de paridad como combinación lineal de estados fundamentales exactos degenerados con paridad definida.

Notar que a diferencia del campo medio estándar, los pares actuales permanecen correlacionados para campos fuertes $B \gg J_x$, es decir, la alineación con el campo ocurre solo asintóticamente para $B \to \infty$, con $\phi = O(J_-/B)$ en este límite.

4.3.2. Caso General

En el caso general, la minimización de E_{mf}^p respecto a θ , ϕ ($\beta = 0$) da lugar a tres soluciones distintas. En primer lugar, obtenemos las mismas soluciones (4.15) derivadas para pares libres, ambas dan lugar a $\langle s_1^x \rangle = \langle s_2^x \rangle = 0$ y por consiguiente no hay acoplamiento promedio entre pares. Las energías correspondientes siguen estando dadas por la Ec. (4.17).

Pero además, para $\alpha > 0$ es factible *una solución con ruptura de paridad*, es decir con $|\theta| \in (0, \pi)$, la cual está determinada por el conjunto de ecuaciones acopladas

$$\cos \theta = 2 \frac{B \cos \phi + J_{-} \sin \phi - J_{+}}{\alpha J_{x} (1 + \sin \phi)},$$

$$\tan \phi = \frac{J_{-}}{B} + \alpha \frac{J_{x}}{4B} \frac{\sin^{2} \theta}{1 + \cos \theta}.$$
(4.18)

Estas ecuaciones pueden derivarse también de las ecuación general de autoconsistencia (5.2). El Hamiltoniano autoconsistente es:

$$h = \sum_{i \text{ impar}} h_i \tag{4.19}$$

$$h_i = B(s_i^z + s_{i+1}^z) - \sum_{\mu=x,y} J_{\mu}[s_i^{\mu}s_{i+1}^{\mu} - \alpha(\langle s_{i-1}^{\mu}\rangle s_i^{\mu} - \langle s_{i+2}^{\mu}\rangle s_{i+1}^{\mu})]$$
(4.20)

 $\operatorname{con} \langle s_i^x \rangle = \frac{1}{2} \sin \theta \sqrt{1 + \sin \phi}, \langle s_i^y \rangle = 0$, y las ecuaciones (4.18) aseguran que el estado $|\psi_{\theta\phi}\rangle$ es autoestado de h_i .

Por supuesto, el signo de θ permanece indeterminado (dos soluciones degeneradas). En contraste con el enfoque estándar de campo medio, donde la paridad se rompe para $B < B_c^{\alpha}$, la solución con ruptura de paridad para pares aparece solo dentro de una *ventana de campo finita* $B_{c1}^{\alpha} < B < B_{c2}^{\alpha}$ si α es pequeño. El sistema preferirá una solución dimerizada que preserve paridad para $B > B_{c2}^{\alpha}$ (donde $\theta = 0$) y también para $B < B_{c1}^{\alpha}$ (donde $\theta = \pi$), como se ve en la Fig. 4.2. Estos campos críticos pueden obtenerse inmediatamente a partir de las Ecs. (4.18):



Figura 4.2: Diagrama de fases de las aproximaciones de campo medio: estándar (panel superior) y de pares (panel inferior). Se muestran los estados minimizantes individuales (4.6) (arriba) y de pares (4.12)–(4.13) (abajo). En la aproximación estándar la simetría de paridad de espín P_z se rompe por debajo de un campo crítico, pero en el campo medio de pares se viola solamente dentro de una ventana de campo si $\alpha < \alpha_c$ (Ec. 4.26), en cuyo caso para campos bajos la aproximación prefiere una solución dimerizada de paridad negativa con estado de pares $|\psi_-\rangle$. La línea punteada en ambos gráficos indica el campo factorizante (que está dentro de la fase con ruptura de simetría en ambos casos), donde ambas aproximaciones coinciden y se tornan exactas (ver texto). Los gráficos corresponden a $J_y/J_x = 1/2$.

$$B_{c1}^{\alpha} = \frac{1}{2}\sqrt{J_x(J_y - 2\alpha J_x)}, \qquad (4.21)$$
$$B_{c2}^{\alpha} = \frac{1}{2}\sqrt{(J_+ + \frac{\alpha}{2}J_x + \sqrt{(J_+ + \frac{\alpha}{2}J_x)^2 + 2\alpha J_x J_-})^2 - 4J_-^2}. \qquad (4.22)$$

40

Para $\alpha \to 0$, ambos B_{c1}^{α} y B_{c2}^{α} se aproximan al campo factorizante B_s^0 , donde ocurre la transición de paridad para $\alpha = 0$.

Obtenemos entonces

$$\theta = 0, \ \tan \phi = J_{-}/B, \ B \ge B_{c2}^{\alpha},$$
(4.23)

$$\begin{cases} \cos \theta = 2 \frac{B \cos \phi + J - \sin \phi - J_+}{\alpha J_x (1 + \sin \phi)} \\ \tan \phi = \frac{J_- + \alpha J_x (1 - \cos \theta)/4}{B} \end{cases} \quad B_{c1}^{\alpha} < B < B_{c2}^{\alpha}, \tag{4.24}$$

$$\theta = \pi \; (\phi \; \text{arbitrario}), \quad B \le B_{c1}^{\alpha} \; , \; .$$
(4.25)

La ventana de ruptura de paridad surge para $\alpha > 0$ hasta un valor límite α_c , dado que B_{c1}^{α} es real para

$$\alpha \le \alpha_c = \frac{J_y}{2J_x},\tag{4.26}$$

(suponemos aquí que $J_y \ge 0$), anulándose cuando $\alpha \to \alpha_c$. Por encima de α_c (o para $J_y \le 0$) se rompe la paridad P_z para todo $B \le B_{c2}$, como en la aproximación de campo medio estándar. Sin embargo B_{c2}^{α} es menor que el campo crítico de campo medio $B_c^{\alpha} \forall \alpha$.

Por lo tanto, a nivel de la aproximación de campo medio de pares, la brusca transición de paridad que ocurre para $\alpha = 0$ (θ salta de π a 0 para $B = B_s^0$), se suaviza para $\alpha > 0$ a través de la fase con ruptura de paridad, donde θ evoluciona suavemente de π a 0 a medida que B aumenta desde B_{c1} a B_{c2} . Las soluciones de las Ecs. (4.18) para θ y ϕ pueden de hecho determinarse de forma analítica en toda la fase de ruptura de simetría ((4.18) da lugar esencialmente a una ecuación cuártica para $\cos \phi$) sin embargo, las expresiones son demasiado largas como para citarlas aquí.

La aparición de la fase con ruptura de simetría refleja, por supuesto, el cambio en la estructura del estado fundamental exacto en este intervalo: En el mismo, el estado fundamental exacto es aproximadamente degenerado (existe un estado de paridad opuesta muy próximo) y las correlaciones entre pares se tornan no despreciables. Esto está en acuerdo con la aproximación de campo medio de pares, la cual predice correlaciones no nulas entre pares solo en la fase con ruptura de paridad, como discutimos en detalle en la próxima sección.

Como se ve en la Fig. 4.2, el campo factorizante yace dentro de la fase de ruptura de simetría $\forall \alpha > 0$:

$$B_{c1}^{\alpha} \le B_s^{\alpha} < B_{c2}^{\alpha} \,.$$

Se verifica que para $B = B_s^{\alpha}$, el estado de campo medio de pares se reduce al estado de campo medio estándar, es decir, a un estado puro producto, $\forall \alpha > 0$. En este punto, las Ecs. (4.18) implican

$$\cos \theta = \frac{J_y}{J_x}, \ \tan \phi = \frac{J_x - J_y}{2\sqrt{J_x J_y}} = \frac{J_-}{B_s^0}.$$
 (4.27)

41

Estos valores son *independientes de* α y dependen solo de la anisotropía J_y/J_x . Satisfacen la condición

$$\tan^2 \frac{\theta}{2} = \sin \phi \,, \tag{4.28}$$

que asegura, precisamente, que el estado de pares (4.13) es un estado producto.

4.3.3. Acoplamientos de Mayor Alcance y Redes



Figura 4.3: Los sistemas dimerizados correspondientes a los Hamiltonianos (4.29) (izquierda) y (4.31) (derecha).

El tratamiento de campo medio de pares puede aplicarse directamente a situaciones más complejas, en las cuales no es posible obtener resultados analíticos. Por ejemplo, si consideramos que dímeros adyacentes en la Fig. 4.1 están además conectados a través de acoplamientos con el segundo y tercer vecinos $-\alpha_2 J_{\mu} s_i^{\mu} s_{i+2}^{\mu}$ (para espines tipo 1-3 y 2-4) y $-\alpha_3 J_{\mu} s_{2i-1}^{\mu} s_{2i+2}^{\mu}$ (para espines tipo 1-4), tal que

$$H = \sum_{i=1}^{n} \{ B(s_{2i-1}^{z} + s_{2i}^{z}) - \sum_{\mu=x,y} J_{\mu}[s_{2i-1}^{\mu}s_{2i}^{\mu} + \sum_{j=1,2} (\alpha_{j}s_{2i}^{\mu}s_{2i+j}^{\mu} + \alpha_{j+1}s_{2i-1}^{\mu}s_{2i+j}^{\mu})] \}, \qquad (4.29)$$

la transformación de Jordan-Wigner dejará de conducir a un Hamiltoniano fermiónico cuadrático (por lo que no tendrá solución analítica). Sin embargo, se puede ver de las Ecs. (3.32)–(3.35) que las expresiones y diagramas de fases de los tratamientos previos de campo medio convencional y de pares (Fig. 4.2) continúan siendo válidos con el reemplazo

$$\alpha = \alpha_1 + 2\alpha_2 + \alpha_3 \,, \tag{4.30}$$

siempre que α_2 y α_3 sean también positivos (al igual que α_1) o lo suficientemente pequeños. El sistema de la Ec. (4.29) es equivalente a una cadena dimerizada tipo escalera (*"lad-der"*) (Fig. 4.3, izquierda). Existirá, a su vez, un campo factorizante uniforme para este sistema con anisotropía común [55, 56] ($\alpha_j^{\mu} = \alpha_j \forall j$, como se consideró en (4.29)), la cual estará nuevamente dada por la Ec. (4.10) con los valores de α previamente descriptos. Consideraciones similares permanecen siendo válidas para acoplamientos XY de mayor alcance.

El diagrama de fases de la Fig. 4.2 para el campo medio de pares se aplica también para el caso de redes (*"lattices"*) XY ferromagnéticas como la que se muestra a la derecha en la Fig. 4.3, descripta por el Hamiltoniano

$$H = \sum_{i,j} \{ B(s_{2i-1,j}^{z} + s_{2i,j}^{z}) - \sum_{\mu=x,y} J_{\mu}[s_{2i-1,j}^{\mu}s_{2i,j}^{\mu} + \alpha_{1}s_{2i,j}^{\mu}s_{2i+1,j}^{\mu} + \alpha_{2}(s_{2i-1,j}^{\mu}s_{2i-1,j+1}^{\mu} + s_{2i,j}^{\mu}s_{2i,j+1}^{\mu})] \}, \quad (4.31)$$

donde asumimos acoplamientos a primeros vecinos. Para $\alpha_1 > 0, \alpha_2 > 0$, simplemente tenemos que reemplazar

$$\alpha = \alpha_1 + 2\alpha_2 \,, \tag{4.32}$$

en los tratamiento de campo medio convencional y de pares. Consideraciones similares continúan valiendo para redes tridimensionales análogas o acoplamientos de mayor alcance.

4.3.4. Acoplamientos XYZ

En esta sección examinamos los efectos de considerar un acoplamiento adicional J_z en (3.8), es decir,

$$H = \sum_{i=1}^{n} B(s_{2i-1}^{z} + s_{2i}^{z}) - \sum_{\mu=x,y,z} J_{\mu}(s_{2i-1}^{\mu}s_{2i}^{\mu} + \alpha_{\mu}s_{2i}^{\mu}s_{2i+1}^{\mu}).$$
(4.33)

Como es sabido, en el caso general anisotrópico, este modelo deja de poder ser resuelto analíticamente (el término que se suma no conduce a un operador fermiónico cuadrático en la fermionización de Jordan-Wigner). Consideramos nuevamente $J_x > 0$ y $|J_y| < J_x$, con una misma anisotropía, es decir, $\alpha_{\mu} = \alpha > 0$ $\forall \mu$.

Para valores pequeños de J_z , el diagrama de fases de la Fig. 4.2 continua siendo esencialmente válido, con corrimientos adecuados en los valores críticos del campo y de α . A nivel de campo medio convencional, la Ec. (4.8) se aplica pero reemplazando B_c^{α} por el campo crítico

$$B_c^{\alpha z} = (J_x - J_z)(1 + \alpha)s,$$

si $J_z < J_x$, sin haber fases con ruptura de paridad si $J_z > J_x$. Y continua existiendo un campo factorizante uniforme cuando tienen una anisotropía común si $J_z < J_y$, dado por

$$B_s^{\alpha z} = \sqrt{(J_x - J_z)(J_y - J_z)}(1 + \alpha)s.$$
(4.34)

Para $B = B_s^{\alpha z}$, el estado uniforme de campo medio con ruptura de paridad (4.5)–(4.9) es nuevamente un estado fundamental degenerado exacto [55], con $\cos \theta = \sqrt{\frac{J_y - J_z}{J_x - J_z}}$ (y $\theta = \pm |\theta|$). Si $J_z > J_x > J_y$, aún se tiene un autoestado factorizado para $B = B_s^{\alpha z}$, pero no será un estado fundamental [55].

A nivel de campo medio de pares, podemos continuar utilizando el mismo estado (4.11)–(4.13), el cual conduce a

$$\langle 0_h^p | H | 0_h^p \rangle = \langle 0_h^p | H_{xy} | 0_h^p \rangle - \frac{n}{4} J_z [\cos \theta + \alpha \cos^2 \phi \cos^4 \frac{\theta}{2}], \qquad (4.35)$$

donde $\langle 0_h^p | H_{xy} | 0_h^p \rangle$ es la Ec. (5.9). Luego, se tiene que reemplazar a las Ecs. (4.23)–(4.25) por

$$\theta = 0, \ \tan \phi = \frac{J_{-}}{B + \frac{1}{2}\alpha J_z \cos \phi}, \qquad B \ge B_{c2}^{\alpha z},$$
(4.36a)

$$\begin{cases} \cos \theta = \frac{2(B \cos \phi + J_{-} \sin \phi - J_{+}) + J_{z}(1 + \frac{1}{2}\alpha \cos^{2} \phi)}{\alpha(J_{x}(1 + \sin \phi) - \frac{1}{2}J_{z} \cos^{2} \phi)} \\ \tan \phi = \frac{J_{-} + \frac{1}{4}\alpha J_{x}(1 - \cos \theta)}{B + \frac{1}{4}\alpha J_{z} \cos \phi(1 + \cos \theta)} \\ \theta = \pi \left(\phi \text{ arbitrario} \right), \qquad B \leq B_{c1}^{\alpha} \qquad (4.36c) \end{cases}$$

donde los campos críticos ahora dependen de J_z . El primer campo crítico, el cual delimita la fase dimerizada máximamente entrelazada, posee aún una expresión exacta simple, dada por

$$B_{c1}^{\alpha z} = \frac{1}{2}\sqrt{(J_x - J_z)(J_y - J_z - 2\alpha J_x)}.$$
(4.37)

La Ec. (4.37) implica que para $J_z < J_y$, continuaremos teniendo esta fase dimerizada siempre que $\alpha < \alpha_{cz}$, con

$$\alpha_{cz} = \frac{J_y - J_z}{2J_x} \,. \tag{4.38}$$

Si $\alpha > \alpha_{cz}$ (or $J_z > J_y$) tendremos ruptura de paridad para todo $B < B_{c2}^{\alpha z}$. A su vez, se anulará $B_{c2}^{\alpha z}$ para J_z lo suficientemente grande.

Como es de esperar, un acoplamiento J_z positivo en la Ec. (4.33) aumentará la energía del estado dimerizado ($\theta = \pi$ en la Ec. (4.35)). Por lo tanto, como consecuencia disminuirán los campos críticos, reduciendo la fase dimerizada como se observa en la Fig. 4.4. De hecho, esta fase desaparecerá para $J_z > J_y - 2\alpha J_x$ (Ec. (4.37)), como también se puede



Figura 4.4: Se muestra el ángulo θ del tratamiento de campo medio de pares (*CMG*) para el Hamiltoniano XYZ (4.33), en función del campo transverso para diferentes valores de J_z/J_x . La fase dimerizada corresponde a $\theta = \pi$, la fase parcialmente alineada a $\theta = 0$ y la fase con ruptura de paridad a $0 < \theta < \pi$. Se estableció $J_y/J_x = 1/2$ y $\alpha = 0,1$. Un acoplamiento J_z positivo (negativo) en (4.33) desfavorece (favorece) a la fase dimerizada, la cual surge para $J_z < J_y - 2\alpha J_x$ (Ec. (4.38)).

ver en la Fig. 4.4. Por otro lado, un acoplamiento J_z negativo tiene el efecto opuesto: disminuye la energía del estado dimerizado y aumenta $B_{c1}^{\alpha z}$, favoreciendo la dimerización. Este esquema tendrá validez también para acoplamientos XYZ de largo alcance suficientemente débiles, empleando las sustituciones (4.30) o (4.32).

4.4. Estados Reducidos

4.4.1. Campo Medio Estándar

En la fase con simetría de paridad rota, el estado reducido de un sitio en la aproximación de campo medio estándar toma la forma, tras restauración de simetría (Ec. (3.24)):

$$\rho_i = (\rho_i(\theta) + \rho_i(-\theta))/2 = \begin{pmatrix} \sin^2 \theta/2 & 0\\ 0 & \cos^2 \theta/2 \end{pmatrix}$$
(4.39)

Esto implica entrelazamiento del espín *i* con el resto del sistema (ρ_i no puro) en la fase con ruptura de paridad ($\theta \in (0, \pi)$). Hemos aquí despreciado el *overlap* entre los estados totales de distinta paridad. Análogamente, el estado reducido de dos sitios toma la forma, tras restauración de simetría,

$$\rho_{i,j} = (\rho_i(\theta) \otimes \rho_j(\theta) + \rho_i(-\theta) \otimes \rho_j(-\theta))/2$$

$$(4.40)$$

$$= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 4\sin^{2}\theta/2 & 0 & 0 & \sin^{2}\theta \\ 0 & \sin^{2}\theta & \sin^{2}\theta & 0 \\ 0 & \sin^{2}\theta & \sin^{2}\theta & 0 \\ \sin^{2}\theta & 0 & 0 & 4\cos^{4}\theta/2 \end{pmatrix}.$$
 (4.41)

Este es un estado no puro de rango 2 si $0 < \theta < \pi$ con autovalores $p_1 = \frac{1}{2}\sin^2\theta$, $p_2 = 1-p_1$. Al ser combinación convexa de estados productos es un estado *no entrelazado* (es decir, separable), aunque es correlacionado y posee discordia no nula.

Vemos así que las entropías de ρ_i y $\rho_{i,j}$ serán no nulas en la fase con simetría rota ($\theta \in (0, \pi)$), representando el entrelazamiento del espín y del par de espines, respectivamente, *con el resto del sistema*.

Notemos también que la entropía del estado de un espín se comporta de manera similar a 1-2|M|, donde M es la magnetización intensiva promedio: $M = \langle s_i^z \rangle = \langle S^z \rangle / N$. Para campos grandes $S(\rho_i) = 0$ y M = -1/2, mientras que para $B \to 0$, $S(\rho_i) = 1$ y M = 0. De hecho, $S(\rho_i)$ es una función estrictamente decreciente de |M|.

4.4.2. Campo Medio Generalizado

En la aproximación de campo medio de pares el estado reducido de un par fuertemente acoplado toma la forma, luego de restaurar la simetría de paridad en la fase con simetría rota,

$$\rho_{1,2} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (1+\cos\theta)(1-\cos\phi) & 0 & 0 & (1+\cos\theta)\sin\phi \\ 0 & 1-\cos\theta & 1-\cos\theta & 0 \\ 0 & 1-\cos\theta & 1-\cos\theta & 0 \\ (1+\cos\theta)\sin\phi & 0 & 0 & (1+\cos\theta)(1+\cos\phi) \end{pmatrix}$$
(4.42)

donde hemos utilizado la representación matricial en la base estándar: $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}.$

Puede verse que la concurrencia 2.31 de este estado está dada por

$$C(\rho_{1,2}) = |(1 + \cos\theta)\sin\phi - (1 - \cos\theta)|/2$$
(4.43)

La concurrencia es de tipo paralela si $(1 + \cos \theta) \sin \phi - (1 - \cos \theta) > 0$ (es decir, entrelazamiento como en el estado de Bell $(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$) y antiparalela si $(1 + \cos \theta) \sin \phi - (1 - \cos \theta) < 0$ (es decir, entrelazamiento como en el estado de Bell

 $(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$). Se anula cuando $\sin \phi = \frac{1-\cos \theta}{1+\cos \theta} = \tan^2 \frac{\theta}{2}$, es decir, en el *campo factorizante* (Ec. (4.28)).

Si $\theta = \pi$ el estado de par es un estado de Bell (antiparalelo) y $C(\rho_{1,2}) = 1$. Por el contrario, si $\theta = 0$ la concurrencia es paralela y toma el valor

$$C(\rho_{1,2}) = \sin \phi = \frac{J_-}{\sqrt{B^2 + J_-^2}}$$
(4.44)

El estado $\rho_{1,2}$ es un estado mixto de rango 2 en la fase con simetría rota ($0 < \theta < \pi$) y por supuesto puro en las otras fases ($\theta = 0$ o π). En la fase con simetría rota su entropía es entonces no nula y representa el entrelazamiento del par con el resto del sistema. Está dada por

$$S(\rho_{1,2}) = -\sum_{i=1,2}^{2} p_i \log_2 p_i$$
(4.45)

donde $p_1 = \sin^2(\theta/2), p_2 = \cos^2(\theta/2)$. Depende solamente de θ .

El estado reducido de un espín es entonces

$$\rho_i = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \cos\phi \cos^2\theta/2 & 0\\ 0 & 1 + \cos\phi \cos^2\theta/2 \end{pmatrix}.$$
 (4.46)

Es importante destacar que este estado es no puro $\forall \theta$ si $0 < \phi < \pi$. Por lo tanto, existirá entrelazamiento entre el espín y el resto del sistema en las tres fases.

4.5. Resultados Para Cadenas de Espín s = 1/2

Se muestran ahora los resultados del estudio de una cadena de N = 100 espines (para cadenas mayores el comportamiento cualitativo es el mismo). Se analizaron en primer lugar la concurrencia del par fuertemente acoplado (espines 1 y 2 en la figura 4.1) y también de un par próximo débilmente acoplado (espines 2 y 3 en la figura 4.1), así como el entrelazamiento de un espín y estos pares con el resto de la cadena; en función del campo externo aplicado (escalizado: B/J_x).

4.5.1. Concurrencia de Pares Fuertemente Acoplados

En la figura (4.5) se muestra la concurrencia del par fuertemente acoplado en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,1$. Recordemos que la concurrencia es una medida de entrelazamiento, dada por la fórmula (2.31). Claramente la aproximación de *Campo Medio* estándar (sitio individual) es incapaz de predecirla en absoluto. Por otro lado, en la figura (4.6) se observa que mediante el tratamiento de *Campo Medio Generalizado* (campo medio de pares) es posible obtener una muy buena aproximación de esta cantidad, no solo a nivel cualitativo sino también cuantitativo. En la figura (4.7) se aprecia que las correcciones *Perturbativas* en este caso no son significativas, aunque igual mejoran el acuerdo con el resultado exacto.

Vemos que la aproximación de *Campo Medio Generalizado* permite entender completamente el resultado: el par está en un estado de Bell hasta aproximadamente $B = B_{c1}$ (cadena dimerizada), y en el estado parcialmente entrelazado $|\psi^+\rangle$ de la figura (4.2) para $B > B_{c2}$, pasando a la combinación lineal de ambos en la fase intermedia. En esta se observa un punto donde la concurrencia se anula: este es precisamente el campo *factorizante*. En ese punto la concurrencia pasa de antiparalela a paralela. Recordemos también que la aproximación de *Campo Medio Generalizado* nos brinda una expresión analítica simple de la concurrencia (Ec. (4.43)).

4.5.2. Entrelazamiento de un par de Espines con el Resto de la Cadena

Más adelante podemos ver figuras que muestran el entrelazamiento del par con el resto de la cadena en función del campo externo aplicado (escalizado). Nuevamente en (4.8) vemos que la aproximación de *Campo Medio* de sitio individual no logra una predicción adecuada de este observable, aún luego de la restauración de simetría. En (4.9) se aprecia, en cambio, la notable capacidad descriptiva de esta magnitud por parte del tratamiento de *Campo Medio Generalizado*. Esto permite ver que la ruptura de simetría en esta aproximación es una señal de la existencia de correlaciones no perturbativas entre el par fuertemente acoplado y el resto de la cadena (pérdida de dimerización). En este caso las correcciones *Perturbativas* completan la descripción de esta magnitud en todo el rango de



Figura 4.5: La concurrencia del par fuertemente acoplado en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,1$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio* estándar (sitio individual)



Figura 4.6: La concurrencia del par fuertemente acoplado en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,1$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio Generalizado*

campo (aún fuera de la ventana), como se puede ver en la figura (4.9), observándose un total acuerdo con la curva exacta.

Las figuras (4.11,4.12,4.13,4.14,4.15) muestran una secuencia similar en el caso de un acoplamiento con $\alpha = 0,2$. Se observa el mismo comportamiento anterior salvo por una mayor diferencia en la vecindad de los campos críticos.



Figura 4.7: La concurrencia del par fuertemente acoplado en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,1$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio Generalizado* con correcciones *Perturbativas*



Figura 4.8: El entrelazamiento del par con el resto de la cadena en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,1$: externo aplicado (escalizado): curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio* de sitio individual

La figura (4.16) muestra resultados de la concurrencia del par fuertemente acoplado para $\alpha = 0.5$, valor en el cual el primer campo crítico (B_{c1}) es nulo. Se observa que la aproximación de *Campo Medio Generalizado* continua reflejando el comportamiento exacto, lo que indica que en este último el estado del par no es máximamente entrelazado para valor del campo nulo (dimerización parcial).



Figura 4.9: El entrelazamiento del par con el resto de la cadena en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,1$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio Generalizado*



Figura 4.10: El entrelazamiento del par con el resto de la cadena en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,1$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio Generalizado* con correcciones *Perturbativas*

La figura (4.17) presenta el entrelazamiento del par fuerte con el resto de la cadena para este caso. Se aprecia nuevamente, que la ruptura de simetría en la aproximación de campo medio de pares se manifiesta en un valor significativo de esta cantidad.

Se puede observar que en la figura (4.18) muestra el resultado para $\alpha = 1$ (cadena con acoplamiento uniforme) vemos que la aproximación de *Campo Medio Generalizado* pro-



Figura 4.11: La concurrencia del par fuertemente acoplado en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,2$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio Generalizado*



Figura 4.12: La concurrencia del par fuertemente acoplado en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,2$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio Generalizado* con correcciones *Perturbativas*

porciona un muy buen acuerdo con el resultado aún en este caso, en el cual no hay una predilección a priori en el sistema para elegir este esquema de aproximación. La aproximación de pares resulta útil también en este caso.



Figura 4.13: El entrelazamiento del par con el resto de la cadena en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,2$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio* de sitio individual



Figura 4.14: El entrelazamiento del par con el resto de la cadena en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,2$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio Generalizado*

4.5.3. Entrelazamiento de un Espín y de un Par débilmente acoplado, con el Resto de la Cadena

La figura (4.19) muestra el entrelazamiento de un espín con el resto del sistema para $\alpha = 0,2$. Vemos nuevamente el excelente acuerdo alcanzado por la aproximación de cam-



Figura 4.15: El entrelazamiento del par con el resto de la cadena en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,2$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio Generalizado* con correcciones *Perturbativas*



Figura 4.16: La concurrencia del par fuertemente acoplado en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,5$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio Generalizado*

po medio de pares. Esta cantidad es máxima (1) en la fase dimerizada inicial, decreciendo luego monótonamente al aumentar el campo. La figura (4.20) muestra el entrelazamiento de un par débil (espines 2,3) con el resto de la cadena para el mismo valor de α . Esta cantidad es también máxima (2) en la fase dimerizada y decrece monótonamente al au-



Figura 4.17: El entrelazamiento del par con el resto de la cadena en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,5$: curva *Exacta*, la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio* de sitio individual y las provistas por el tratamiento de *Campo Medio Generalizad* (sin y con correcciones *Perturbativas*)



Figura 4.18: La concurrencia del par fuertemente acoplado en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 1$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio Generalizado*

mentar el campo, siendo aproximadamente el doble que la cantidad mostrada en la figura anterior (salvo en la aproximación de campo medio estándar con restauración de simetría, en la que el valor no nulo se debe puramente a este último efecto).



Figura 4.19: El entrelazamiento de un espín con el resto de la cadena en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,2$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio* estándar (sitio individual) y el tratamiento de *Campo Medio Generalizado* con correcciones *Perturbativas*

4.5.4. Concurrencia y Entrelazamiento de Pares Débilmente Acoplados

La figura (4.21) muestra un observable difícil de estimar, que es el entrelazamiento interno de par débilmente acoplado. Esta cantidad es nula tanto en la aproximación de campo medio estándar como de pares, aún luego de la restauración de simetría, ya que esta conduce para este par a un estado no puro separable (combinación convexa de dos estados producto en este caso). Sin embargo, podemos estimar este observable mediante el tratamiento perturbativo de primer orden tomando como base la aproximación de *Campo Medio Generalizado*. Observemos que esta cantidad es no nula solo a partir de B_{c1} y su valor es muy bajo (notar el cambio de escala en la figura).

4.5.5. Comportamiento en Función de α

Finalmente las figuras (4.22, 4.23) muestran el comportamiento de la concurrencia del par fuertemente acoplado en función del acoplamiento débil α para campo fijo. Lo notable es que la concordancia con la curva exacta por parte de los resultados de la aproximación de campo medio de pares, se mantiene en todo el rango, aún en el caso $\alpha \rightarrow 1$.



Figura 4.20: El entrelazamiento del par débil con el resto de la cadena en función en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,2$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio* estándar (sitio individual) y el tratamiento de *Campo Medio Generalizado* con correcciones *Perturbativas*



Figura 4.21: La concurrencia del par débil con el resto de la cadena en función en función del campo externo aplicado (escalizado) para $\alpha = 0,2$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio Generalizado* con correcciones *Perturbativas*. La estimación es en cambio nula tanto en campo medio estándar como de pares.

4.5.6. Predicciones Para la Energía

En la Fig. 4.24 se muestran algunas predicciones para los niveles de energía, con el fin de tener un panorama general del tratamiento de campo medio de pares. Como se puede



Figura 4.22: La concurrencia del par fuertemente acoplado en función de α para $B/J_x = 0,15$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio* estándar (sitio individual) y el tratamiento de *Campo Medio Generalizado*



Figura 4.23: La concurrencia del par fuertemente acoplado en función de α para $B/J_x = 0,3$: curva *Exacta* y la obtenida por medio de la aproximación de *Campo Medio* estándar (sitio individual) y el tratamiento de *Campo Medio Generalizado*

apreciar en el panel superior, la energía del estado fundamental predicha por campo medio de pares supera significativamente al resultado obtenido por medio de campo medio convencional, especialmente para $B < B_s^{\alpha}$.

En el panel inferior, se muestran las primeras cuatro energías de excitación para una cadena pequeña de 8 espines. De acuerdo al tratamiento de campo medio de pares, los niveles más bajos son excitaciones de un par, de energías $E_m^0 = \varepsilon_m - \varepsilon_0$ (utilizando la



Figura 4.24: Panel Superior: La diferencia $\Delta E_0/n = (E_0^{app} - E_0^{ex})/n$ entre las energías aproximadas y la energía exacta del estado fundamental (dividas por el número de pares en unidades de J_x) de acuerdo a los tratamiento de campo medio convencional y de campo medio de pares, para la cadena de la Fig. 4.9 (100 espines). El recuadro muestra como referencia las correspondientes energías. Panel Inferior: Las primeras energías de excitación para una cadena pequeña de 8 espines con los mismos parámetros, de acuerdo a los resultados de campo medio de pares y exactos. El recuadro muestra en forma ampliada la primera energía de excitación exacta en la región con ruptura de paridad.

notación de la Ec. (3.13)–(3.15)), con ε_m las autoenergías del Hamiltoniano de pares independientes $(h^p|m\rangle = \varepsilon_m|m\rangle)$ y ε_0 la energía más baja. Estas energías son en el presente caso independientes del sitio y por lo tanto dan lugar a excitaciones *n* veces degeneradas en esta aproximación. Se verifica que para valores de α pequeños, este es aproximadamente el caso.

De todos modos, el desdoblamiento de estos niveles debido a la interacción residual puede ser descripto correctamente a través de un tratamiento perturbativo a primer orden. Este conduce, en este caso cíclico y con un campo medio de pares uniforme, a las energías de excitación del par perturbadas

$$E_m^{1k} = \varepsilon_m - \varepsilon_0 - 2\alpha \sum_{\mu=x,y} J_\mu \langle 0|s_1^\mu|m\rangle \langle m|s_2^\mu|0\rangle \cos\frac{2\pi k}{n} , \qquad (4.47)$$

donde k = 1, ..., n. Estas energías son aquellas de los estados de Fourier (*DFT*) $|\tilde{m}_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=1}^n e^{i2\pi k j/n} |m_j\rangle$, donde $|m_j\rangle$ denota los estados del par j en el nivel excitado m. Como se puede observar en el panel inferior, el resultado obtenido a partir de (4.47) es prácticamente exacto en las fases que preservan paridad, donde las energías $\varepsilon_m \operatorname{son} \pm J_+$ y $\pm \sqrt{B^2 + J_-^2}$, y los niveles de energía más bajos (4.47) pasan a ser

$$E_1^{1k} = \pm (J_+ - \sqrt{B^2 + J_-^2}) - \alpha (J_+ + \frac{J_-^2}{\sqrt{B^2 + J_-^2}}) \cos \frac{2\pi k}{n}, \qquad (4.48)$$

 $\operatorname{con} + \operatorname{para} B < B_{c1}^{\alpha}$ y - para $B > B_{c2}^{\alpha}$. Para n = 4, $E_1^{11} = E_1^{13} = E_1^0$, de forma tal que solamente se observan tres niveles. Por otro lado, campo medio convencional conduce a una energía de excitación de espín individual $E_1^{\mathrm{MF}} = B$ para $B > B_c^{\alpha}$ y $J_x(1 + \alpha)/2$ si $B < B_c^{\alpha}$, la cual se encuentra bastante por encima de los resultados anteriores.

La fase con ruptura de paridad del tratamiento campo medio de pares coincide aproximadamente con la región en la cual el estado fundamental de la cadena finita se vuelve casi degenerado [55, 74a, 75a, 80], como se aprecia en el panel inferior. Esto está de acuerdo con el hecho de que la solución con simetría de paridad rota del campo medio de pares es degenerada (el signo de θ en (4.13) y (4.24)), proporcionando dos estados cuasidegenerados ortogonales de buena paridad al restaurar la simetría. Los niveles más bajos exactos de energía de cada sector de paridad se vuelven muy cercanos en este intervalo, de hecho se cruzan para *n* campos (como se puede apreciar en el recuadro), ocurriendo el último cruce exactamente en el campo factorizante B_s^{α} . Este intervalo está contenido entre los campos B_{c1}^{ex} y B_{c2}^{ex} donde las energías de quasipartícula más bajas del Hamiltoniano obtenido a través de Jordan-Wigner se anulan (ver apéndice).

4.5.7. Resultados Para Escaleras y Redes de Espines

En la Fig. 4.25 se muestran resultados ilustrativos para una escalera y una red de espines finitas con condiciones de contorno cíclicas $(n + 1 = n \text{ en } (4.29), n_i + 1 = n_i \text{ para}$ i = 1, 2 en (4.31)). Hemos computado resultados por medio de la diagonalización exacta para un total de 2n = 16 espines (escalera de 2×8 y red de 4×4). Se estableció un valor *fijo* de $\alpha = 0,2$ en las Ecs. (4.30) y (4.32), con $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3$ en (4.30) y $\alpha_1 = \alpha_2$ en (4.32). Por comparación, se muestran también resultados para la cadena de la Ec. (4.1) con el mismo α y número de espines.

Se verifica que para un mismo α total, estos sistemas exhiben valores aproximadamente coincidentes para el entrelazamiento de un par fuertemente acoplado con el resto del



Figura 4.25: Resultados para la escalera y red de espines de la Fig. 4.3 (Ecs. (4.29), (4.31)). Se muestra el entrelazamiento de pares fuertemente acoplados con el resto del sistema $S(\rho_{12})$ (superior), y su concurrencia $C(\rho_{12})$ (centro), en función del campo para $\alpha = 0,2$ (Ecs. (4.30)–(4.32)). Los resultados resultados para ambos sistemas son muy cercanos y prácticamente coincidentes con los de la cadena cíclica de la Fig. ??, en acuerdo con la predicción de campo medio de pares. El panel inferior muestra la concurrencia en función del parámetro de acoplamiento total α , para dos valores fijos del campo.

sistema, y su concurrencia, confirmando de esta forma la predicción provista por campo medio de pares. Además, los resultados exactos están en muy buen acuerdo con los resultados de campo medio de pares. De hecho, los correspondientes a la escalera son esencialmente indistinguibles de los de la cadena, mientras que los resultados para la red son ligeramente más cercanos al resultado de campo medio de pares debido a tener mayor conectividad, en acuerdo con las correcciones perturbativas de las Ec. (3.17)–(3.18) y (3.23) (las cuales nuevamente pueden predecir las "colas" de $S(\rho_{12})$ en las fases que preservan paridad). No se muestran resultados para campo medio convencional ya que son similares a los de las Figs. 4.8–4.9. Como se puede observar en el panel inferior, la concurrencia $C(\rho_{12})$ es muy similar los tres sistemas, aún para valores altos del α total.

4.5.8. Resultados Para el Caso XYZ



Figura 4.26: Resultados para el estado fundamental de una cadena XYZ (Ec. (4.33)). Se muestran gráficos en función del campo para $\alpha = 0,1$ y $J_z = \pm 0,2J_x$ de la entropía de entrelazamiento $S(\rho_{12})$ (panel superior) del par fuertemente acoplado con el resto de la cadena, y su concurrencia $C(\rho_{12})$ (panel inferior). Los resultados exactos (líneas llenas) están nuevamente en acuerdo con aquellos de campo medio de pares (*GMF*, líneas de trazos), el cual predice un pico para $S(\rho_{12})$ en un sector con ruptura de paridad desplazado (respecto de aquel para $J_z = 0$), y un campo crítico menor (mayor) para la fase dimerizada si $J_z > 0$ ($J_z < 0$). La concurrencia se anula en el campo factorizante (4.34).

En la figura 4.26 se muestran resultados para una cadena XYZ cíclica finita. Nuevamente se computaron los resultados exactos por medio de diagonalización para n = 16
espines. Se verifica que las predicciones de campo medio de pares se confirman completamente. Adicionar un acoplamiento J_z pequeño esencialmente traslada los resultados obtenidos en la cadena XY, de acuerdo a las Ecs. (4.34) y (4.37). Como se mencionó anteriormente, si el acoplamiento es positivo (negativo) se tiene una fase dimerizada reducida (extendida), junto con un desplazamiento en la fase con ruptura de paridad, la cual es claramente visible a través del pico en la entropía de entrelazamiento del dímero $S(\rho_{12})$ con el resto de la cadena. Se tiene una vez más un buen acuerdo con los resultados de campo medio de pares, los cuales puedes mejorarse incorporando las correcciones de las Ec. (3.18)–(3.23). Para campos intensos $B \gg B_{c2}^{\alpha z}$, mencionamos que el efecto final es el reemplazo $B \to B_{\text{eff}} = B + \frac{1}{4}\alpha J_z$ (Ec. (4.36a)), con $\phi \approx J_-/B_{\text{eff}}$ para $B \gg B_{c2}^{\alpha z}$.

5 Aplicación a Cadenas Dimerizadas de Espín s

"Experimentar lo uno solo es posible en el nodos. Al ser esto no-dos, todas las cosas son idénticas, parecidas, y las contradicciones, toleradas."

Kanchi Sôsan

En este capítulo extenderemos el tratamiento de campo medio generalizado desarrollado en el capítulo precedente para sistemas de espín 1/2, a sistemas con espín $s \ge 1$. En tal caso la fermionización previa de Jordan-Wigner deja de ser aplicable y la determinación de soluciones exactas debe realizarse en forma numérica. No obstante, la dimensión del espacio de Hilbert del sistema crece exponencialmente con el número total de espines. El tratamiento de campo medio de pares autoconsistente constituye, en este contexto, un método muy conveniente para entender la física fundamental, que puede diferir considerablemente de las predicciones de campo medio convencional y del comportamiento bosónico esperado para valores altos de espín [90]. Este método, a su vez, provee una descripción precisa del estado reducido del par, permitiendo determinar las principales características del entrelazamiento del par.

Este enfoque, que no se basa en suposiciones previas sobre el estado del par, predice, para acoplamientos entre pares lo suficientemente pequeños, 2s fases dimerizadas en función del campo, separadas por fases con ruptura de paridad de espín. Las fases dimerizadas corresponden aproximadamente a *plateaus* de magnetización y entrelazamiento de par, mientras que las fases con ruptura de paridad se caracterizan, por el contrario, por un entrelazamiento interno débil y un entrelazamiento del par con el resto del sistema fuerte o al menos no despreciable. Estas predicciones se confirman en los resultados exactos obtenidos en cadenas de espines finitas de espín s = 1 y s = 3/2. Se analiza, también, el entrelazamiento de un par aislado para valores crecientes del espín s, medido por la negatividad. Se mostrará que el mismo satura rápidamente en el caso anisotrópico XYmientras que crece como $s^{1/2}$ en el caso XX, reflejando un espectro de entrelazamiento (de espín individual) diferente.

Las investigaciones descriptas en este capítulo dieron lugar a las publicación científica [9].

5.1. Formalismo

5.1.1. Campo Medio de Pares y Ruptura de Simetría de Paridad en Cadenas Dimerizadas de Espín General *s*

Consideramos una cadena finita de 2n espines s en un campo transverso uniforme B, interactuando a través de acoplamientos anisotrópicos XY de primeros vecinos y alternantes [55, 74-76, 80]. De esta forma la cadena contiene pares fuertemente acoplados interactuando débilmente con sus pares vecinos (Fig. 1 del capítulo previo). El Hamiltoniano de este sistema se puede escribir nuevamente como

$$H = \sum_{i=1}^{n} \left[B(S_{2i-1}^{z} + S_{2i}^{z}) - \sum_{\mu=x,y} J_{\mu}(S_{2i-1}^{\mu}S_{2i}^{\mu} + \alpha S_{2i}^{\mu}S_{2i+1}^{\mu}) \right],$$
(5.1)

donde S_i^{μ} son las componentes del espín en el sitio i (con $S_{2n+1}^{\mu} = S_1^{\mu}$ (0) en el caso cíclico (abierto)), J_{μ} son los acoplamiento y el parámetro α indica la intensidad relativa de los acoplamientos entre pares ($|\alpha| \leq 1$). Sin pérdida de generalidad, se puede asumir (para el caso cíclico con n par) $\alpha \geq 0$ y $J_x \geq 0$, dado que sus signos se pueden cambiar mediante rotaciones locales alrededor del eje z. A su vez, se puede fijar $B \geq 0$ (su signo se puede cambiar por una rotación global alrededor del eje y) y $|J_y| \leq J_x$. La simetría relevante para $J_y \neq J_x$ es la paridad de S^z , $P_z = \exp[i2\pi \sum_{i=1}^{2n} (S_i^z + s)] = \prod_{i=1}^{2n} P_{zi}$, que satisface $[P_z, H] = 0$.

En un tratamiento de campo medio de pares, el estado fundamental de (5.1) es aproximadamente un estado producto de pares $|\Psi_0\rangle = \prod_{i=1}^n |\psi_{0i}\rangle$, con $|\psi_{0i}\rangle$ el estado del par (2i - 1, 2i). La minimización de $E_0 = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle$ proporciona un Hamiltoniano de par autoconsistente $h = \sum_{i=1}^n h_i$, con

$$h_{i} = B(S_{2i-1}^{z} + S_{2i}^{z}) - \sum_{\mu} J_{\mu}[S_{2i-1}^{\mu}S_{2i}^{\mu} + \alpha(S_{2i}^{\mu}\langle S_{2i+1}^{\mu}\rangle + \langle S_{2i-2}^{\mu}\rangle S_{2i-1}^{\mu})], \quad (5.2)$$

donde $\langle S_{2i+j}^{\mu} \rangle = \langle \psi_{0i} | S_{2i+j}^{\mu} | \psi_{0i} \rangle$, i = 1, ..., n, j = -1, 0, son los valores medios en el estado fundamental $|\psi_{0i}\rangle$ de h_i (condiciones autoconsistentes). Recordemos que la diferencia fundamental con el tratamiento de campo medio convencional es que el acoplamiento interno del par es tratado de forma *exacta*. La energía es entonces

$$E_0 = \sum_{i=1}^n \left[\langle h_i \rangle + \alpha \sum_{\mu} J_{\mu} \langle S_{2i} \rangle \langle S_{2i+1} \rangle \right]$$

En la configuración ferromagnética considerada, asumimos en el caso cíclico un campo medio del par uniforme tal que $\langle S_{2i-1}^{\mu} \rangle = \langle S_{2i}^{\mu} \rangle \equiv \langle S^{\mu} \rangle$ independiente de *i* (simetría traslacional preservada), con $\langle S^{y} \rangle = 0$ para la energía de campo medio más baja si $|J_{y}| <$

 J_x . Luego, el campo medio de pares estará caracterizado por *un solo parámetro de orden* $\langle S^x \rangle$. Si $\langle S^x \rangle = 0$ el sistema se encuentra en una *fase dimerizada* que preserva paridad (con acoplamiento medio nulo entre pares), mientras que si $\langle S^x \rangle \neq 0$ corresponde a una *fase con ruptura de paridad*, con un acoplamiento no nulo entre pares. Esta última fase es, por supuesto, dos veces degenerada para $|J_y| < J_x$, dado que ambos signos $\langle S^x \rangle = \pm |\langle S^x \rangle|$ son igualmente posibles, con $|\psi_{0i}^-\rangle = P_{zi}|\psi_{0i}^+\rangle$. Por lo tanto, en las fases con ruptura de paridad consideraremos las combinaciones con paridad definida

$$|\Psi_{0\pm}\rangle \propto (\mathbb{1} \pm P_z) \prod_{i=1}^n |\psi_{0i}^+\rangle = \prod_{i=1}^n |\psi_{0i}^+\rangle \pm \prod_{i=1}^n |\psi_{0i}^-\rangle,$$
 (5.3)

que satisfacen $P_z |\Psi_{0\pm}\rangle = \pm |\Psi_{0\pm}\rangle$, eligiendo la de menor energía. Estos estados proporcionan un entrelazamiento finito entre pares.

Para determinar el inicio de la ruptura de simetría, consideraremos aquí el primer orden en la expansión del estado fundamental del par $|\psi_0\rangle = |\psi_{0i}\rangle$ para $\langle S^x \rangle$ pequeño,

$$|\psi_0\rangle \approx |\psi_0^0\rangle + |\delta\psi_0\rangle$$

donde

$$\delta\psi_0\rangle = \alpha J_x \langle S^x \rangle \sum_{k>0} \frac{\langle \psi_k^0 | S_t^x | \psi_0^0 \rangle}{E_k - E_0} | \psi_k^0 \rangle$$

con $S_t^x = S_1^x + S_2^x$ y { $|\psi_k^0\rangle$ } los autoestados del Hamiltoniano del par h^0 con $\langle S^x \rangle = 0$: $h^0 |\psi_k^0\rangle = E_k |\psi_k^0\rangle$. Dado que la simetría de paridad, conservada de forma exacta en h^0 , implica $\langle \psi_0^0 | S_t^x | \psi_0^0 \rangle = 0$ (asumiendo $|\psi_0^0\rangle$ no degenerado), tenemos $\langle S^x \rangle \approx \text{Re}[\langle \psi_0^0 | S_t^x | \delta \psi_0 \rangle]$ hasta el primer orden en $\langle S^x \rangle$, lo que implica la condición crítica

$$1 = \alpha J_x \sum_{k>0} \frac{|\langle \psi_k^0 | S_t^x | \psi_0^0 \rangle|^2}{E_k - E_0} \,. \tag{5.4}$$

Luego la ruptura de paridad es factible si

$$\alpha > \frac{1}{J_x \sum_{k>0} \frac{|\langle \psi_k^0 | S_t^x | \psi_0^0 \rangle|^2}{E_k - E_0}} \,.$$
(5.5)

La Ec. (5.4) determina un valor umbral *finito* para α (siempre y cuando el par aislado cumpla con $E_k - E_0 > 0 \forall k > 0$), el cual dependerá de la intensidad relativa del campo B/J_x , la razón $\chi = J_y/J_x$ y el espín s. Generalmente, la suma en (5.4) es dominada por el primer término $\frac{|\langle \psi_1^0|S_t^x|\psi_0^0\rangle|^2}{E_1-E_0}$, con E_1 la menor energía de paridad opuesta a la de E_0 . A su vez, tenemos la restricción $\alpha \leq 1$, la cual fija un límite superior a B/J_x ($B < B_c^p$).

5 Aplicación a Cadenas Dimerizadas de Espín s

Por otro lado, el valor límite *se anula* cuando la menor de las energías de excitación, $E_1 - E_0$, se anula. Esto ocurre en las transiciones de paridad del del estado fundamental del par. Por lo tanto, estos puntos de transición inducirán fases con ruptura de simetría en la cadena, que separan fases dimerizadas de distinta paridad para α suficientemente pequeño. Emergen así varios surgimientos (y "muertes") de zonas con ruptura de paridad a medida que el campo aumenta, como se verificará en la próxima sección. Para s = 1/2 ya vimos en el capítulo anterior que existen dos fases que preservan paridad si $\chi > 0$ y $\alpha < \frac{1}{2}\chi$, separadas por una fase con ruptura de paridad en una *sola* ventana de campo $B_{c1} < B < B_{c2}$.

Las múltiples fases dimerizadas que pueden surgir para s > 1/2 están obviamente ausentes en el tratamiento convencional de campo medio basado en espines independientes (aproximación de estado producto completo). En este sistema, esta aproximación resulta equivalente al tratamiento de campo medio de una cadena estándar con acoplamientos uniformes de intensidad promedio $J_x(1 + \alpha)/2$, siendo independiente de J_y si $|J_y| < J_x$. Para cualquier espín s da lugar a una sola fase con ruptura de paridad para $|B| < B_c^{\text{mf}} \equiv J_x s(1 + \alpha)$, donde $\langle S_x \rangle = \pm s \sin \theta \neq 0$ con $\cos \theta = B/B_c^{\text{mf}}$.

A pesar de esto, para $0 < J_y < J_x$ sigue existiendo un punto en el cual tanto la aproximación de campo medio convencional como la de pares *coinciden y son rigurosamente exactas* para *cualquier* valor del espín *s* y número de espines *n*, es decir, donde el estado fundamental de la cadena se olvida completamente de su estructura dimerizada, que es el *campo factorizante* [9, 55]

$$B_s = J_x s(1+\alpha) \sqrt{\chi} \,, \quad \chi = J_y / J_x \,. \tag{5.6}$$

Para este valor de campo la cadena presenta un par de estados fundamentales degenerados *completamente separables* (es decir, producto) y alineados, con ruptura de paridad:

$$|\pm\Theta\rangle = |\pm\theta,\pm\theta,\ldots\rangle,$$
 (5.7)

donde $|\pm\theta\rangle = e^{\pm i\theta S^y}|-s\rangle$ son los estado de un espín con espín máximo s formando un ángulo $\pm\theta$ con el eje -z, con $\cos\theta = B_s/B_c^{\text{mf}} = \sqrt{\chi}$.

En una cadena finita el campo factorizante (5.6) ocurre en la *última* transición de paridad del estado fundamental [56, 57] (ver próxima sección). En consecuencia, los límites laterales del estado fundamental exacto en B_s no estarán dados por el estado producto (5.7) sino por las combinaciones lineales de los mismos con paridad definida,

$$|\Theta_{\pm}\rangle \propto |\Theta\rangle \pm |-\Theta\rangle$$

que satisfacen $P_z |\Theta_{\pm}\rangle = \pm |\Theta_{\pm}\rangle$ [56, 57]. Estos estados serán correctamente descriptos por los estados de campo medio con simetría restaurada (5.3). Por lo tanto, cuando el campo *B* pase por el valor factorizante *B_s*, el estado fundamental exacto sufrirá una transición $|\Theta_{-}\rangle \rightarrow |\Theta_{+}\rangle$. En una cadena, para acoplamientos de tipo antiferromagnéticos ($J_x < 0$ y/o $\alpha < 0$ en (5.1)), los valores factorizantes y críticos de B y α toman exactamente los mismos valores previos, ya que este caso puede obtenerse simplemente aplicando rotaciones locales adecuadas al caso ferromagnético. Por ejemplo, si $J_x > 0$ pero $\alpha < 0$, estas rotaciones transformarán el estado uniforme de pares previo en un estado de pares tipo Néel, $|\Psi_0\rangle = |\psi_0\rangle|\tilde{\psi}_0\rangle|\psi_0\rangle \dots \operatorname{con}|\tilde{\psi}_0\rangle = e^{-i\pi(S_1^z + S_2^z)}|\psi_0\rangle \propto P_z|\psi_0\rangle$ y $\langle S^x\rangle_{2i+j} = (-1)^{i-1}\langle S^x\rangle$ para j = 0, -1. Estas rotaciones locales no afectan al espectro de energía ni a las medidas de entrelazamiento.

Por supuesto, el esquema de campo medio de pares puede ser aplicado a acoplamientos y geometrías más complejos. Por ejemplo, si el acoplamiento entre pares i e i + 1 contiene términos a segundos o terceros vecinos, siendo de la forma

$$-\sum_{\mu} J_{\mu} \sum_{j,l=1,2} \alpha_{jl} S_{2i-2+j}^{\mu} S_{2i+l}^{\mu}$$

simplemente tenemos que reemplazar el término α en (5.2) por

$$\sum_{j,l=1,2} S^{\mu}_{2i-2+j}(\alpha_{jl}\langle S^{\mu}_{2i+l}\rangle + \alpha_{lj}\langle S^{\mu}_{2i-4+l}\rangle).$$

Si la simetría traslacional permanece preservada, como ocurre para $\alpha_{jl} \geq 0 \forall j, l$, las ecuaciones previas pueden aplicarse directamente, presentando las mismas condiciones críticas (5.4) con $\alpha = \sum_{j,l=1,2} \alpha_{j,l}$.

5.1.2. Entrelazamiento

El estado reducido de un par fuertemente acoplado en el estado fundamental exacto $(|\Psi_0\rangle)$ de la cadena está dado por $\rho_{12} = \text{Tr}_{3,4,\dots}|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|$. El entrelazamiento del par con el resto de la cadena se puede determinar a través de la entropía de entrelazamiento $S(\rho_{12}) = -\text{Tr}\rho_{12}\log_2\rho_{12}$, satisfaciendo $S(\rho_{12}) \leq 2\log_2(2s+1)$ para un par de espines s.

Por otro lado, su entrelazamiento interno se puede cuantificar, para s > 1/2, mediante la negatividad N_{12} [42-44] (un monótono de entrelazamiento computable para estados mixtos de cualquier dimensión, ver 2.7.2).

A nivel de la aproximación de campo medio de pares, ρ_{12} será un estado puro en las fases que preservan paridad. Sin embargo, en las fases con ruptura de paridad ρ_{12} será *mixto* si se emplean los estados de paridad restaurada (5.3). Estos darán lugar a un estado reducido ρ_{12} de rango 2 de la forma

$$\rho_{12} \approx \frac{1}{2} (|\psi_0^+\rangle \langle \psi_0^+| + |\psi_0^-\rangle \langle \psi_0^-|) , \qquad (5.8)$$

69

si se desprecia el *overlap* complementario $|\langle \psi_0^+ | \psi_0^- \rangle|^{n-1}$ (despreciable en el caso de que $n \neq \langle S^x \rangle$ no sean muy pequeños), cuyos autovalores no nulos son simplemente $\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm |\langle \psi_0^- | \psi_0^+ \rangle|)$. Luego, en esta aproximación la entropía de entrelazamiento del par con el resto de la cadena será no nula en las fases con ruptura de paridad, con $S(\rho_{12}) \leq 1$ y $S(\rho_{12}) \approx 1$ si el *overlap* $\langle \psi_0^- | \psi_0^+ \rangle$ es también pequeño.

En el campo factorizante (5.6), la Ec. (5.8) es exacta si $\langle -\theta - \theta | \theta \theta \rangle^{n-1} = \cos^{4s(n-1)} \theta \approx$ 0). Consecuentemente, los límites laterales de ρ_{12} en el campo factorizante B_s son estados *separables*, es decir, una combinación convexa de estados producto [33], por lo que $N_{12} =$ 0 en este punto. Sin embargo, continuarán siendo *mixtos*, con autovalores $\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \cos^{4s} \theta)$, lo que implica un entrelazamiento no nulo del par con el resto de la cadena en la inmediata vecindad de este punto.

5.2. Resultados

5.2.1. El Caso de Espín s = 1

Un par de Espines con s = 1

En primer lugar examinaremos en detalle el caso de espín s = 1. A fin de entender el comportamiento del campo medio de pares y de la solución exacta para α general en (5.1), primero discutiremos el caso del par aislado ($\alpha = 0$). Los niveles de energía más bajos del par para cada paridad $P_z = \pm 1$ y para $|J_y| \leq J_x$ son

$$E_{+} = -\sqrt{2B^{2} + \frac{J_{x}^{2} + J_{y}^{2}}{2}} + \sqrt{4B^{2}(B^{2} - J_{x}J_{y}) + \frac{(J_{x}^{2} + J_{y}^{2})^{2}}{4}}, \qquad (5.9)$$

$$E_{-} = -\left[\frac{J_x + J_y}{2} + \sqrt{B^2 + \frac{(J_x - J_y)^2}{4}}\right], \qquad (5.10)$$

con autoestados

$$|\psi_{+}\rangle = \alpha_{-}|-1,-1\rangle + \alpha_{0}|0,0\rangle + \alpha_{+}|1,1\rangle + \alpha_{11}\frac{|-1,1\rangle+|1,-1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (5.11)$$

$$|\psi_{-}\rangle = \beta_{-} \frac{|-1,0\rangle + |0,-1\rangle}{\sqrt{2}} + \beta_{+} \frac{|0,1\rangle + |1,0\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|0,\phi\rangle + |\phi,0\rangle}{\sqrt{2}},$$
(5.12)

en la base producto estándar $\{|m_1, m_2\rangle\}$ de autoestados de S_1^z y S_2^z , donde

$$\alpha_{0} = \alpha_{-} \frac{2(|E_{+}|-2B)}{J_{x}-J_{y}}, \quad \alpha_{+} = \alpha_{-} \frac{|E_{+}|-2B}{|E_{+}|+2B}, \quad \alpha_{11} = \alpha_{0} \frac{J_{x}+J_{y}}{\sqrt{2}|E_{+}|}$$

$$\beta_{+} = \beta_{-} \frac{2(|E_{-}|-B)-(J_{x}+J_{y})}{J_{x}-J_{y}}. \quad (5.13)$$

Se puede apreciar que $|\psi_{-}\rangle$ es un estado tipo Bell, con $|\phi\rangle = \beta_{-}|-1\rangle + \beta_{+}|1\rangle$, mientras $|\psi_{+}\rangle$ tiene rango de Schmidt completo si $J_{y} \neq J_{x}$. Para campos intensos $B \gg J_{x}, E_{+} \approx -2B < E_{-} \approx -B$, mientras que para campo nulo también $E_{+} = -J_{x}\sqrt{1+\chi^{2}} < -2B < E_{-} \approx -B$, mientras que para campo nulo también $E_{+} = -J_{x}\sqrt{1+\chi^{2}} < -2B < E_{-} \approx -B$, mientras que para campo nulo también $E_{+} = -J_{x}\sqrt{1+\chi^{2}} < -2B < E_{-} \approx -B$, mientras que para campo nulo también $E_{+} = -J_{x}\sqrt{1+\chi^{2}} < -2B < E_{-} \approx -B$, mientras que para campo nulo también $E_{+} = -B_{x}\sqrt{1+\chi^{2}} < -2B < E_{-}$



Figura 5.1: Negatividad del estado fundamental de un par de espines con s = 1 para un acoplamiento anisotrópico $XY \operatorname{con} \chi = J_y/J_x = 0,75$, en función del campo transverso escalizado B/j_x , con $j_x = 2J_x s$. Se grafica también la cantidad s - |m|, con m la magnetización intensiva $\langle S_1^z + S_2^z \rangle/2$. El recuadro muestra los niveles de energía más bajos E_{\pm} para cada paridad, los cuales se cruzan en B_{c1} y $B_{c2} = B_s$ (campo factorizante del par) y dan lugar a la forma escalonada de la negatividad.

 $E_{-} = -J_x$, de modo que $|\psi_+\rangle$ es el estado fundamental en estos límites. Sin embargo, si $\chi = J_y/J_x \in (0, 1], |\psi_-\rangle$ será el estado fundamental en una ventana de campo $B_{c1} \leq B \leq B_{c2}$, como se puede apreciar en el recuadro de la Fig. 5.2, con

$$B_{c1} \approx \sqrt{\chi} J_x \frac{(1-4\chi/25)}{\sqrt{5}}, \quad B_{c2} = \sqrt{\chi} J_x = B_s ,$$
 (5.14)

donde la expresión para B_{c1} es válida para χ pequeño y B_s es el *campo factorizante* (5.6) para un par aislado ($\alpha = 0$). Luego, si $\chi > 0$ el estado fundamental del par atraviesa dos transiciones de paridad a medida que el campo aumenta desde 0, la última en el campo factorizante B_s .

Estas transiciones son reminiscencias de las transiciones de magnetización $M \to M-1$ para M = 0, 1 del caso $XX J_y = J_x (\chi = 1)$, en el que el autovalor M de $S_t^z = S_1^z + S_2^z$ es un buen número cuántico y $B_{c1} = (\sqrt{2} - 1)J_x$, $B_s = J_x = B_c^{\text{mf}}$. En consecuencia, en el caso XX los autoestados (5.11)–(5.12) son $|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\frac{|-1,1\rangle+|1,-1\rangle}{\sqrt{2}} + |0,0\rangle)$ para $|B| < B_{c1}$ y $|-1,-1\rangle$ para $B > B_s$, con $|\psi_-\rangle = \frac{|-1,0\rangle+|0,-1\rangle}{\sqrt{2}}$. Aquí el estado fundamental es separable $\forall B \ge B_s$.

5 Aplicación a Cadenas Dimerizadas de Espín s

Tanto en el caso XY como XX, estas transiciones del estado fundamental conducen a un decrecimiento escalonado del entrelazamiento del par, el cual se asemeja al comportamiento de s - |m|, con $m = \langle S_t^z \rangle/2$ la magnetización intensiva, tal como se aprecia en la Fig. 5.1. Dado que $|\psi_-\rangle$ es un estado tipo Bell, tiene una entropía de entrelazamiento *constante* $S_{12} = 1$ y una negatividad $N_{12} = 1/2$, independiente de la anisotropía e intensidad del campo (meseta de entrelazamiento estricta). Por otro lado, $|\psi_+\rangle$ en (5.11) da lugar a una negatividad mayor para $|B| < B_{c1}$, no estrictamente constante, cuyo valor a campo nulo está dado por

$$N_{12} = \frac{1 + |\chi|(1 + |\chi| + \chi^2 + \sqrt{1 + \chi^2})}{2\sqrt{(1 + \chi^2)^3}}.$$
(5.15)

Este valor crece con $|\chi|$ para $|\chi| \leq 1$, alcanzando el valor $N_{12} = \frac{1}{4} + \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0.96$ para $\chi = 1$ (cercano al máximo valor posible $N_{12}^{\max} = s = 1$ para un par de espines con s = 1). En cambio, para campos intensos $|B| > B_s$ el estado (5.11) se vuelve aproximadamente alineado (\approx |-1,-1 \rangle), lo cual implica un valor pequeño de la negatividad $N_{12} \approx \frac{J_x(1-\chi)}{4B}$. Como se mencionó previamente, se puede apreciar claramente que los límites laterales del estado fundamental en el campo factorizante $B_{c2} = B_s$ son los estados entrelazados $|\psi_{\pm}\rangle$, los cuales son en este punto combinaciones lineales de los estados separables $|\pm \theta, \pm \theta\rangle$ (Ec. (5.7)).

La magnetización media $\langle S_t^z \rangle$ está dada por $\beta_+^2 - \beta_-^2 = \frac{-B}{\sqrt{B^2 + J_x^2(1-\chi)^2/4}}$ en $|\psi_-\rangle$, la cual es cercana a -1 en el sector en el que este es un estado fundamental, y por $2(\alpha_+^2 - \alpha_-^2)$ en $|\psi_+\rangle$, siendo $\approx -\frac{B(1-\chi)^2}{J_x(1+\chi^2)^{3/2}}$ para campos débiles $|B| < B_{c_1}$ y $\approx \frac{J_x^2(1-\chi)^2}{8B^2} - 2$ para campos intensos $B > B_s$. Luego, el comportamiento de s - |m| se asemeja al de la negatividad, con $s - |m| \approx N_{12}^2$ para campos intensos.

La Cadena de Espíns=1

Retornemos a la cadena de espín 1. Las transiciones previas del estado fundamental del par aislado originan tres fases dimerizadas distintas de la cadena si $\chi > 0$ y α es suficientemente pequeño, como se puede apreciar en el diagrama de fase de campo medio de pares de la Fig. 5.2. Para campo fijo $B < B_c^p \approx J_x s$, la Ec. (5.5) determina un valor límite $\alpha_c(B)$ para ruptura de paridad, el cual se anula precisamente en los campos críticos B_{c1} y B_{c2} del par aislado. Para $\alpha < \alpha_c(B)$ obtenemos así una *fase dimerizada*, con todos los pares fuertemente acoplados en un estado altamente entrelazado $|\psi_+\rangle$ (Ec. (5.11)) si $|B| < B_{c1}$ o $|\psi_-\rangle$ (Ec. (5.12)) si $B_{c1} < B < B_s$, y nuevamente un estado aproximadamente alineado $|\psi_+\rangle$ si $B > B_s$.

A medida que el campo B aumenta desde 0 para un valor fijo pequeño de α , el estado de campo medio del par puede entonces atravesar *cuatro* transiciones entre fases de paridad



Figura 5.2: Panel superior: Diagrama de fases de la aproximación de campo medio de pares para una cadena cíclica dimerizada XY de espín s = 1 en el plano α -campo, para anisotropía $\chi = J_y/J_x = 0.75$. Los sectores coloreados indican fases dimerizadas con paridad de espín definida ($\langle S^x \rangle = 0$), mientras que el sector blanco representa la fase con ruptura de paridad (α_c indica el valor crítico (5.16) a campo cero). Completamente dentro de esta región podemos apreciar El campo factorizante (5.6) está representado por la línea de trazos y yace enteramente dentro de la fase con ruptura de paridad,. El mismo determina la última transición de paridad en el estado fundamental exacto. Por otro lado, la línea punteada muestra el campo crítico de campo medio convencional $B_c^{mf} = J_x s(1 + \alpha)$.

Panel inferior: Gráfico del parámetro de ruptura de paridad $\langle S^x \rangle$ en función del campo aplicado para distintos valores fijos de α (0.025,0.05,0.1,0.5 y 1). Su comportamiento refleja las fases del panel superior, mostrando una dependencia no monótona con el campo para valores de α pequeños, presentando "picos y valles" si $\alpha < \alpha_c(0)$. Para $\alpha = 1$ se acerca al resultado de campo medio convencional. 73 definida y fases con ruptura de paridad o vice versa, como se aprecia en la Fig. 5.2. A campo nulo, la Ec. (5.5) proporciona un valor crítico

$$\alpha_c(0) = \frac{(1+\chi^2)(\sqrt{1+\chi^2}(4+\chi^2)-4-3\chi^2)}{\chi^4}, \qquad (5.16)$$

que aumenta con $|\chi|$, alcanzando el valor ≈ 0.14 para $|\chi| \rightarrow 1$ y anulándose como $\approx \chi^2/8$ para $\chi \rightarrow 0$. Para $\chi = 0.75$ (Fig. 5.2), $\alpha_c(0) \approx 0.077$.

Por otro lado, si $\alpha > \alpha_c(0)$ obtenemos una sola fase con ruptura de paridad para $|B| < B_c(\alpha)$, con $B_c(\alpha)$ situado entre el campo factorizante (5.6) y el campo crítico de campo medio estándar B_c^{mf} , como también se puede ver en la Fig. 5.2. En el límite XX $(\chi \to 1), B_s(\alpha) = B_c(\alpha) = B_c^{\text{mf}}(\alpha) = J_x$.

Por completitud, podemos también mencionar que si $\chi < 0$ ($-J_x < J_y < 0$), el par aislado presenta un estado fundamental no degenerado y de paridad positiva para todo valor del campo aplicado, no presentando transiciones abruptas. En consecuencia, en este caso la ruptura de paridad, en la aproximación de campo medio de pares para una cadena, ocurre solamente por encima del valor límite *finito* $\alpha_c(B) > \alpha_c(0) \forall B < B_c^p$, es decir, para $\alpha > \alpha_c(0)$ y $|B| < B_c(\alpha) < B_c^{mf}(\alpha)$. Si $\alpha < \alpha_c(0)$ y $\chi < 0$ no ocurre ruptura de paridad. Luego, vemos que J_y puede afectar fuertemente el diagrama de fases de campo medio de pares, al contrario de lo que sucede con la aproximación de campo medio convencional.

La Fig. 5.3 muestra en el panel superior izquierdo resultados exactos para el entrelazamiento interno, cuantificado por la negatividad, de un par de espines fuertemente acoplado, en función del campo magnético aplicado para α fijo y $\chi = 0.75$, junto con la magnetización intensiva $m = \langle \sum_i S_i^z \rangle / (2n)$ (a través de la cantidad s - |m|). Los resultados exactos fueron obtenidos mediante diagonalización exacta en una cadena con 2n = 8 espines. Podemos observar que la predicción de campo medio de pares (*GMF*, por *Generalized Mean Field*), se encuentra en muy buen acuerdo con los resultados exactos. Las dos fases dimerizadas para $B < B_s$ se corresponden con mesetas aproximadas en la negatividad N_{12} y magnetización. En cambio, en las fases con ruptura de paridad, N_{12} decae considerablemente. A su vez, se puede apreciar la anulación de N_{12} en el campo factorizante $B_s \approx 0.45 j_x$. El comportamiento de s - |m|, por otro lado, es cercano al de la negatividad del par pero exhibe solamente un decrecimiento recto en los sectores con ruptura de paridad, reflejando en realidad el comportamiento de la entropía de entrelazamiento S_1 de un espín con el resto del sistema, mostrada en el panel inferior.

En los paneles de la derecha se observan resultados para $\alpha = 0,1$, en cuyo caso las fases dimerizadas con paridad definida ya no están más presentes en *GMF*. Sin embargo, el correspondiente parámetro de orden $\langle S^x \rangle$ aún exhibe una variación no monótona con el campo (como se aprecia en la Fig. 5.2). En consecuencia, los resultados exactos para la negatividad también evolucionan de forma no monótona, en acuerdo con la predicción



Figura 5.3: Paneles superiores: Resultados exactos y de campo medio generalizado (*GMF*) para la negatividad de un par fuertemente acoplado en una cadena de espín 1 dimerizada, en función del campo magnético aplicado, para factores de acoplamiento $\alpha = 0,05$ (izquierda) y $\alpha = 0,1$ (derecha). Se muestra también la cantidad s - |m|, con $m = \langle \sum_i S_i^z \rangle/2n$ la magnetización intensiva.

Paneles inferiores: Se presentan los resultados correspondientes, exactos (líneas llenas) y GMF (líneas de trazos), para las entropías de entrelazamiento de un par de espines fuertemente acoplados (S_2) y de un espín individual (S_1) con el resto de la cadena, para los mismos valores de α y s. El recuadro muestra las discontinuidades en la S_2 exacta, provenientes de las transiciones de paridad del estado fundamental exacto, que surgen dentro de las fases con ruptura de paridad en GMF.



Figura 5.4: Las energías de excitación exactas más bajas en una cadena dimerizada de espín 1 para $\alpha = 0.05$ y 2n = 8 espines. La línea de trazos muestra el parámetro de ruptura de paridad (escalizado) $\langle S^x \rangle / j_x$ en *GMF*. Todas las transiciones de paridad del estado fundamental ocurren dentro de las fases con ruptura de paridad en *GMF*, en la cual las energías de excitación más bajas disminuyen y son mínimas.

de *GMF*. A su vez, las mesetas ("plateaus") de magnetización comienzan a desaparecer, tal como se observa en la aproximación *GMF*.

El comportamiento magnético de las entropías de entrelazamiento de un par de espines fuertemente acoplados ($S_2 = S(\rho_{12})$), y de un espín individual ($S_1 = S(\rho_1)$), con el resto de la cadena, se muestra en en el panel inferior. S_2 presenta máximos en las fases con ruptura de paridad (en el campo medio de pares), o en general cuando el parámetro de ruptura de paridad $\langle S^x \rangle$ exhibe un máximo, reflejando su comportamiento. Por lo tanto, la ruptura de paridad es un indicativo directo del entrelazamiento del par con el resto de la cadena. La dimerización también es evidente a través del menor valor de S_2 en las fases dimerizadas. Por otro lado, el comportamiento de S_1 es muy distinto, y cualitativamente similar al de s - |m|, dado que el último es un indicador del grado de mezcla del estado reducido ρ_1 . Los resultados de *GMF* (obtenidos con el estado mixto (5.8) en las fases con ruptura de paridad) muestran nuevamente un muy buen acuerdo con los resultados exactos, para ambos valores de α , proporcionando una interpretación clara y prediciendo correctamente el máximo valor $S_2^{max} \approx 1$ en las fases con ruptura de paridad. A su vez, predicen los límites laterales exactos de estas entropías en el campo factorizante B_s .

Además, el estado fundamental exacto de la cadena completa exhibe 2ns transiciones de paridad a medida que el campo aumenta desde 0 (nuevamente heredadas de las 2ns transiciones de magnetización de la cadena XX), la última de estas teniendo lugar preci-

samente en el campo factorizante (5.6). Se verifica que estas transiciones *están confinadas dentro de los sectores con ruptura de paridad de la aproximación de campo medio de pares*, como se puede apreciar en la Fig. 5.4 y en el recuadro del panel inferior izquierdo de la Fig. 5.3 (presentan discontinuidades pequeñas pero apreciables en todas las cantidades mostradas para n pequeño). Estas indican los cruces de los niveles de energía exactos más bajos de paridad opuesta, los cuales se encuentran muy cercanos en los sectores con ruptura de paridad en *GMF*, como se verifica en la Fig. 5.4.

5.2.2. El Caso de Espín *s* General

El Caso de Espín s

En rasgos generales, el comportamiento continua siendo similar para valores de espín s mayores, pero el número de fases dimerizadas con paridad definida para α pequeño, que surgen para $\chi > 0$ y $B < B_s$ en la aproximación *GMF* (campo medio de pares), pasan a ser 2s, siguiendo las 2s transiciones de paridad del estado fundamental del par aislado en función del campo (la última ocurriendo nuevamente en el campo factorizante del par, $B_s = J_x s \sqrt{\chi}$). En consecuencia, existen tres fases dimerizadas en el caso s = 3/2para $B < B_s$, dos de paridad negativa, como se ve en la Fig. 5.5 (para poder comparar de forma más simple con diferentes espines, se escalean los campos con $j_x = 2J_x s$ en todas las Figuras, tal que B_s/j_x y $B_c^{\rm mf}/j_x = (1 + \alpha)/2$ son independientes del espín, con $B_c^{\rm mf}/j_x = 1$ en la cadena uniforme ($\alpha = 1$)). Para valores de α suficientemente pequeños el estado fundamental de campo medio de pares puede entonces atravesar, para s = 3/2, hasta *seis* transiciones entre estados de paridad definida y fases con ruptura de paridad (o vice versa), a medida que *B* aumenta.

Se puede apreciar, a su vez, que el valor límite de α para la existencia de múltiples fases dimerizadas para $\chi > 0$, decrece a medida que aumenta el espín. A campo nulo, se tiene esencialmente $\alpha_c(0) \propto \Delta E/(J_x s^2)$, con $\Delta E = E_1 - E_0$ el gap de energía entre el fundamental y el primer estado excitado. Para $\chi = 1$ (caso XX) $\Delta E \propto J_x$ y luego $\alpha_c(0) \propto s^{-2}$. Para s = 3/2 se tiene $\alpha_c(0) \approx 0,06$. Sin embargo, para $\chi < 1 \alpha_c(0)$ se vuelve exponencialmente pequeño para s grande, dado que ahora ΔE decrece exponencialmente a medida que aumenta el espín. El comportamiento con s de $\alpha_c(B)$ para otros campos $B < B_s$ es cualitativamente similar. Para $\chi = 0,75$ y s = 3/2 se tiene un valor de $\alpha_c(0) \approx 0,019$, como se puede ver en la Fig. 5.5. No obstante, para $\alpha > \alpha_c(0)$ pero aún cercano a $\alpha_c(0)$, el parámetro de ruptura de paridad de $GMF \langle S^x \rangle$ continua exhibiendo una evolución no monótona con el campo aplicado, como se puede observar para $\alpha = 0,05$, donde aún posee tres mínimos locales remanentes de las fases dimerizadas. Por otro lado, para $\chi < 0$ no hay ruptura de paridad si $\alpha < \alpha_c(0)$, como se discutió en el caso previo de espín s = 1.

El acuerdo entre las predicciones de campo medio de pares y los resultados numéricos exactos sigue siendo muy bueno para valores pequeños de α , como se puede apreciar en



Figura 5.5: (Panel superior: Diagrama de fases de campo medio generalizado para una cadena dimerizada de espín 3/2 en el plano α -campo, para una anisotropía $\chi = J_y/J_x = 0.75$. Ahora existen tres fases dimerizadas con paridad definida por debajo de B_s (sectores coloreados) si α es suficientemente pequeño. Los detalles restantes son similares a los de la Fig. 5.2. Panel inferior: El parámetro de ruptura de paridad correspondiente $\langle S^x \rangle$ en función del campo para diferentes valores de α ((0,01,0,02,0,05,0,1,05 y 1). Su comportamiento refleja las fases del panel superior, exhibiendo una variación no monótona α pequeño, presentando "picos y valles" si $\alpha \leq \alpha_c(0)$.



Figura 5.6: Panel superior: Resultados exactos y de la aproximación *GMF* para la negatividad de un par fuertemente acoplado en una cadena de espín 3/2 dimerizada con $\chi = 0,75$, en función del campo magnético aplicado (escalizado), para dos valores diferentes del factor de acoplamiento α . Nuevamente, $m = \langle S_z \rangle / n$ denota la magnetización intensiva. Panel inferior: Los correspondientes resultados exactos (líneas llenas) y de *GMF* (líneas de trazos) para las entropías de entrelazamiento de un par de espines fuertemente acoplado (S_2) y de un espín individual (S_1) con el resto de la cadena, para los valores previos de α .

la Fig. 5.6. La negatividad exacta N_{12} y la entropía de entrelazamiento del par S_2 exhiben, consecuentemente, una evolución no monótona con el campo para valores pequeños de α . Para $\alpha = 0,01, N_{12}$ presenta 2s mesetas aproximadas en las fases dimerizadas de campo medio de pares, separadas por "valles" profundos en los sectores con ruptura de paridad, antes de alcanzar el régimen de campo intenso para $B > B_s$. Por otro lado, S_2 es nuevamente máxima y cercana a 1 en el centro de las fases con ruptura de paridad, en completo acuerdo con los resultados de campo medio de pares obtenidos por medio de los estados con restauración de paridad (5.8). A su vez, se puede observar 2s plateaus aproximados de magnetización, en acuerdo con la predicción del campo medio de pares.

Estos efectos se atenúan para $\alpha = 0,05$ (paneles derechos), donde no existen más las fases completamente dimerizadas para $B < B_s$ en *GMF*. Sin embargo, el comportamiento de N_{12} y S_2 permanece siendo no monótono, en acuerdo con el de $\langle S^x \rangle$ en *GMF*. Se puede apreciar también que las predicciones de campo medio de pares para la magnetización y la entropía de entrelazamiento S_1 de un espín con el resto son muy precisas en ambos paneles, con s - |m| un buen indicador cualitativo de esta última. El estado fundamental de la cadena finita aún exhibe 2ns transiciones de paridad a medida que *B* aumenta desde 0, la última de estas ocurriendo en el campo factorizante (5.6), aunque las discontinuidades resultantes en las magnitudes mostradas disminuyen a medida que *s* aumenta. Nuevamente se encuentran confinadas en el sector con ruptura de paridad de *GMF* (o sea, en los estrechos intervalos de ruptura de paridad para $\alpha = 0,01$). Del mismo modo a lo sucedido anteriormente, la factorización en B_s se ve reflejada en la anulación de N_{12} en este punto, mientras que las entropías de entrelazamiento S_1 y S_2 se aproximan a los límites finitos determinados por el estado (5.8), con $S_2 > S_1$ solamente en la vecindad de B_s .

Comportamiento Para Espín Alto

En esta sección examinaremos con mayor detalle el entrelazamiento de un par de espines con acoplamiento XY en un campo externo al aumentar el valor del espín s. En el panel superior de la Fig. 5.7 se muestra el espectro de entrelazamiento (los autovalores de la matriz densidad reducida de un espín ρ_1) en función del campo aplicado.Para $\chi < 1$ y s no muy pequeño, los estados reducidos son esencialmente estados de rango 2 en todo el sector $B < B_s$, La razón es que la componente principal del estado fundamental del par ($|\psi_+\rangle$ o $|\psi_-\rangle$) es simplemente un estado de campo medio de rango 2 con paridad restaurada, es decir, $|\Theta_{\pm}\rangle$, de forma que

$$|\psi_{\pm}\rangle = \gamma |\Theta_{\pm}\rangle + |\delta\psi_{\pm}\rangle$$

con

$$|\Theta_{\pm}\rangle = \frac{|\theta,\theta\rangle \pm |-\theta,-\theta\rangle}{\sqrt{2(1\pm\cos^{4s}\theta)}} = \sqrt{p_{\pm}}|\theta_{+}\theta_{\pm}\rangle + \sqrt{1-p_{\pm}}|\theta_{-}\theta_{\mp}\rangle, \quad (5.17)$$

donde la última expresión es su descomposición de Schmidt, con $|\theta_{\pm}\rangle = \frac{|\theta\rangle \pm |-\theta\rangle}{\sqrt{2(1\pm\cos^{2s}\theta)}}$ los estados locales ortogonales con paridad definida y $p_{-} = \frac{1}{2}$, $p_{+} = \frac{(1+\cos^{2s}\theta)^2}{2(1+\cos^{4s}\theta)}$. Estos estados conducen a una matriz densidad ρ_1 de rango 2 con autovalores $(p_{\pm}, 1 - p_{\pm})$. Optimizando el ángulo θ se encuentra que el *overlap* $|\gamma| = |\langle \Theta_{\pm} | \psi_{\pm} \rangle|$ excede 0.9 para todos los valores de campo y espín, con $|\gamma| = 0.95$ para todo campo si $s \ge 5$. Los estados (5.17) son por su puesto exactos en el campo factorizante B_s , con $|\gamma|$ permaneciendo por encima de 0.99 para $B > B_s$. Se puede verificar de la Fig. 5.7 que la contribución de $|\delta\psi_{\pm}\rangle$ al espectro de entrelazamiento es despreciable.

No obstante, su contribución a la negatividad es importante si χ no es muy pequeño. Para $|B| < B_s$ los estados $|\Theta_{\pm}\rangle$ conducen esencialmente a una negatividad constante $N_{\pm} \approx 1/2$ para valores de s altos, si θ no es muy pequeño, es decir,

$$N(|\Theta_+\rangle) = \frac{1 - \cos^{4s}\theta}{2(1 + \cos^{4s}\theta)}, \quad N(|\Theta_-\rangle) = \frac{1}{2}$$

que se encuentra por debajo del valor exacto para $B < B_s$. No obstante, es importante destacar que si $\chi < 1$, la negatividad *permanece acotada para todo valor de s*, saturando para $s \to \infty$ en un valor finito. Su máximo a campo nulo es alcanzado de hecho para espín bajo y finito ($s \approx 2$ para $\chi = 0,75$, como se puede ver en el panel inferior izquierdo de la Fig. 5.7).

Para valores altos del espín s y $\chi < 1$, la corrección $|\delta \psi_{\pm}\rangle$ y su efecto en la negatividad del par y en la entropía de entrelazamiento se pueden determinar por medio un tratamiento bósonico (RPA[90]). Alrededor de la fase de campo medio estándar ($B > B_c = J_x s$) esta técnica implica al menor orden la realización de las sustituciones $S_i^z \approx b_i^{\dagger} b_i - s$, $S_i^+ \approx b_i^{\dagger}, S_i^- \approx b_i \operatorname{con} b_i, b_i^{\dagger}$ operadores bosónicos ($[b_i, b_j^{\dagger}] = \delta_{ij}$), mientras que en las cercanías de la ruptura de paridad de campo medio se realiza un reemplazo similar para los operadores de espín rotados $S_i^{z'}, S_i^{\pm'}$, con $S_i^{-'} |\Theta\rangle = 0$. Teniendo en cuenta los efectos de restauración de paridad, esta bosonización conduce a la expresión analítica

$$N_{12} = \begin{cases} f + \sqrt{f(f+1)}, & |B| > B_c = J_x s\\ 2[f + \sqrt{f(f+1)}] + 1/2, & |B| < B_c \end{cases}$$
(5.18)

donde f es el número de ocupación bosónico medio,

$$f = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{\lambda^2 - \omega_m^2}{\omega_+ \omega_-}} - 1 \right),$$
 (5.19)



Figura 5.7: Panel superior: El espectro de entrelazamiento del estado fundamental de un par de espines s en función del campo aplicado para s = 5 y $\chi = J_y/J_x = 0.75$ (izquierda) y 1 (derecha). En el caso anisotrópico está formado esencialmente por solo dos autovalores degenerados por debajo del campo factorizante (como se describe en la Ec. (5.17)), mientras que en el caso XX (derecha) existen varios autovalores no nulos (dos veces degenerados), en acuerdo con el perfil gaussiano (5.22) (presentado en el panel inferior derecho para s = 5 y 20, junto con los resultados exactos, indistinguibles de (5.22)). Panel inferior: La negatividad del par en función del campo magnético (escalizado) para diferentes valores del espín y $\chi = 0.75$ (izquierda), donde $s = 1/2, 1, \frac{3}{2}, 2, 5, 10$ y ∞ (límite bosónico, Ec. (5.18)), y $\chi = 1$ (derecha, donde $s = 1/2, 1, \frac{3}{2}, 2, 5, 10, 20$ y 50. Notar que las escalas son distintas.

con $\lambda = |B|(B_c)$ para $|B| > B_c (< B_c)$, $\omega_m = \frac{\omega_+ + \omega_-}{2}$ y ω_{\pm} las autofrecuencias bosónicas

$$\omega_{\pm} = \begin{cases} B_c \sqrt{(1 \pm (B/B_c)^2)(1 \pm \chi)}, & |B| < B_c \\ B_c \sqrt{(B/B_c \pm 1)(B/B_c \pm \chi)}, & |B| > B_c \end{cases}$$
(5.20)

Los resultados exactos para la negatividad se aproximan al valor finito previo y al límite bosónico independiente de s al aumentar el espín s, siempre que $\chi < 1$ (panel inferior izquierdo de la Fig. 5.7). La entropía de entrelazamiento del par correspondiente está dada por $S_2 = -f \log_2 f + (f+1) \log_2(f+1) + \delta$, donde $\delta = 0$ (1) para $B > B_c$ ($< B_c$) [90], siendo este último factor consecuencia de la ruptura de simetría para $B < B_c$.

Sin embargo, en el caso XX ($\chi = 1$, o sea $J_y = J_x$) el comportamiento para valores a los del espín es diferente. En este caso, H_{12} conmuta con la componente de espín total $S_t^z = S_1^z + S_2^z$, lo que implica que la solución con ruptura de paridad de campo medio de pares rompe una simetría continua. Luego, la restauración de simetría implica integrar sobre todas las rotaciones alrededor del eje z (es decir, proyectar sobre magnetización definida) y los tratamiento previos (Ecs. (5.17)–(5.18)) dejan de ser válidos. A pesar de ello, dado que el estado fundamental exacto tiene ahora magnetización definida M, es de la forma

$$|\psi_M\rangle = \sum_{m=-s}^{M+s} \alpha_M^m |m, M-m\rangle, \quad (\chi = 1)$$
(5.21)

para $M \leq 0$, con M determinada por el campo transverso aplicado ($M \approx -2s[B/B_c]$ para $B \leq B_c$, donde [...] denota parte entera) y todos los α_M^m del mismo signo para $J_x > 0$ en (5.1). La Ec. (5.21) es directamente su descomposición de Schmidt, lo cual implica que el estado reducido de espín individual tendrá autovalores $|\alpha_M^m|^2$, dos veces degenerados para $m \neq M/2$ ($\alpha_M^m = \alpha_M^{M-m}$), lo que conduce al espectro de entrelazamiento del panel superior derecho de la Fig. 5.7. El número de autovalores no nulos (el rango de Schmidt de $|\psi_M\rangle$) serán 2s + 1 - |M|. Para |M| no muy cercano a 2s los coeficientes tendrán esencialmente una *distribución gaussiana*, como se puede apreciar en el panel inferior derecho de la Fig. 5.7,

$$\alpha_M^m \propto e^{-(m-M/2)^2/(4\sigma_M^2)}, \quad \sigma_M \approx r_M s \tag{5.22}$$

donde para s no muy pequeño, la fluctuación $\sigma_M^2 \approx \langle (S_1^z - M/2)^2 \rangle$ será proporcional al espín s, como se obtiene a partir de la expansión de espín alto de la ecuación de autovectores exacta. El factor r_M decrece a medida que |M| aumenta y para M = 0 está dado por $r_0 = 1/(2\sqrt{2}) \approx 0.35$, mientras que para |M| = s/2, $r_{s/2} \approx 0.32$. El overlap entre la expresión gaussiana y la distribución exacta excede 0.999 para $s \ge 5$ y M = 0.

Remarquemos que para dos espines s acoplados al espín total 2s y con magnetización M, la distribución correspondiente de los α_M son los coeficientes de *Clebsch-Gordan*, los



Figura 5.8: Negatividad de un par de espines a campo nulo para distintas anisotropías $\chi = J_y/J_x$, en función del espín s. Para $\chi < 1$ satura en un valor finito, aproximándose a los valores límites (5.18), mientras que para $\chi = 1$ aumenta como \sqrt{s} , como se muestra en la Ec. (5.23) (indistinguible de los resultados exactos para $s \ge 1$ en esta escala).

cuales también conducen a una distribución gaussiana para s alto y |M| no muy cercano a 2s, con una fluctuación proporcional a s pero ligeramente menor (a campo cero, $\sigma_0^2 \approx s/4 < s/(2\sqrt{2})$). Luego, la distribución en el estado fundamental del par XX contiene pequeñas contribuciones provenientes de valores bajos del espín total, dado que H_{12} no conmuta con este.

Por consiguiente, la negatividad del par se puede estimar a través de la aproximación gaussiana, la cual, usando la Ec. (2.34), conduce a

$$N_{12} \approx \sqrt{2\pi\sigma_M^2} - \frac{1}{2} \approx \sqrt{2\pi r_M s} - \frac{1}{2}.$$
 (5.23)

En consecuencia, el entrelazamiento interno del par *no permanece acotado* a medida que el espín aumenta, a diferencia del caso previo, con N_{12} creciendo como \sqrt{s} para $\chi = 1$, como se verifica en el panel inferior derecho de la Fig. 5.7 y en la Fig. 5.8. De forma similar, la entropía de entrelazamiento del par, se convierte en $S(\rho_1) \approx \frac{1}{2 \ln 2} [1 + \ln(2\pi \sigma_M^2)] \approx \frac{1}{2 \ln 2} [1 + \ln(2\pi r_M s)].$

El comportamiento previo del entrelazamiento con s continua siendo válido aún para un acoplamiento XXZ, es decir $-J(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) - J_z S_1^z S_2^z$ si $J > J_z > -J$ (J > 0), en cuyo caso los coeficientes α_M^m permanecen gaussianos con ancho finito σ_M . Sin embargo, en el caso antiferromagnético $J_z = -J$, J > 0 (equivalente por medio de rotaciones locales a $J_z = J < 0$) y para magnetización nula, la gaussiana anterior se torna uniforme y el estado fundamental del par es entonces *máximamente entrelazado*, es decir, $|\alpha_m^0| = 1/\sqrt{2s+1} \forall m \pmod{|\psi_0|}$ convirtiéndose en un estado *singlete* con momento angular total cero para $J_z = J < 0$). Luego, este estado conduce a $N_{12} = s$ y $S(\rho_1) = \log_2(2s+1)$, con fluctuación máxima $\langle S_1^{z^2} \rangle = s(s+1)/3$.

6 Entrelazamiento Sistema-Tiempo

"Existencia-tiempo significa que el tiempo es, en sí mismo, existencia; y que todas las existencias son, en sí mismas, tiempo. "

Eihei Dōgen

El tiempo se consideró históricamente como un parámetro externo, el cual podía ser leído a través de un reloj clásico apropiado. Dicho enfoque puede ser respaldado en el marco de un tiempo absoluto o de tiempos propios definido por una métrica espacio-tiempo clásica, pero claramente deja de valer si la métrica es un objeto dinámico por lo que debe estar cuantizada, como en el caso de gravedad cuántica [91-96]. Consecuentemente en la búsqueda de una teoría cuántica de la gravedad consistente, el reloj debe ser él mismo un sistema cuántico. De hecho, la ecuación de Wheeler-DeWitt [21] predice que en gravedad cuántica no existe el "tiempo". La cuantización canónica de la relatividad general preserva la condición de un estado del universo estático, lo cual conduce esencialmente al "problema del tiempo": *la incompatibilidad entre una descripción estática atemporal del universo y la percepción de tiempo que se tiene en la evolución de sistemas, en particular cuánticos.* Sin embargo, han habido intentos de reconciliar esta aparente contradicción, incorporando el tiempo en una teoría completamente cuántica, empezando por el mecanismo de Page y Wootters (PaW)[10, 97] y otras propuestas subsecuentes[11, 98-100]. En el último tiempo esta cuestión ha atraído un creciente interés [12-20, 22, 101-106].

En el presente capítulo se presenta un modelo simple de evolución cuántica discreta basado en correlaciones cuánticas entre el sistema y un sistema cuántico de referencia que hace las veces de reloj. Por un lado, constituye una versión discreta consistente del formalismo de PaW[10, 97, 102], mientras que por otro lado provee una forma práctica de simular evolución cuántica. Mostramos que se puede construir un circuito cuántico para el modelo, que en el caso de Hamiltoniano constante, es capaz de representar la evolución de 2^n pasos de tiempo en términos de solo n qubits de tiempo y n compuertas de control, en un esquema de simulación paralela en el tiempo. Luego, se introduce el concepto de entrelazamiento sistema-tiempo, el cual surge de forma natural en el presente modelo, como una medida de la distinguibilidad de la evolución cuántica, basado en el entrelazamiento entre el sistema y el reloj de referencia. Esta cantidad se anula para estados estacionarios

6 Entrelazamiento Sistema-Tiempo

y es máxima para sistemas que saltan a un nuevo estado ortogonal en cada paso. En el caso de Hamiltoniano constante, es una medida de la distribución sobre los distintos autoestados de energía, satisfaciendo una relación de incerteza energía-tiempo. Se examina, a su vez, la evolución para estados mixtos. Se proveen expresiones analíticas simples para el caso básico en cual el sistema reloj es un qubit que es el bloque elemental en el presente esquema.

Las investigaciones descriptas en este capítulo dieron lugar a las publicación científica [16].

6.1. Formalismo

Consideramos un sistema bipartito S+T, donde S representa un sistema cuántico y Tun reloj cuántico con un espacio de Hilbert finito de dimensión N. Asumiremos primero que el sistema en conjunto está en un estado puro de la forma

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{t=0}^{N-1} |\psi_t\rangle |t\rangle , \qquad (6.1)$$

donde { $|t\rangle$, t = 0, ..., N - 1} es una base ortonormal de T y { $|\psi_t\rangle$, t = 0, ..., N - 1} estados puros arbitrarios de S. Este estado puede describir, por ejemplo, la evolución completa de un estado puro inicial $|\psi_0\rangle$ de S, en un conjunto de tiempos discretos t. El estado $|\psi_t\rangle$ al tiempo t puede recuperarse como el estado condicional de S después de una medida local en T en la base previa, con resultado t:

$$|\psi_t\rangle\langle\psi_t| = \frac{\operatorname{Tr}_T\left[|\Psi\rangle\langle\Psi|\Pi_t\right]}{\langle\Psi|\Pi_t|\Psi\rangle},\tag{6.2}$$

donde $\Pi_t = \mathbb{1} \otimes |t\rangle \langle t|$. En notación abreviada $|\psi_t\rangle \propto \langle t|\Psi\rangle$.

Si los estados del sistema evolucionan de forma unitaria,

$$|\psi_t\rangle = U_t |\psi_0\rangle, \ t = 0, \dots, N-1,$$
 (6.3)

donde U_t son operadores unitarios de S (con $U_0 = 1$), el estado(6.1) puede generarse con el circuito cuántico esquemático de la Fig. 6.1. Comenzando con un estado inicial producto $|\psi_0\rangle|0\rangle$, una compuerta Hadamard [4] en T, lo convierte en la superposición $\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{t=0}^{N-1} |\psi_0\rangle|t\rangle$ y luego una compuerta control $\sum_t U_t \otimes |t\rangle\langle t|$ lo transformará en el estado (6.1). Un ejemplo específico se da en la Fig. 6.2.



Figura 6.1: Circuito esquemático que representa la generación del estado puro sistema-tiempo (6.1). La compuerta control lleva a acabo la operación U_t en S si T está en el estado $|t\rangle$, mientras que la compuerta Hadamard H crea la superposición $\propto \sum_{t=0}^{N-1} |t\rangle$.

Desde una perspectiva formal, el estado (6.1) es un autoestado "estático" del operador de traslación en S + T dado por

$$\mathcal{U} = \sum_{t=1}^{N} U_{t,t-1} \otimes |t\rangle \langle t-1|, \qquad (6.4)$$

donde $U_{t,t-1} = U_t U_{t-1}^{\dagger}$ evoluciona al estado de S de t-1 a $t(|\psi_t\rangle = U_{t,t-1}|\psi_{t-1}\rangle)$ y se impone la condición cíclica $|N\rangle \equiv |0\rangle$, es decir $U_{N,N-1} = U_{N-1}^{\dagger}$.

Luego,

$$\mathcal{U}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle\,,\tag{6.5}$$

mostrando que el estado (6.1) permanece estrictamente invariante ante estas traslaciones globales S + T.

La ecuación (6.5) se cumple para *cualquier* elección del estado inicial $|\psi_0\rangle$ de (6.1). El autovalor 1 de \mathcal{U} tiene entonces una degeneración igual a M, la dimensión del espacio de Hilbert de S, por lo que para M estados iniciales ortogonales $|\psi_0^j\rangle$, $\langle\psi_0^j|\psi_0^l\rangle = \delta_{jl}$, los estados resultantes $|\Psi^l\rangle$ son ortogonales debido a la Ec. (6.3):

$$\langle \Psi^l | \Psi^j \rangle = \frac{1}{N} \sum_{t=0}^{N-1} \langle \psi^l_t | \psi^j_t \rangle = \langle \psi^l_0 | \psi^j_0 \rangle = \delta_{lj} \,. \tag{6.6}$$

Los restantes autoestados de \mathcal{U} son de la forma $|\Psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{t=0}^{N-1} e^{i2\pi kt/N} |\psi_t\rangle |t\rangle$ con k entero y representan la evolución asociada a operadores $U_t^k = e^{i2\pi kt/N} U_t$:

$$\mathcal{U}|\Psi_k\rangle = e^{-i2\pi k/N}|\Psi_k\rangle, \quad k = 0, \dots, N-1.$$
(6.7)

Todos los autovalores $\lambda_k = e^{-i2\pi k/N}$ son *M*-veces degenerados por los mismos argumentos previos. Finalmente, se obtiene un conjunto completo de *N* autovalores, con una

elección de $N \times M$ autovectores ortogonales de \mathcal{U} . Podemos por lo tanto escribir para U_t general,

$$\mathcal{U} = \exp[-i\mathcal{J}], \tag{6.8}$$

con \mathcal{J} hermítico y satisfaciendo $\mathcal{J}|\Psi_k\rangle = 2\pi \frac{k}{N}|\Psi_k\rangle$ para $k = 0, \dots, N-1$. En particular, los estados (6.1) satisfacen la ecuación

$$\mathcal{J}|\Psi\rangle = 0\,,\tag{6.9}$$

la cual representa una versión discreta de la ecuación de Wheeler-DeWitt [21, 102, 107], que determina al estado $|\Psi\rangle$ en teorías de tiempo continuo [102]. En el límite de t continuo, el estado (6.1) con la condición (6.3) es el considerado en [102]. Notar, sin embargo, que aquí \mathcal{J} está definida módulo N, dado que cualquier \mathcal{J} que satisfaga $\mathcal{J}|\Psi_k\rangle = 2\pi n_k |\Psi_k\rangle$ con n_k entero, cumplirá también con la Ec. (7.6).

Todos los $|\Psi_k\rangle$ son también autoestados de los operadores hermíticos $\mathcal{U}_{\pm} = (\mathcal{U} \pm \mathcal{U}^{\dagger})/2i^{\frac{1\pm1}{2}}$, con autovalores cos $\frac{2\pi k}{N}$ y sin $\frac{2\pi k}{N}$ respectivamente, es decir, 1 y 0 para los estados (6.1). Estos pueden también obtenerse, a su vez, como estados fundamentales de $-\mathcal{U}_+$. Un operador hermítico \mathcal{H} similar a $-\mathcal{U}_+$ pero sin condición cíclica fue considerado en [15, 108] para derivar la ecuación de evolución a través de una aproximación variacional.

6.2. Evolución con Operador Constante

Si $U_{t,t-1} = U \forall t$, entonces

$$U_t = (U)^t = \exp[-iHt], \quad t = 0, \dots, N-1,$$
(6.10)

con H un Hamiltoniano constate para el sistema S. En este caso el estado historia (6.1) puede generarse por medio del primer paso del circuito empleado para estimación de fase [4], presentado en la Fig. 6.2. Si $N = 2^n$, dicho circuito, constituido por solo nqubits de tiempo y $m = \log_2 M$ qubits del sistema, requiere solamente n compuertas Hadamard iniciales en los qubits de tiempo, si son inicializados en $|0\rangle$ (de modo que $|0\rangle_T \equiv \bigotimes_{j=1}^n |0_j\rangle \rightarrow \bigotimes_{j=1}^n \frac{|0_j\rangle + |1_j\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{t=0}^{N-1} |t\rangle$ para $t = \sum_{j=1}^n t_j 2^{j-1}$), más n compuertas de control $U^{2^{j-1}}$ actuando en los qubits del sistema, los cuales realizan la operación $U^t |\psi_0\rangle = \prod_{j=1}^n U^{t_j 2^{j-1}} |\psi_0\rangle$. Una medida de los qubits de tiempo con resultado t produce el colapso de S a los estados $|\psi_t\rangle = e^{-iHt} |\psi_0\rangle$.

A su vez, si U en (6.10) satisface la condición cíclica $U^N = \mathbb{1}$, lo cual implica que H debe tener autovalores $2\pi k/N$ con k entero, la Ec. (3.8) se puede reescribir de la siguiente forma

$$\mathcal{U} = U \otimes V = \exp[-i(H \otimes \mathbb{1}_T + \mathbb{1}_S \otimes P)], \qquad (6.11)$$



Figura 6.2: Circuito que representa la generación del estado historia (6.1) para $U_t = U^t$ y $N = 2^n$. Las n compuertas control realizan la operación $U^t = U^{\sum_{j=1}^n t_j 2^{j-1}}$ en el sistema, después de escribir t en la forma binaria $t = \sum_{j=1}^{n-1} t_j 2^{j-1}$, mientras que las n compuertas Hadamard dan lugar a a una suma coherente sobre todos los valores t_j 's, es decir, sobre todo t desde 0 hasta $2^n - 1$.

donde $V = \exp[-iP] = \sum_{t=1}^{N} |t\rangle \langle t-1|$ es el operador de traslación (cíclico) en el tiempo. Sus autoestados son la transformada de Fourier discreta de los estados de tiempo $|t\rangle$,

$$V|\tilde{k}\rangle = e^{-i2\pi k/N}|\tilde{k}\rangle, \quad |\tilde{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{t=0}^{N-1}e^{i2\pi kt/N}|t\rangle, \quad (6.12)$$

para k = 0, ..., N - 1, tal que P es el "momento" asociado al operador temporal T:

$$T|t\rangle = t|t\rangle, \ P|\tilde{k}\rangle = 2\pi \frac{k}{N}|\tilde{k}\rangle.$$
 (6.13)

Luego, $\mathcal{J} = H \otimes \mathbb{1}_T + \mathbb{1}_S \otimes P$ adopta en este caso la misma forma que en teorías continuas [102].

6.3. Entrelazamiento Sistema-Tiempo

Supongamos que uno desea cuantificar consistentemente la evolución distinguible de un estado cuántico puro, la cual está relacionada con el tiempo mínimo τ que transcurre para el sistema. Si el estado es estacionario $|\psi_t\rangle \propto |\psi_0\rangle \forall t$, el cuantificador debe anularse (y $\tau = 0$) mientras que si todos los estados $|\psi_t\rangle$ son ortogonales entre sí, dicho cuantificador debe ser máximo, indicando que el sistema evolucionó a través de N estados distinguibles (y luego $\tau = N$).

6 Entrelazamiento Sistema-Tiempo

En vistas de este análisis, proponemos al entrelazamiento del estado historia (6.1) (entrelazamiento sistema-tiempo) como el cuantificado buscado (y a τ como alguna función creciente de este entrelazamiento). En las Figs. 6.1–6.2, el entrelazamiento sistema-tiempo es simplemente el entrelazamiento entre el sistema y los qubits de tiempo, generado por control U_t .

Notemos que la Ec. (6.1) no es, en general, la descomposición de Schmidt [4] del estado historia $|\Psi\rangle$, que es

$$|\Psi\rangle = \sum_{k} \sqrt{p_k} |k\rangle_S |k\rangle_T , \qquad (6.14)$$

donde $|k\rangle_{S(T)}$ son estados ortogonales de S y $T(_{\mu}\langle k|k'\rangle_{\mu} = \delta_{kk'})$ y p_k los autovalores de los estados reducidos de S y T,

$$\rho_{S(T)} = \operatorname{Tr}_{T(S)} |\Psi\rangle \langle \Psi| = \sum_{k} p_{k} |k\rangle_{S(T)} \langle k| \,.$$
(6.15)

La entropía de entrelazamiento entre S y T es luego

$$E(S,T) = S(\rho_S) = S(\rho_T) = -\sum_k p_k \log_2 p_k,$$
(6.16)

donde $S(\rho) = -\text{Tr}\rho \log_2 \rho$ es la entropía de von Neumann.

La Ec. (6.16) satisface los requerimientos básicos esperados de un cuantificador de evolución. Si el estado de S es estacionario, $|\psi_t\rangle = e^{i\gamma_t}|\psi_0\rangle \forall t$, el estado (6.1) es *separable*,

$$|\Psi\rangle = |\psi_0\rangle (\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_t e^{i\gamma_t} |t\rangle), \qquad (6.17)$$

lo que implica E(S,T) = 0. Por otro lado, si $|\psi_t\rangle$ evoluciona a través de N estados ortogonales, luego $|\Psi\rangle$ es *máximamente entrelazado*, con Ec. (6.1) directamente su descomposición de Schmidt y

$$E(S,T) = E_{\max}(S,T) = \log_2 N$$
. (6.18)

La gran mayoría de las evoluciones estarán comprendidas entre estos dos casos extremos. Por ejemplo, una evolución periódica de período $L < N \operatorname{con} N/L$ entero, tal que $|\psi_{t+L}\rangle = e^{i\gamma} |\psi_t\rangle \forall t$, dará lugar a

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{t=0}^{L-1} |\psi_t\rangle |t_L\rangle, \quad |t_L\rangle = \sqrt{\frac{L}{N}} \sum_{k=0}^{N/L-1} e^{i\gamma k} |t+Lk\rangle, \quad (6.19)$$

con $\langle t'_L | t_L \rangle = \delta_{tt'}$. Por lo tanto, como es de esperarse, su entrelazamiento E(S,T) será el mismo que el obtenido previamente pero con un reloj efectivo de dimensión L. Su valor máximo, obtenido para L estados ortogonales, será entonces $\log_2 L < \log_2 N$. A partir de estos resultados, es natural definir al mínimo tiempo discreto τ necesariamente transcurrido por el sistema como $\tau = 2^{E(S,T)} - 1$.

La descomposición de Schmidt (6.14) representa en este contexto la "verdadera" evolución entre estados ortogonales, con p_k proporcional al "tiempo de permanencia" entre estos. El conjunto de los p_k provee una perspectiva más clara de la evolución que E(S, T). Una medida en la Base de Schmidt de T permite identificar siempre estados ortogonales de S para diferentes resultados (y viceversa), en las cuales las distribuciones de probabilidad de los resultados indican el tiempo de "permanencia" en dichos estados. Si en la Ec. (6.1) hay n_k tiempos t donde $|\psi_t\rangle \propto |k\rangle_S$, con $\sum_k n_k = N$ y $|k\rangle_S$ estados ortogonales, entonces

$$|\Psi\rangle = \sum_{k} \sqrt{\frac{n_k}{N}} |k\rangle_S \left(\frac{1}{\sqrt{n_k}} \sum_{t/|\psi_t\rangle \propto |k\rangle_S} e^{i\gamma_t} |t\rangle\right)$$

es la descomposición de Schmidt (6.14) con $p_k \propto n_k$, i.e. proporcional al tiempo total en los estados $|k\rangle_S$. Notar también, que Ecs. (6.14)–(6.16) son esencialmente simétricas, por lo que los roles de S y T pueden, en principio, ser intercambiados.

Entrelazamiento Cuadrático. Un simple cuantificador para el caso general, puede ser obtenido a través del entrelazamiento determinado por la entropía cuadrática (también denominada lineal, ya que proviene de la linealización del logaritmo $-p \ln p \approx p(1-p)$)

$$S_2(\rho) = 2(1 - \operatorname{Tr} \rho^2)$$

la cual es una función de la pureza Tr ρ^2 y no requiere la determinación de los autovalores de ρ [62, 109, 110] (la pureza, es a su vez, más accesible experimentalmente [111, 112]). Obtenemos, usando $\rho_S = \frac{1}{N} \sum_t |\psi_t\rangle \langle \psi_t |$,

$$E_{2}(S,T) = S_{2}(\rho_{T}) = S_{2}(\rho_{S}) = 2(1 - \operatorname{Tr} \rho_{S}^{2})$$

$$= \frac{2}{N}(N - 1 - \frac{1}{N}\sum_{t \neq t'} |\langle \psi_{t} | \psi_{t'} \rangle|^{2}), \qquad (6.20)$$

la cual es simplemente una función decreciente del promedio de fidelidades entre todos los estados visitados. Si son todos proporcionales, $E_2(S,T) = 0$ mientras que si son todos ortogonales, $E_2(S,T) = 2(N-1)/N$.

6 Entrelazamiento Sistema-Tiempo

El caso constante. Entrelazamiento como una medida de dispersión. Si en el caso (6.10), expandimos $|\psi_0\rangle$ en autoestados de U o de H, $|\psi_0\rangle = \sum_k c_k |k\rangle_S \operatorname{con} H|k\rangle_S = E_k |k\rangle_S$, tal que $|\psi_t\rangle = \sum_k c_k e^{-iE_k t} |k\rangle_S$, entonces

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,t} c_k e^{-iE_k t} |k\rangle_S |t\rangle = \sum_k c_k |k\rangle_S |\tilde{k}\rangle_T , \qquad (6.21)$$

 $\cos |\tilde{k}\rangle_T = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_t e^{-iE_k t} |t\rangle$. Podemos siempre suponer a todas las E_k distintas en (6.21) tal que $c_k |k\rangle_S$ es la proyección de $|\psi_0\rangle$ en el autoespacio con energía E_k . En el caso cíclico $U^N = \mathbb{1}$ con $E_k = 2\pi k/N$ y los estados $|\tilde{k}\rangle_T$ son simplemente los estados ortogonales de la DFT (6.12). La Ec. (6.21) es entonces la *descomposición de Schmidt* (6.14), con $p_k = |c_k|^2$ y

$$E(S,T) = -\sum_{k} |c_k|^2 \log_2 |c_k|^2. \quad (E_k = 2\pi k/N)$$
(6.22)

Para este espectro, el entrelazamiento se vuelve entonces una medida de la distribución del estado inicial $|\psi_0\rangle$ sobre autoestados de H con distinta energía. Lo cual, continua valiendo en el caso cuadrático (6.20) donde $E_2(E,T) = 2\sum_k |c_k|^2(1-|c_k|^2)$. Si $|\psi_0\rangle$ es un estado estacionario ($c_k = \delta_{kl}$) no hay dispersión y el entrelazamiento se anula, mientras que si $|\psi_0\rangle$ está uniformemente distribuido entre los N autoestados ($|c_k| = 1/\sqrt{N}$), es máximo. Si $U^N \neq 1$, este resultado vale aproximadamente si los overlaps $_T\langle \tilde{k}|\tilde{k'}\rangle_T = \frac{1}{N}\sum_t e^{-i(E_k - E_{k'})t}$ son pequeños para $k \neq k'$. Finalmente, en el caso general tenemos la cota estricta

$$E(S,T) \le -\sum_{k} |c_k|^2 \log_2 |c_k|^2$$
 (6.23)

dado que el conjunto de los coeficientes de Schmidt p_k será *mayorizado* [113] por el conjunto de los $|c_k|^2$:

$$\{p_k\} \prec \{|c_k|^2\} \tag{6.24}$$

donde $\{p_k\}$ y $\{|c_k|\}$ denotan los correspondientes conjuntos ordenados de forma decreciente y (6.24) equivale a $\sum_{k=1}^{j} p_k \leq \sum_{k=1}^{j} |c_k|^2 \forall j$). La Ec. (6.24) asegura que *cualquier* entropía, es decir cualquier función Schur-cóncava de las probabilidades, cumplirá con la misma desigualdad. En particular,

$$E_f(S,T) = \sum_k f(p_k) \le \sum_k f(|c_k|^2)$$
(6.25)

para cualquier función cóncava f que cumpla f(0) = f(1) = 0. Esto incluye los casos previos de von Neumann y la entropía cuadrática (f(p) = 2p(1-p)). La demostración de (6.25) sale simplemente de la relación $|c_k|^2 = \sum_{k'} W_{kk'}^2 p_{k'}$, donde W es la matriz unitaria que relaciona los autoestados de ρ_T con los estados $|\hat{k}\rangle_T$, dado que $\sum_k f(|c_k|^2) \ge \sum_{k,k'} |W_{kk'}|^2 f(p'_k) = \sum_{k'} f(p'_k).$

Las ecuaciones (6.23)–(6.25) indican que la entropía asociada a la dispersión de energía provee una cota superior al entrelazamiento sistema-tiempo, independientemente de la medida entrópica utilizada para cuantificarlo. Esto implica que un Hamiltoniano Hcon espectro equiespaciado $2\pi k/N \in [0, 2\pi]$ proporciona, por lo tanto, el mayor entrelazamiento sistema-tiempo para una dada distribución de energía $\{|c_k|^2\}$. El correspondiente tiempo mínimo transcurrido τ en esta situación está estrictamente determinado por la distribución de energía. En el caso general, el tiempo mínimo τ transcurrido por el sistema S, determinado por el entrelazamiento E(S, T), es menor que el determinado por la entropía de la distribución de energía, es decir, $\tau \leq \tau_{\Delta_E}$.

6.3.1. Relaciones de Incerteza Energía-Tiempo

En el caso constante, asumiendo $U^N = \mathbb{1}$ y $E_k = 2\pi k/N \operatorname{con} k = 0, \ldots, N-1$, podemos expandir $|\psi_0\rangle$ en una base ortogonal de estados uniformemente distribuidos en energía,

$$|\psi_0\rangle = \sum_{l=0}^N \tilde{c}_l |\tilde{l}\rangle_S , \quad |\tilde{l}\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i2\pi kl/N} |k\rangle_S , \qquad (6.26)$$

con $\tilde{c}_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i2\pi k/N} c_k$ la *DFT* de los c_k '. Dado que $U^t |\tilde{l}\rangle_S = |\tilde{l} - t\rangle_S$, se verifica que estos estados máximamente distribuidos evolucionan a través de N estados ortogonales $|\tilde{l}\rangle$, es decir, su estado historia posee entrelazamiento E(S, T) máximo. La Ec. (6.21) puede escribirse como

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l,t} \tilde{c}_l |\tilde{l-t}\rangle_S |t\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l |\tilde{l}\rangle_S (\sum_t \tilde{c}_t |t-l\rangle) \,. \tag{6.27}$$

Mostrando que \tilde{c}_l determina la distribución de estados de tiempo $|t\rangle$ asignados a cada estado $|\tilde{l}\rangle_S$, es decir, caracteriza la incerteza temporal. Al estar los coeficientes c_k y \tilde{c}_l relacionados por una transformada de Fourier discreta finita, satisfacen varias relaciones de incerteza, como por ejemplo [114-116]

$$E(S,T) + \tilde{E}(S,T) \ge \log_2 N, \qquad (6.28)$$

donde $\tilde{E}(S,T) = -\sum_{l} |\tilde{c}_{l}|^{2} \log_{2} |\tilde{c}_{l}|^{2}$ es la entropía que caracteriza la incerteza temporal y E(S,T) la incerteza en energía (6.22). Si está localizado en energía $(|c_{k}| = \delta_{kk'}, E(S,T) = 0)$, la Ec. (6.28) implica máxima incerteza temporal $(|\tilde{c}_{l}| = \frac{1}{\sqrt{N}}, \tilde{E}(S,T) = \log_{2} N)$ y viceversa. A su vez, tenemos $n(\{c_{k}\}) n(\{\tilde{c}_{l}\}) \geq N$ [117], donde $n(\{\alpha_{k}\})$ denota el número de coeficientes α_{k} no nulos. Cotas para el producto de varianzas en *DFT* son discutidos en [118].

6.3.2. Estados Mixtos

Consideremos ahora el caso en el cual el sistema S es un estado bipartito A + B. Tomando traza parcial de (6.1),

$$\rho_{BT} = \operatorname{Tr}_{A} |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{j} {}_{A}\langle j|\Psi\rangle\langle\Psi|j\rangle_{A}, \qquad (6.29)$$

vemos que el estado de historia para un subsistema es en general un *estado mixto*. Por supuesto, el estado de *B* al tiempo *t*, eligiendo $\Pi_t = I_B \otimes |t\rangle \langle t|$, está dado por la expresión estándar

$$\rho_{Bt} = \frac{\operatorname{Tr}_T \rho_{BT} \Pi_t}{\operatorname{Tr} \rho_{BT} \Pi_t} = \operatorname{Tr}_A |\psi_t\rangle \langle \psi_t| \,. \tag{6.30}$$

Si el estado inicial de S es $|\psi_0\rangle = \sum_j \sqrt{q_j} |j\rangle_A |j\rangle_B$ (descomposición de Schmidt), las Ecs. (6.29)–(6.30) determinan la evolución de un estado inicial mixto $\rho_{B0} = \sum_j q_j |j\rangle_B \langle j|$ de B, considerado como un subsistema de un estado purificado que evoluciona de forma unitaria. Por ejemplo, si tomamos el caso en el que solamente el subsistema B evoluciona, en el cual $U_t = I_A \otimes U_{Bt} \forall t$, La Ec. (6.29) conduce a

$$\rho_{BT} = \sum_{j} q_{j} |\Psi_{j}\rangle_{BT} \langle \Psi_{j} |, \qquad (6.31)$$

donde $|\Psi_j\rangle_{BT} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{t=0}^{n-1} U_{Bt} |j\rangle_B |t\rangle$ es el estado sistema-tiempo para el estado inicial $|j\rangle_B$. La Ec. (6.30) implica entonces la evolución unitaria $\rho_{Bt} = U_{Bt}\rho_{B0}U_{Bt}^{\dagger}$.

Dado que el estado (6.29) es en general un estado mixto, las correlaciones entre T y un subsistema B pueden ser más complejas que aquellas con todo el sistema completo S. El estado (6.29) puede en principio presentar distintos tipos de correlaciones, incluyendo entrelazamiento [119, 120], correlaciones tipo discordia cuántica [121-125] y correlaciones tipo clásicas. La evaluación exacta de estas correlaciones cuánticas es a su vez más difícil, siendo en general un problema *hard* [126, 127]. Aquí consideraremos simplemente el entrelazamiento de formación [120] E(B,T) del estado (6.29), el cual, de ser no nulo indica que (6.29) no puede escribirse como una combinación convexa de estados productos [119] $\rho_B^{(\alpha)} \otimes \rho_T^{(\alpha)}$. En este contexto, un estado producto representa esencialmente estados *estacionarios*. Ser separable del tiempo estaría indicando que ρ_{BT} puede escribirse como combinación convexa de estos estados, pudiéndose generar sin la necesidad de una interacción cuántica con el sistema reloj.

6.3.3. UN QUBIT COMO RELOJ

A modo ilustrativo, examinaremos el caso básico en el cual el sistema reloj tiene dimensión N = 2, es decir, un reloj *qubit*. El estado historia es simplemente

$$|\Psi\rangle = (|\psi_0\rangle|0\rangle + |\psi_1\rangle|1\rangle)/\sqrt{2}$$
(6.32)

con $|\psi_1\rangle = U|\psi_0\rangle$. Su descomposición de Schmidt es $\sqrt{p_+}| + + \rangle + \sqrt{p_-}| - - \rangle$, con $|\pm\rangle_S = (|\psi_0\rangle \pm e^{-i\gamma}|\psi_1\rangle)/\sqrt{2p_\pm}$, $|\pm\rangle_T = (|0\rangle \pm e^{i\gamma}|1\rangle)/\sqrt{2}$, donde $e^{i\gamma} = \langle\psi_0|\psi_1\rangle/|\langle\psi_0|\psi_1\rangle|$ y

$$p_{\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm |\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle|) . \tag{6.33}$$

Luego, $E(S,T) = -\sum_{\nu=\pm} p_{\nu} \log p_{\nu}$ está completamente determinado por la *fidelidad* $|\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle|$ entre los estados inicial y final de S, siendo una función decreciente de esta. A partir de la Ec. (6.20) se puede observar que la entropía $E_2(S,T)$, la cual en este caso representa el cuadrado de la concurrencia [62, 109, 128, 129], es simplemente

$$E_2(S,T) = 1 - |\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle|^2 .$$
(6.34)

Este resultado es válido para un sistema S de dimensión arbitraria M. El operador (6.4) se reduce en este caso a $\mathcal{U} = U \otimes |1\rangle \langle 0| + U^{\dagger} \otimes |0\rangle \langle 1|$ y es directamente hermítico, con autovalores $e^{i2k\pi/2} = \pm 1$ para k = 0 o 1, M veces degenerado. Si $\mathcal{U} = \exp[-i\mathcal{J}]$, el operador \mathcal{J} involucrará acoplamientos entre S y T a menos que $U^{\dagger} \propto U$.

Consideremos ahora el caso en el que S = A + B, con B también un *qubit* y $U = I_A \otimes U_B$. Si $|\psi_0\rangle = \sqrt{p}|0\rangle_A |0\rangle_B + \sqrt{q}|1\rangle_A |1\rangle_B$, con $|0\rangle_\mu$, $|1\rangle_\mu$ estados ortogonales y $p, q \ge 0, p + q = 1$, tenemos $\rho_{B0} = p|0\rangle_B \langle 0| + q|1\rangle_B \langle 1|$. La Ec. (6.31), es decir, el estado de historia para el subsistema BT, es el estado no puro

$$\rho_{BT} = p |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0| + q |\Psi_1\rangle \langle \Psi_1|, \qquad (6.35)$$

donde $|\Psi_j\rangle = (|j\rangle_B|0\rangle + U_B|j\rangle_B|1\rangle)/\sqrt{2}$ es el estado de historia asociado al estado inicial $|j\rangle_B$.

Dado que (6.35) es un estado de dos *qubits*, su entrelazamiento de formación es simplemente una función creciente de la concurrencia [128, 129], la cual puede evaluarse analíticamente. En este caso adopta la expresión simple

$$C(\rho_{BT}) = |p - q||\langle 1|U_B|0\rangle|, \qquad (6.36)$$

donde $|\langle 1|U_B|0\rangle| = |\langle 0|U_B|1\rangle| = \sqrt{1 - |\langle 0|U_B|0\rangle|^2}$ es el *overlap* entre el estado evolucionado de *B* y el estado inicial ortogonal. La Ec. (6.36) es el resultado obtenido para el caso puro ($q = 0, C(\rho_{BT}) = |\langle 1|U_B|0\rangle|$) disminuido en un factor |p - q|, anulándose si ρ_{0B} es máximamente mezclado.

6 Entrelazamiento Sistema-Tiempo

El entrelazamiento de formación cuadrático $E_2(B, T)$ es el cuadrado de la concurrencia (6.36) y tiene entonces la expresión

$$E_2(B,T) = C^2(\rho_{BT}) = (p-q)^2 |\langle 1|U_B|0\rangle|^2$$

= $1 - F^2(\rho_{B0}, U_B \rho_{B0} U_B^{\dagger}),$ (6.37)

donde $F(\rho_{B0}, U_B \rho_{B0} U_B^{\dagger}) = \text{Tr} \sqrt{\rho_{B0}^{1/2} U_B \rho_{B0} U_B^{\dagger} \rho_{B0}^{1/2}}$ es justamente la *fidelidad* entre los estados reducidos inicial, $\rho_{B0} = p|0\rangle\langle 0 + q|1\rangle\langle 1|$ y final, $\rho_{B1} = U_B \rho_{B0} U_B^{\dagger}$, de *B*. La Ec. (6.37) generaliza así la expresión (6.34) (a la cual se reduce si el estado inicial ρ_{B0} es puro). Muestra que para un reloj qubit y una evolución unitaria, el entrelazamiento sistema tiempo está completamente determinado por la fidelidad entre el estado final e inicial del sistema, tanto si este es puro o mezcla. Notar a su vez que $E_2(S,T) = 1 - |p\langle 0|U_B|0\rangle + q\langle 1|U_B|1\rangle|^2 \geq E_2(B,T)$, en acuerdo con desigualdades de monogamia [109, 130], coincidiendo si y solo si pq = 0 (caso puro).

6.3.4. El Límite Continuo

Consideremos ahora que el sistema S es un *qubit*, siendo T de dimensión N (t = 0, ..., N-1). Este caso, a su vez, representa la evolución entre un estado inicial $|\psi_0\rangle$ y un estado final $|\psi_f\rangle$ en un sistema S de dimensión arbitraria si todos los estados intermedios $|\psi_t\rangle$ pertenecen al subespacio generado por $|\psi_0\rangle$ y $|\psi_f\rangle$, de forma tal que la evolución completa este contenida en un subespacio de dos dimensiones. Si escribimos a los estados del sistema como

$$|\psi_t\rangle = \alpha_t |0\rangle + \beta_t |1\rangle, \quad t = 0, \dots, N - 1, \tag{6.38}$$

con $\langle 0|1 \rangle = 0$ y $|\alpha_t|^2 + |\beta_t|^2 = 1$, podemos reescribir al estado (6.1) como

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} [|0\rangle (\sum_{t} \alpha_{t} |t\rangle) + |1\rangle (\sum_{t} \beta_{t} |t\rangle)] = \alpha |0\rangle |\phi_{0}\rangle + \beta |1\rangle |\phi_{1}\rangle, \qquad (6.39)$$

donde $|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N\alpha}} \sum_t \alpha_t |t\rangle$, $|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N\beta}} \sum_t \beta_t |t\rangle$, son estados normalizados, pero no son necesariamente ortogonales, de T y todas las sumas sobre t son desde 0 hasta N-1, con

$$\alpha^{2} = \frac{1}{N} \sum_{t} |\alpha_{t}|^{2}, \quad \beta^{2} = \frac{1}{N} \sum_{t} |\beta_{t}|^{2} = 1 - \alpha^{2}.$$
(6.40)

Los coeficientes de Schmidt del estado (6.39) están dados por

$$p_{\pm} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4\alpha^2 \beta^2 (1 - |\langle \phi_1 | \phi_0 \rangle|^2)} \right).$$
 (6.41)

98
De esta forma, se obtiene

$$E_{2}(S,T) = 4p_{+}p_{-} = 4\alpha^{2}\beta^{2}(1 - |\langle \phi_{1} | \phi_{0} \rangle|^{2})$$

= $4(\alpha^{2}\beta^{2} - \gamma^{2}), \ \gamma = \frac{1}{N} |\sum_{t} \beta_{t}^{*} \alpha_{t}|,$ (6.42)

resultado que surge también directamente a partir de la Ec. (6.20).

Consideremos, por ejemplo, los estados

$$|\psi_t\rangle = \cos(\frac{\phi t}{N-1})|0\rangle + \sin(\frac{\phi t}{N-1})|1\rangle, \qquad (6.43)$$

tal que S evoluciona des
de $|\psi_0\rangle = |0\rangle$ hasta

$$|\psi_f\rangle = \cos\phi|0\rangle + \sin\phi|1\rangle,$$

en N-1 pasos a través de estados intermedios equiespaciados contenidos dentro del mismo plano de la esfera de Bloch de S. El entrelazamiento S-T de esta evolución con N tiempos puede evaluarse directamente con las Ecs. (6.40)–(6.43), las cuales conducen a

$$E_2(S, T_N) = 1 - \frac{\sin^2\left(\frac{N\phi}{N-1}\right)}{N^2 \sin^2\left(\frac{\phi}{N-1}\right)}.$$
 (6.44)

Para el caso de un solo paso (N = 2), se recupera de (6.44) la Ec. (6.34) ($E_2(S, T_2) = 1 - \cos^2 \phi = 1 - |\langle \psi_0 | \psi_f \rangle|^2$).

Si $\phi \in [0, \pi/2]$, $E_2(S, T_N)$ es una función *decreciente* de N (y una función creciente de ϕ), pero rápidamente satura, alcanzando *un límite finito para* $N \to \infty$, es decir,

$$E_2(S, T_\infty) = 1 - \frac{\sin^2 \phi}{\phi^2}.$$
 (6.45)

Por consiguiente, el entrelazamiento sistema-tiempo decrece a medida que aumenta el número de pasos a través de estados intermedios entre $|\psi_0\rangle$ y $|\psi_f\rangle$, reflejando una disminución en la distinguibilidad entre los dichos estados, pero continua siendo *finito* para $N \to \infty$. Aún en este límite, sigue siendo una función creciente de ϕ para $\phi \in [0, \pi/2]$, alcanzando el valor máximo $1 - 4/\pi^2 \approx 0.59$ cuando $\phi = \pi/2$, es decir, cuando el sistema evoluciona a un estado $|\psi_f\rangle = |1\rangle$ ortogonal a $|\psi_0\rangle = |0\rangle$. Por otro lado, se anula como $\approx \phi^2/3$ para $\phi \to 0$. Por lo tanto, comparando con la evolución en un solo paso ($N = 2, E_2(S, T) = 1 - |\langle \psi_f | \psi_0 \rangle|^2 = \sin^2 \phi$), el cociente $E_2(S, T_\infty)/E_2(S, T_2)$ aumenta desde 1/3 para $\phi \to 0$ hasta ≈ 0.59 para $\phi \to \pi/2$.

Si ϕ aumenta por encima de $\pi/2$, los coeficientes α_t , β_t dejan de ser todos positivos y el entrelazamiento puede aumentar por encima del valor ≈ 0.59 debido a la disminución en

6 Entrelazamiento Sistema-Tiempo

el overlap γ , reflejando una mayor distinguibilidad promedio entre los estados evolucionados. De hecho, el entrelazamiento $E_2(S, T_{\infty})$ alcanza el valor 1 en $\phi = \pi$ (y también $k\pi, k \ge 1$ entero), es decir, cuando el estado final es proporcional al estado inicial luego de haber cubierto el circulo completo en la esfera de Bloch, dado que para estos valores los estados de tiempo $|\phi_0\rangle$ y $|\phi_1\rangle$ en (6.39) se vuelven ortogonales y con pesos iguales. Es a su vez notable que para $\phi > \pi/2$, $E_2(S, T_N)$ no es necesariamente una función decreciente de N, ni una función creciente de ϕ , exhibiendo oscilaciones: $E_2(S, T_N) = 1$ para $\phi = k\pi(N-1)/N$, $k \neq lN$, y $E_2(S, T_N) \rightarrow 0$ para $\phi \rightarrow l\pi(N-1)$, con l entero.

7 Estados Historia de Sistemas y Operadores

"Le temps est invention, ou il n'est rien du tout."

Henri Bergson

En este capítulo profundizaremos el estudio del estado historia (6.1) que se introdujo en el capítulo anterior, analizando distintas propiedades y representaciones. En particular, mostraremos que para un estado inicial fijo existe siempre una base especial de tiempo para la cual la evolución resultante corresponde a un Hamiltoniano constante y el estado historia satisface una versión discreta de una ecuación tipo Wheeler-DeWitt [21]. A su vez, demostraremos que el entrelazamiento del estado historia es siempre *máximo*, independientemente del estado inicial, cuando los operadores evolución forman una base ortogonal, pudiendo ser incluso generado de forma simple por medio de un esquema de dos relojes, donde los relojes están vinculados a sistemas de variables conjugadas.

Luego, analizaremos la entropía de entrelazamiento cuadrática de los estados historia, mostrando que se puede evaluar analíticamente para Hamiltonianos constantes y que está acotada superiormente por la entropía de la dispersión de energía del estado inicial. Por otro lado, demostraremos también que se encuentra acotada inferiormente por la entropía de entrelazamiento de la evolución geodésica que conecta estados inicial y final.

Finalmente demostraremos que su promedio sobre todo estado inicial del sistema es directamente proporcional a la entropía de entrelazamiento cuadrática del operador [131-134] unitario que genera el estado historia. Asimismo, mostraremos que el estado puro que representa a este último operador es en sí un estado historia de operador, cuyo entrelazamiento cuadrático determina su *entangling power*. Y por medio de medidas en el reloj es posible utilizar los estados historia de sistema y de operador para determinar de forma eficiente el *overlap* entre estados del sistema y también la traza del operador evolución para dos tiempos cualesquiera. En el caso simple en el que el reloj es un *qubit*, esto se reduce a la traza del operador unitario de evolución, recuperándose el resultado del circuito *DQC1* (Deterministic Quantum Computation With 1 Quantum Bit [25]).

Las investigaciones descriptas en este capítulo dieron lugar a las publicación científica [22].

7.1. Estados Historia Discretos

En esta sección analizaremos el formalismo del capítulo precedente con mayor profundidad. Consideramos nuevamente un sistema bipartito S + T descripto por un estado puro $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_T$, con \mathcal{H}_T de dimensión N finita. Cualquier estado normalizado $|\Psi\rangle$ se puede escribir en la forma de estado historia:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{t} |S_t\rangle |t\rangle, \qquad (7.1)$$

donde $|t\rangle$, t = 0, ..., N - 1, son estados ortogonales de $T(\langle t | t' \rangle = \delta_{tt'})$ y $|S_t\rangle$ son estados de S (los estados del sistema en (6.1) eran $|\psi_t\rangle$, en adelante se utiliza la notación $|S_t\rangle$ para los mismos), en principio no necesariamente ortogonales ni normalizados. No obstante, deben cumplir $\sum_t \langle S_t | S_t \rangle / N = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$.

Consideremos nuevamente al operador unitario $\mathcal{U} = \sum_t U_{t,t-1} \otimes |t\rangle \langle t-1|$, Ec. (6.4), que traslada en el sistema completo S + T. Si $|\Psi\rangle$ satisface la ecuación de autovalores

$$\mathcal{U}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle\,,\tag{7.2}$$

los estados $|S_t\rangle$ evolucionarán de forma necesariamente unitaria con t:

$$|S_t\rangle = \sqrt{N}\langle t|\Psi\rangle = \sqrt{N}\langle t|\mathcal{U}|\Psi\rangle$$

= $U_{t,t-1}|S_{t-1}\rangle = U_t|S_0\rangle,$ (7.3)

donde $U_t = U_{t,t-1} \dots U_{1,0}$, con $U_0 = 1$. Por lo tanto, los estados $|S_t\rangle$ tendrán todos norma uno si $|\Psi\rangle$ está normalizado. Es decir, la evolución unitaria de los estados $|S_t\rangle$ emerge naturalmente al imponer la condición de que $|\Psi\rangle$ sea un estado invariante frente a \mathcal{U} . El estado (7.1) constituye así una versión discreta de dimensión finita del estado historia continuo del formalismo propuesto por Page y Wootters [10, 12]. Además, escribiendo $\mathcal{U} = \exp[-i\mathcal{J}]$, con \mathcal{J} hermítico, la Ec. (7.2) es equivalente a

$$\mathcal{J}|\Psi\rangle = 0 \quad (mod\,2\pi)\,,\tag{7.4}$$

la cual representa una versión discreta cíclica generalizada de una ecuación estática de Wheeler-DeWitt [21]. Notemos, sin embargo, que en general \mathcal{J} involucrará términos de interacción S - T si $U_{t,t-1}$ depende de t.

Una evolución unitaria de los estados $|S_t\rangle$ se obtiene también si $|\Psi\rangle$ es *cualquier* autoestado de \mathcal{U} , es decir, si $\mathcal{U}|\Psi\rangle$ es proporcional $|\Psi\rangle$: los autovalores de \mathcal{U} son $e^{-i2\pi k/N}$, $k = 0, \ldots, N - 1$, y sus autoestados $|\Psi_k\rangle$ tales que $\mathcal{U}|\Psi_k\rangle = e^{-i2\pi k/N}|\Psi_k\rangle$ tienen entonces la forma (7.1) con $|S_t\rangle$ satisfaciendo una evolución unitaria trasladada: $|S_t\rangle =$ $e^{i2\pi k/N}U_{t,t-1}|S_{t-1}\rangle = e^{i2\pi kt/N}U_t|S_0\rangle$. Como hemos visto, cada autovalor tiene igual degeneración que la dimensión del espacio del sistema, $d_S = \dim \mathcal{H}_S$, con su autoespacio generado por estados historia ortogonales $|\Psi_k^l\rangle$ asociados a d_S estados iniciales ortogonales $|S_0^l\rangle$: $\langle \Psi_k^l | \Psi_{k'}^{l'} \rangle = \delta_{kk'} \langle S_0^l | S_0^{l'} \rangle = \delta_{kk'} \delta^{ll'}$.

Si $U_{t,t-1}$ es independiente de $t \forall t = 1, ..., N$, podemos escribir

$$U_{t,t-1} = \exp[-iH_S], (7.5)$$

con H_S un Hamiltoniano hermítico fijo del sistema S con autovalores $2\pi k/N$, k entero. El operador (7.2) se vuelve entonces separable: $\mathcal{U} = \exp[-iH_S] \otimes \exp[-iP_T]$, implicando

$$\mathcal{J} = H_S \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes P_T \,, \tag{7.6}$$

donde P_T es el generador de traslaciones en el tiempo, cumpliendo $e^{-iP_T}|t-1\rangle = |t\rangle \forall t y P_T|k\rangle_T = \frac{2\pi k}{N}|k\rangle_T$, con $|k\rangle_T$ la *DFT* de los estados $|t\rangle$:

$$|k\rangle_T = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_t e^{i2\pi kt/N} |t\rangle, \quad k = 0, \dots, N-1.$$
 (7.7)

La Ec. (7.4) con \mathcal{J} dado por (7.6) constituye así una versión discreta cíclica de la ecuación estándar de Wheeler-DeWitt [12]. La ecuación resultante $\langle t|\mathcal{J}|\Psi\rangle = 0 \pmod{2\pi}$, conduce a

$$-\langle t|P_T|\Psi\rangle = H_S|S_t\rangle \pmod{2\pi}, \qquad (7.8)$$

que es una versión discreta cíclica de la ecuación de Schrödinger: dado que

$$-\langle t|P_T|t'\rangle = i\frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{N}\sum_k e^{i2\pi k(t-t')/N},\tag{7.9}$$

para $N \to \infty$ obtenemos $-\langle t|P_T|t' \rangle \to i\delta'(t-t') \operatorname{y} - \langle t|P_T|\Psi \rangle \to i\frac{\partial}{\partial t}|S_t\rangle$.

7.1.1. Representaciones de Estados Historia

Considerando una base ortogonal arbitraria $\{|q\rangle\}$ de \mathcal{H}_S , se puede reescribir $|\Psi\rangle$ como

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q,t} \psi(q,t) |qt\rangle, \qquad (7.10)$$

donde $|qt\rangle = |q\rangle|t\rangle$ y $\psi(q,t) = \langle q|S_t\rangle = \sqrt{N}\langle qt|\Psi\rangle$ es una "función de onda", que cumple una evolución unitaria con $t: \psi(q,t) = \sum_{q'} \langle q|U_{t,t-1}|q'\rangle\psi(q',t-1)$.

Luego, podemos obtener la descomposición de Schmidt de $|\Psi\rangle$, que en este capítulo la escribiremos como

$$|\Psi\rangle = \sum_{k} \lambda_k \, |k\rangle_S \, |-k\rangle_T \,, \tag{7.11}$$

7 Estados Historia de Sistemas y Operadores

donde $\lambda_k > 0$ son los valores singulares de la matriz $\psi(q, t)/\sqrt{N} \text{ y } |k\rangle_{S(T)}$ estados ortonormales de S(T) derivados a partir de la descomposición en valores singulares de $\psi(q, t)$, con $|-k\rangle \equiv |N-k\rangle$. Estos estados son los autoestados de los estados reducidos $\rho_{S(T)} =$ $\text{Tr}_{T(S)} |\Psi\rangle\langle\Psi|$, con λ_k^2 sus autovalores. Mientras que los estados $|S_t\rangle \propto \langle t|\Psi\rangle$ no son necesariamente ortogonales pero son equiprobables, los estados $|k\rangle_S \propto T\langle -k|\Psi\rangle$ son todos ortogonales pero no necesariamente equiprobables, con λ_k^2 representando una probabilidad de "permanencia".

En el caso constante (7.5)–(7.6), los estados de Schmidt $|k\rangle_S$ y $|k\rangle_T$ son simplemente los autoestados de H_S y P_T :

$$H_S|k\rangle_S = \frac{2\pi k}{N}|k\rangle_S, \quad P_T|k\rangle_T = \frac{2\pi k}{N}|k\rangle_T, \quad (7.12)$$

dado que $|S_t\rangle = e^{-iH_S t}|S_0\rangle = \sum_k \lambda_k e^{-i2\pi kt/N}|k\rangle_S$, con $\lambda_k = {}_S\langle k|S_0\rangle$, y por lo tanto

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,t} \lambda_k e^{-i2\pi kt/N} |k\rangle_S |t\rangle = \sum_k \lambda_k |k\rangle_S |-k\rangle_T , \qquad (7.13)$$

con $|k\rangle_T$ los estados estrictamente ortogonales (7.7). Los coeficientes de Schmidt λ_k representan en este caso la distribución de $|S_0\rangle$ sobre distintos autoestados de energía (en caso de degeneración, $\lambda_k |k\rangle_S$ denota la proyección de $|S_0\rangle$ sobre el autoestado de energía $2\pi k/N \pmod{2\pi}$, con λ_k^2 la probabilidad total de medir esta energía en $|S_0\rangle$). Se puede entonces apreciar claramente, a partir de la Ec. (7.6) para \mathcal{J} y la forma (7.11) de la representación de Schmidt, que $|\Psi\rangle$ satisface la ecuación de Wheeler-DeWitt (7.4), la cual se convierte así en una condición de *momento total cero:* $k_S + k_T = 0 \pmod{N}$.

Mostraremos ahora que en el caso general de operadores unitarios arbitrarios $U_{t,t-1}$ en (7.2), para cualquier estado inicial $|S_0\rangle$ dado, existe una base ortogonal de \mathcal{H}_T (base especial de tiempo) para la cual los correspondientes estados de *S evolucionan de acuerdo a un Hamiltoniano constante* H_S . Simplemente es necesario usar la *DFT* inversa de los estados de Schmidt $|k\rangle_T$ de (7.11),

$$|\tau\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k} e^{-i2\pi k\tau/N} |k\rangle_T , \qquad (7.14)$$

con $k, \tau = 0, ..., N - 1$ (si el rango de Schmidt es menor a N, los estados $|k\rangle_T$ de (7.11) se pueden completar con estados ortogonales), que no coincidirán en general con los estados originales $|t\rangle$. Luego, el estado (7.11) puede reescribirse como

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\tau,k} \lambda_k \, e^{-i2\pi k\tau/N} |k\rangle_S |\tau\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\tau} |S_{\tau}\rangle |\tau\rangle \,, \tag{7.15}$$

donde

$$|S_{\tau}\rangle = \sum_{k} e^{-i2\pi k\tau/N} \lambda_{k} |k\rangle \tag{7.16}$$

tiene una evolución unitaria determinada por un Hamiltoniano constante H_S definido sobre los estados de Schmidt $|k\rangle_S$ por la Ec. (7.12):

$$|S_{\tau}\rangle = \sqrt{N} \langle \tau |\Psi\rangle = \exp[-i\tau H_S] |S_{\tau=0}\rangle, \qquad (7.17)$$

con $|S_{\tau=0}\rangle = \sum_k \lambda_k |k\rangle_s$, en la Fig. 7.1 se presenta un esquema del circuito que genera el estado historia 7.15. Los coeficientes de Schmidt λ_k pueden entonces interpretarse como la distribución de $|S_{\tau=0}\rangle$ sobre estos autoestados de energía. En términos de los operadores H_s y P_T definidos por la Ec. (7.12), $|\Psi\rangle$ satisface la Ec. (7.4) también para un operador \mathcal{J} efectivo de la forma (7.6).

Si ahora asumimos $d_S = N$ (la descomposición de Schmidt selecciona en cualquier caso subespacios de igual dimensión en S y en T) podemos considerar la DFT inversa de los estados de Schmidt $|k\rangle_S$, $|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i2\pi k\xi/N} |k\rangle_S$, que satisfacen $e^{-iH_S} |\xi\rangle =$ $|\xi + 1\rangle$. Estos estados pueden entonces considerarse como estados de coordenada especiales del sistema, en el sentido que si $|S_{\tau=0}\rangle = |\xi\rangle$, entonces $|S_{\tau}\rangle = |\xi + \tau\rangle$ exhibe una correlación perfecta con los estados $|\tau\rangle$ del reloj. Luego, se puede reescribir a $|\Psi\rangle$ también como

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\xi,\tau} \Lambda_{\xi-\tau} |\xi\tau\rangle = \sum_{\xi} \Lambda_{\xi} |\Psi_{\xi}\rangle, \qquad (7.18)$$

donde $\sqrt{N}\langle\xi\tau|\Psi
angle=\Lambda_{\xi- au}$ depende solo de la diferencia $\xi- au$, y

$$\Lambda_{\xi} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k} e^{i2\pi k\xi/N} \lambda_k , \qquad (7.19)$$

es la *DFT* de los coeficientes de Schmidt λ_k , con $|\Psi_{\xi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\tau} |\xi + \tau\rangle |\tau\rangle$ estados historia ortogonales máximamente entrelazados: $\langle \Psi_{\xi} | \Psi_{\xi'} \rangle = \delta_{\xi\xi'}$ (aquí $|\xi + \tau\rangle \equiv |\xi + \tau - N\rangle$ si $\xi + \tau \geq N$).

La representación (7.18) es entonces la "conjugada" de la representación (7.11), expresando $|\Psi\rangle$ como una superposición de estados historia máximamente entrelazados. Al igual que (7.11), es *simétrica* en S - T: Estados $|S_{\tau}\rangle = \sqrt{N}\langle \tau |\Psi\rangle = \sum_{\xi} \Lambda_{\xi-\tau} |\xi\rangle$ evolucionan de forma unitaria con τ (Ec. (7.17)) mientras que estados $|T_{\xi}\rangle = \sqrt{N}\langle \xi |\Psi\rangle = \sum_{\tau} \Lambda_{\xi-\tau} |\tau\rangle$ evolucionan de forma unitaria con ξ :

$$|T_{\xi}\rangle = \sqrt{N}\langle\xi|\Psi\rangle = \exp[-i\xi P_T]|T_{\xi=0}\rangle, \qquad (7.20)$$

7 Estados Historia de Sistemas y Operadores

con $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\xi} |\xi\rangle |T_{\xi}\rangle$, donde $|T_{\xi=0}\rangle = \sum_{k} \lambda_{k} |-k\rangle_{T}$, complementando las Ec. (7.17) y (7.15).

Como se mencionó en el capítulo precedente, a partir de la descomposición de Schmidt (7.11) se puede evaluar la entropía de entrelazamiento sistema-tiempo como

$$E(S,T) = S(\rho_S) = S(\rho_T) = -\sum_k \lambda_k^2 \log_2 \lambda_k^2.$$
 (7.21)

Recordemos que para $U_{t,t-1}$ constante (Ec. (7.5)), E(S,T) es simplemente una medida de la *distribución de energía* (mod 2π) del estado inicial, dado que $\lambda_k = {}_{S}\langle k|S_0\rangle$. Para $U_{t,t-1}$ no constante, la representación (7.15) permite ahora una interpretación similar de (7.21) en el caso general, en términos del Hamiltoniano H_S efectivo definido por (7.12).

Por otro lado, la entropía determinada por la distribución conjugada $|\Lambda_{\xi}|^2$,

$$\tilde{E}(S,T) = -\sum_{\xi} |\Lambda_{\xi}|^2 \log_2 |\Lambda_{\xi}|^2,$$
(7.22)

mide la distribución de $|\Psi\rangle$ sobre evoluciones máximamente entrelazadas, o de forma equivalente, la distribución de los estados especiales del sistema $|\xi\rangle$ para un dado estado $|\tau\rangle$ del reloj (o viceversa), y es una medida de la *incerteza temporal*. Se anula cuando $|\Psi\rangle$ es máximamente entrelazado ($\Lambda_{\xi} = \delta_{\xi,0}$ si $\lambda_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \forall k$), en cuyo caso hay una sincronización completa entre los estados $|\xi\rangle$ del sistema y $|\tau\rangle$ del reloj ($|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\xi,\tau} \delta_{\xi,\tau} |\xi\rangle |\tau\rangle$), y es máxima para un estado estacionario ($\Lambda_{\xi} = \frac{1}{\sqrt{N}} \forall \xi$ si $\lambda_k = \delta_{k,0}$), en cuyo caso los estados $|\xi\rangle$ y $|\tau\rangle$ del sistema y reloj están completamente descorrelacionados como se ve a partir de (7.18) ($|\Psi\rangle = \frac{1}{N} |\xi\tau\rangle$). Estas dos entropías satisfacen la relación de incerteza entrópica [16] (ver también [20, 114-116])

$$E(S,T) + \tilde{E}(S,T) \ge \log_2 N, \qquad (7.23)$$

que se satura en los límites anteriormente descriptos. Esta ecuación extiende la validez de la expresión (6.28), desarrollada en el capítulo previo para el caso de $U_{t,t-1}$ constante, al caso general.



Figura 7.1: Circuito esquemático que representa la generación del *estado historia* (7.15) escrito en la base de tiempo especial $|\tau\rangle$, donde el sistema evoluciona de acuerdo a un Hamiltoniano *constante* H_S .

7.1.2. Base Completa de Operadores Evolución

Si bien para un Hamiltoniano constante el entrelazamiento sistema-tiempo (7.21) depende claramente del estado inicial $|S_0\rangle$, esta dependencia se verá atenuada cuando los operadores $U_{t,t-1}$ dependen de t y no conmutan entre sí: Si estos no tienen ningún autovalor común, el estado de historia $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_t U_t |S_0\rangle |t\rangle$ estará entrelazado para cualquier $|S_0\rangle$. El caso extremo es aquel en que los operadores unitarios U_t de (7.3) forman una *base completa ortogonal* de operadores de S, tal que $N=d_S^2$ y

$$\operatorname{Tr}\left[U_t^{\dagger}U_{t'}\right] = d_S \delta_{tt'}, \quad t, t' = 0, \dots, d_S^2 - 1, \tag{7.24}$$

con $d_S = \dim \mathcal{H}_S$. En este caso el estado historia (7.1) es máximamente entrelazado para *cualquier* estado inicial $|S_0\rangle$:

$$E(S,T) = \log_2 d_S \,, \tag{7.25}$$

tal que $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_S}} \sum_k |k\rangle_S| - k\rangle_T \forall |S_0\rangle$. Demostración: Se puede ver a la Ec. (7.24) como el producto escalar entre vectores columna $\frac{1}{\sqrt{d_S}} U_t$ de una $d_S^2 \times d_S^2$ matriz unitaria \mathcal{U} de elementos $\mathcal{U}_{ij,t} = \frac{1}{\sqrt{d_S}} \langle i | U_t | j \rangle$, con $\{ | i \rangle \}$ cualquier base ortonormal de S, tal que (7.24) es equivalente a $\mathcal{U}^{\dagger}\mathcal{U} = \mathbb{1}_{d_{S}^{2}}$. Luego, esta matriz satisface también $\mathcal{UU}^{\dagger} = \mathbb{1}_{d_{s}^{2}}$, es decir, $\sum_{t} \langle i | U_{t} | j \rangle \langle l | U_{t}^{\dagger} | k \rangle = d_{S} \delta_{ik} \delta_{jl}$, lo que implica $\sum_{t} U_t |j\rangle \langle l|U_t^{\dagger} = d_S \delta_{jl} \mathbb{1}_S$ y luego

$$\sum_{t} U_t |S_0\rangle \langle S_0' | U_t^{\dagger} = d_S \langle S_0' | S_0 \rangle \mathbb{1}_S$$
(7.26)

para dos estados cualesquiera $|S_0\rangle$, $|S'_0\rangle$ de S. Luego, el conjunto $\{U_t/\sqrt{d_S}\}$ forma un canal despolarizante (*depolarizing channel*) completo en S: Para $|S_0\rangle = |S'_0\rangle$, la Ec. (7.26) conduce a un estado reducido *máximamente mezclado* $ho_S = \text{Tr}_T |\Psi\rangle\langle\Psi|$ para *cualquier* estado "semilla" $|S_0\rangle$:

$$\rho_S = \frac{1}{d_S^2} \sum_t U_t |S_0\rangle \langle S_0 | U_t^{\dagger} = \frac{1}{d_S} \mathbb{1}_S \,. \tag{7.27}$$

La Ec. (7.27) conduce a la Ec. (7.25).

Por lo tanto, una base ortogonal completa de U_t asegura que el sistema visitará d_S estados ortogonales independientemente del estado inicial $|S_0\rangle$. La descomposición de Schmidt (7.11) seleccionará entonces un subespacio de \mathcal{H}_T de dimensión d_S conectado a S a través de $|\Psi\rangle$. Al ser d_S veces degenerado $\lambda_k = \frac{1}{\sqrt{d_S}} \forall k$, cualquier base ortogonal $\{|k\rangle_T\}$ de este subespacio se puede utilizar en (7.11), con todos los estados $|k
angle_S=\sqrt{d_S}_T\langle -k|\Psi
angle$ directamente ortogonales.

Una elección conveniente de base ortogonal es provista por los operadores de Weyl [135-137]

$$U_t \equiv U_{pq} = \exp[i2\pi pQ/d_S] \exp[-i2\pi qP/d_S],$$
 (7.28)

donde $p, q = 0, \ldots, d_S - 1, t = qd_S + p, Q|q\rangle = q|q\rangle, P|p\rangle = p|p\rangle y \{|q\rangle\}, \{|p\rangle\}$ son bases ortogonales de *S* relacionadas a través de una *DFT*: $|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_S}} \sum_q e^{i2\pi pq/d_S} |q\rangle$. Estos satisfacen, para cualquier autoestado $|q_0\rangle$ de *Q*,

$$U_{pq}|q_0\rangle = e^{i2\pi p(q_0+q)/d_S}|q_0+q\rangle$$
(7.29)

lo que implica la Ec. (7.24), es decir, Tr $U_{p'q'}^{\dagger}U_{pq} = d_S \delta_{q'q} \delta_{p'p}$.



Figura 7.2: Circuito esquemático que representa la generación de un estado historia máximamente entrelazado $|\Psi\rangle$, independientemente del estado inicial $|S_0\rangle$. El sistema T está formado por dos relojes con espacios de Hilbert de dimensión $2^n = d_S$, que controlan la evolución del sistema S por medio de operadores control sobre variables conjugadas.

Es notable que la evolución discreta bajo estos operadores se puede obtener por medio de la aplicación de tan solo *dos* unitarias diferentes $U_{t,t-1}$ al estado precedente (aquí $m \ge 1$, entero):

$$U_{t,t-1} = \begin{cases} e^{i2\pi Q/d_S} & t \neq md_S \\ e^{-i2\pi P/d_S} e^{i2\pi Q/d_S} & t = md_S \end{cases}$$
(7.30)

Por ejemplo, si S es un qubit ($d_S = 2$) se pueden tomar $Q = (1 - \sigma_z)/2$, $P = (1 - \sigma_x)/2$, con $e^{i2\pi Q/d_S} = \sigma_z$, $e^{-i2\pi P/d_S} = \sigma_x$. Luego,

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2}[|S_0\rangle|0\rangle + \sigma_z|S_0\rangle|1\rangle + \sigma_x|S_0\rangle|2\rangle + i\sigma_y|S_0\rangle|3\rangle]$$

es máximamente entrelazado $\forall |S_0\rangle (E(S,T) = 1), \operatorname{con} |S_1\rangle = \sigma_z |S_0\rangle, |S_2\rangle = -i\sigma_y |S_1\rangle = \sigma_x |S_0\rangle y |S_3\rangle = \sigma_z |S_2\rangle = i\sigma_y |S_0\rangle.$

En el caso general, es natural considerar al sistema T como si estuviera formado por dos relojes con espacios de Hilbert de dimensión d_S , los cuales gobiernan Hamiltonianos *independientes del tiempo* $H_1 = -2\pi Q/d_S$ y $H_2 = 2\pi P/d_S$ en S, y escribir al estado historia (7.1) para estos operadores (7.28) como

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{d_S^2} \sum_{p,q} U_{pq} |S_0\rangle |p\rangle_{T_1} |q\rangle_{T_2},$$
 (7.31)

lo cual se puede ver como la representación de un estado historia donde cada estado es a su vez un estado historia. Por lo tanto, este esquema se puede implementar a través del circuito que se muestra en la Fig. 7.2.

7.1.3. Entrelazamiento Sistema-Tiempo: Expresión Analítica

Obtener una expresión analítica para la entropía (7.21) requiere, en el caso general, la determinación de los valores singulares λ_k , es decir, los autovalores λ_k^2 de ρ_S o ρ_T , lo cual es difícil para estados generales en espacios de dimensión grande. Por lo que es conveniente utilizar la entropía cuadrática utilizada en el capítulo precedente,

$$S_2(\rho) = 2(1 - \operatorname{Tr} \rho^2),$$
 (7.32)

la cual no requiere conocimiento explícito de los autovalores λ_k y es simplemente una función lineal decreciente de la pureza Tr ρ^2 . Recordemos que al igual que la entropía de von Neumann, se anula si y solo si el operador densidad ρ es puro ($\rho^2 = \rho$) y es máxima si y solo si ρ es máximamente mezclado (con $S_2(\rho) = 1$ para un estado máximamente mezclado de un qubit). Satisface también la relación de mayorización $S_2(\rho') \ge S_2(\rho)$ si $\rho' \prec \rho$ [113, 138]. La entropía de entrelazamiento S - T asociada es (Ec. (6.20))

$$E_2(S,T) = S_2(\rho_S) = S_2(\rho_T) = 2(1 - \sum_k \lambda_k^4)$$
(7.33)

$$= 2(1 - \frac{1}{N^2} \sum_{t,t'} |\langle S_t | S_{t'} \rangle|^2), \qquad (7.34)$$

y puede determinarse simplemente a partir de los *overlaps* entre los estados evolucionados. Se anula para estados estacionarios y alcanza su máximo $2(1 - \frac{1}{N})$ cuando todos los estados $|S_t\rangle$ son ortogonales. Cuando los operadores evolución forman una base completa ortogonal (Ec. (7.24)), se verifica que $\sum_{t,t'} |\langle S_t | S_{t'} \rangle|^2 = d_S^3$, de modo que $E_2(S,T) = 2(1 - \frac{1}{d_S})$, que es el valor para una ρ_S máximamente mezclada.

Los overlaps $\langle S_t | S_{t'} \rangle$, $t \neq t'$ son también experimentalmente accesibles a través de una medida en el reloj T de los operadores no diagonales $|t'\rangle\langle t|$:

$$\frac{1}{N}\langle S_{t'}|S_t\rangle = \langle \Psi|\mathbb{1}_S \otimes |t'\rangle\langle t||\Psi\rangle = \langle \sigma_{t't}^x\rangle + i\langle \sigma_{t't}^y\rangle, \ (t \neq t')$$
(7.35)

7 Estados Historia de Sistemas y Operadores

donde $\sigma_{t't}^x = |t'\rangle\langle t| + |t\rangle\langle t'|, \sigma_{t't}^y = (|t'\rangle\langle t| - |t\rangle\langle t'|)/i$ son operadores de Pauli hermíticos para el par $t \neq t'$. Luego, la Ec. (7.34) se puede determinar experimentalmente. Pueden también utilizarse otros métodos para medir la pureza directamente [111, 112].

Consideremos ahora el caso de la evolución para un Hamiltoniano general *constante* H de espectro *arbitrario* para el sistema S, tal que $U_t = e^{-iHt} \forall t$. A diferencia de (7.21), la Ec. (7.34) puede en este caso evaluarse explícitamente. Escribiendo

$$|S_0\rangle = \sum_k c_k |E_k\rangle, \quad H|E_k\rangle = E_k |E_k\rangle, \quad (7.36)$$

se tiene $|S_t\rangle = \sum_k e^{-iE_k t} c_k |E_k\rangle$. Considerando tiempos equiespaciados $t = t_f \frac{j}{N-1}$, $j = 0, \ldots, N-1$, la Ec. (7.34) se convierte en

$$E_2(S,T) = 2\left(1 - \frac{1}{N^2} \sum_{t,t'} |\sum_k |c_k|^2 e^{-iE_k(t-t')}|^2\right)$$
(7.37)

$$= 2\sum_{k\neq k'} |c_k c_{k'}|^2 \left[1 - \frac{\sin^2 \frac{(E_k - E_{k'})t_f N}{2(N-1)}}{N^2 \sin^2 \frac{(E_k - E_{k'})t_f}{2(N-1)}} \right].$$
 (7.38)

La Ec. (7.38) es esencialmente una medida de la dispersión en energía $|c_k|^2 = |\langle E_k | S_0 \rangle|^2$ de $|S_0\rangle$ sobre autoestados $|E_k\rangle$ con distinta energía (como el término entre corchetes en (7.38) se anula para $E_k - E_{k'} \rightarrow 0 \mod 2\pi \frac{N-1}{t_f}$, depende solo de la suma $c_k^2 = \sum_l |c_{kl}|^2$, con *l* denotando la degeneración ($\mod 2\pi \frac{N-1}{t_f}$)).

A su vez, se puede obtener el resultado exacto para una evolución continua a partir de (7.38), tomando el límite $N \rightarrow \infty$:

$$E_2(S,T) = 2\sum_{k \neq k'} |c_k c_{k'}|^2 \left[1 - \frac{\sin^2\left(\frac{(E_k - E_{k'})t_f}{2}\right)}{\left(\frac{(E_k - E_{k'})t_f}{2}\right)^2} \right].$$
 (7.39)

Para N finito, la Ec. (7.39) vale de forma aproximada siempre y cuando $\frac{|E_k - E_{k'}|t_f}{N-1} \ll 1$ $\forall k \neq k'$ con peso no nulo $|c_k c_{k'}| > 0$. Notemos también que permanece finita en este límite en el caso general.

Para t_f pequeño tal que $|E_k - E_{k'}|t_f \ll 1 \forall k, k'$, una expansión a segundo orden en Δt muestra que (7.38)–(7.39) son proporcionales a la *fluctuación de energía* en $|S_0\rangle$: $|\langle S_t|S_{t'}\rangle|^2 \approx 1 - \langle (\Delta H)^2 \rangle (t - t')^2$, con $\Delta H = H - \langle H \rangle$ y $\langle O \rangle = \langle S_0|O|S_0 \rangle$, implicando

$$E_2(S,T) \approx \frac{N+1}{3(N-1)} \langle (\Delta H)^2 \rangle t_f^2 \xrightarrow[N \to \infty]{} \frac{1}{3} \langle (\Delta H)^2 \rangle t_f^2.$$
(7.40)

Por lo tanto, $E_2(S,T)$ resulta proporcional al cuadrado de la velocidad $\sqrt{\langle (\Delta H)^2 \rangle}$ de la evolución cuántica continua de acuerdo a la métrica de *Fubini-Study* [139, 140].

7.1.4. Entrelazamiento Sistema-Tiempo: Cota Superior e Inferior

A partir de la Ec. (7.38), se ve que $E_2(S, T)$ está acotada superiormente por la entropía cuadrática de la distribución en energía $|c_k|^2$:

$$E_2(S,T) \le 2\sum_{k \ne k'} |c_k c_{k'}|^2 = 2(1 - \sum_k |c_k|^4), \qquad (7.41)$$

lo que corrobora el resultado general previo (6.25). Para una distribución dada $\{|c_k|^2\}$, el valor máximo (7.41) se obtiene para un espectro equiespaciado de la forma

$$E_k = \frac{N-1}{t_f} \frac{2\pi k}{N} + C, \qquad (7.42)$$

con k entero $\in [0, N - 1]$, dado que en este caso el término entre corchetes en (7.38) toma su máximo valor $1 \forall k \neq k'$.

El espectro (7.42) es simplemente la Ec. (7.12) para el Hamiltoniano escalizado $H_S = \frac{t_f}{N-1}(H-C)$ (para el cual t = 0, ..., N-1), tal que los estados de energía $|E_k\rangle$ pasan a ser los estados de Schmidt $|k\rangle_S$ de (7.11) y $|c_k|$ los coeficientes de Schmidt λ_k . Para otros espectros, los estados $|\tilde{k}\rangle_T = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_t e^{-iE_kt}|t\rangle$ en

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,t} c_k e^{-iE_k t} |E_k\rangle |t\rangle = \sum_k c_k |E_k\rangle |\tilde{k}\rangle_T , \qquad (7.43)$$

no son necesariamente todos ortogonales, de modo que E(S,T) será generalmente menor (Ec. (6.25)). Sin embargo, para N grande y t_f no muy pequeño, los estados $|\tilde{k}\rangle_T$ serán típicamente aproximadamente ortogonales, por lo que la desviación respecto de la cota superior (7.41) no será muy notable, siendo significativa solo en la presencia de quasidegeneraciones en el espectro: el término entre corchetes en la expresión (7.39) ($N \to \infty$) se anula solo para $E_k \to E_{k'}$, siendo cercano a 1 para $|E_k - E_{k'}|t_f/2 > \pi$, mientras que el de (7.38) (N finito), que es una función periódica de $E_k - E_{k'}$ con período $\Delta_N = 2\pi \frac{N-1}{t_f}$, se anula para $E_k \to E_{k'} + m\Delta_N$, m = 0 o entero, siendo cercano a 1 siempre que $|E_k - E_{k'} - m\Delta_N|t_f/2 > \pi$.

Por otro lado, la Ec. (7.39) también admite una *cota inferior* para estados iniciales y finales fijos $|S_0\rangle$ y $|S_{t_f}\rangle = \sum_k c_k e^{-iE_k t_f} |E_k\rangle$, la cual se alcanza cuando la evolución

(sobre N tiempos equiespaciados $t = t_f \frac{j}{N-1}$ bajo un H constante) permanece en el subespacio generado por $|S_0\rangle y |S_{t_f}\rangle$:

$$E_2(S,T) \ge E_2^{\min}(S,T) = 1 - \frac{\sin^2 \frac{N\phi}{N-1}}{N^2 \sin^2 \frac{\phi}{N-1}},$$
 (7.44)

donde $\phi \in [0, \pi/2]$ está determinado por el *overlap* entre los estados inicial y final:

$$\cos \phi = |\langle S_0 | S_{t_f} \rangle| = |\sum_k |c_k|^2 e^{-iE_k t_f}|.$$
(7.45)

Escribiendo el estado final como

$$|S_{t_f}\rangle = e^{-i\gamma}(\cos\phi|S_0\rangle + \sin\phi|S_0^{\perp}\rangle), \qquad (7.46)$$

donde $\langle S_0^{\perp} | S_0 \rangle = 0$, $E_2^{\min}(S, T)$ es el resultado de la Ec. (7.38) para una evolución basada em un Hamiltoniano de dos niveles

$$H^{\min} = \frac{\phi}{t_f} \sigma_y + \frac{\gamma}{t_f} , \quad \sigma_y = -i(|S_0\rangle \langle S_0^{\perp}| - |S_0^{\perp}\rangle \langle S_0|) , \quad (7.47)$$

de forma que

$$|S_t^{\min}\rangle \equiv \exp[-iH^{\min}t]|S_0\rangle$$

= $e^{-i\gamma t/t_f}(\cos\frac{\phi t}{t_f}|S_0\rangle + \sin\frac{\phi t}{t_f}|S_0^{\perp}\rangle),$ (7.48)

 $\operatorname{con}|S_{t_f}^{\min}\rangle = |S_{t_f}\rangle.$

La demostración de (7.44) se encuentra en el apéndice, pero el resultado es físicamente claro: El entrelazamiento S-T es una medida de la distiguibilidad entre estados evolucionados, y el valor mínimo es entonces obtenido para una evolución dentro del subespacio que contiene a los estados inicial y final, donde todos los estados intermedios serán más próximos que en una evolución general. Esta evolución, descripta por la Ec. (7.48), procede precisamente a lo largo de la trayectoria geodésica determinada por la métrica de *Fubini-Study* [139, 140], como se puede apreciar en la figura 7.3, saturando la cota para tiempo mínimo provista por *Mandelstam-Tamm* [141, 142] $\Delta t \Delta E \ge \cos^{-1}(|\langle S_0|S_{t_f}\rangle|) = \phi$ $(\Delta t = t_f, \Delta E = \sqrt{\langle (\Delta H^{\min})^2 \rangle} = \phi/t_f).$

Como comprobación, para t_f pequeño de modo que $|E_k - E_{k'}| t_f \ll 1 \forall k \neq k'$, una expansión a cuarto orden de (7.38) y (7.44) conduce a

$$E_2(S,T) - E_2^{\min}(S,T) \approx \kappa [\langle (\Delta H)^4 \rangle - \langle (\Delta H)^2 \rangle^2] t_f^4 \ge 0, \qquad (7.49)$$



Figura 7.3: Representación en la esfera de Bloch efectiva de la trayectoria geodésica que conecta dos estados iniciales y finales arbitrarios.

donde $\kappa = \frac{(N+1)(N-2)(N-4/3)}{60(N-1)^3} > 0 \forall N > 2$. Luego, se verifica que la diferencia (7.49) es no negativa y de cuarto orden en t_f , siendo proporcional a la fluctuación de $(\Delta H)^2$. La última se anula para la evolución geodésica, donde $\Delta H = \Delta H^{\min} = \frac{\phi}{t_f} \sigma_y$ y por lo tanto $\langle (\Delta H^{\min})^4 \rangle = \langle (\Delta H^{\min})^2 \rangle^2 = \phi^4 / t_f^4$, implicando $E_2(S,T) = E_2^{\min}(S,T)$. Tal fluctuación representa un coeficiente de curvatura que mide la desviación respecto de la trayectoria geodésica [140, 143].

Para $\phi \in [0, \pi/2]$, la cota (7.44) es, claramente, una función creciente de ϕ para $N \ge 2$, es decir, de la distancia de Wootters (ver 2.37) [144]

$$s(|S_0\rangle, |S_{t_f}\rangle) = 2 \arccos(|\langle S_0 | S_{t_f}\rangle|) = 2\phi$$

y por lo tanto una función decreciente del *overlap* $|\langle S_{t_f}|S_0\rangle|$. Es también una función *decreciente* de $N \geq 2$ para $\phi \in (0, \pi/2]$. El valor mínimo es entonces obtenido en el límite continuo $N \to \infty$, donde $E_2^{\min}(S,T) \to 1 - (\sin^2 \phi)/\phi^2$. Luego, podemos escribir para cualquier $N \geq 2$,

$$E_2(S,T) \ge 1 - \frac{\sin^2 \phi}{\phi^2}$$
. (7.50)

7.2. Entrelazamiento de Operadores y Representación de Estado Puro

Con el fin de aplicar el formalismo previo a los propios operadores de evolución, en esta sección describiremos brevemente el concepto de entrelazamiento de operador [131-134] y la representación de los mismos por medio de estados puros.

Cualquier operador \mathcal{W} para un sistema bipartito A+B se puede expandir como

$$\mathcal{W} = \sum_{i,j} M_{ij} C_i \otimes D_j, \tag{7.51}$$

donde C_i y D_j son operadores ortogonales para A y B respectivamente, los cuales satisfacen

$$\operatorname{Tr} C_i^{\dagger} C_j = \delta_{ij} d_A, \quad \operatorname{Tr} D_i^{\dagger} D_j = \delta_{ij} d_B.$$
(7.52)

Por lo tanto, $M_{ij} = \frac{1}{d_A d_B} \text{Tr} [C_i^{\dagger} \otimes D_j^{\dagger} \mathcal{W}]$. Podemos utilizar, por ejemplo, los operadores de Weyl (7.28) para las bases $\{C_i\}, \{D_i\}$.

Las Ecs. (7.52) implican Tr $[\mathcal{W}^{\dagger}\mathcal{W}] = d_A d_B$ Tr $[M^{\dagger}M]$. Si \mathcal{W} es unitario, entonces Tr $[M^{\dagger}M] = 1$, lo cual implica que los números $\{|M_{ij}|^2\}$ son en este caso, *probabilidades estándar*. Por medio de la descomposición en valores singulares, podemos escribir la matriz M de $d_A^2 \times d_B^2$ como $M = UDV^{\dagger}$, donde U y V son matrices unitarias y D es una matriz diagonal con entradas no negativas $\lambda_k^{\mathcal{W}}$, los cuales satisfacen $\sum_k (\lambda_k^{\mathcal{W}})^2 = \text{Tr } M^{\dagger}M = 1$. Podemos, por ende, reescribir \mathcal{W} en la forma de Schmidt

$$\mathcal{W} = \sum_{k} \lambda_{k}^{\mathcal{W}} A_{k} \otimes B_{k} , \qquad (7.53)$$

donde $A_k \equiv \sum_i U_{ik}C_i$ y $B_k \equiv \sum_j V_{jk}^*D_j$, son nuevamente bases de operadores ortogonales para A y B y satisfacen Tr $A_k^{\dagger}A_l = d_A\delta_{kl}$, Tr $B_k^{\dagger}B_l = d_B\delta_{kl}$. La entropía de entrelazamiento de von Neumann de \mathcal{W} se puede entonces definir como

$$E(\mathcal{W}) = -\sum_{k} (\lambda_k^{\mathcal{W}})^2 \log_2(\lambda_k^{\mathcal{W}})^2.$$
(7.54)

De forma similar, $E_2(\mathcal{W}) = 2 \sum_k (1 - (\lambda_k^{\mathcal{W}})^4)$. Estas entropías se anulan cuando \mathcal{W} es un producto de operadores unitarios locales, y son máximas cuando \mathcal{W} es una suma uniforme de d^2 productos $A_k \otimes B_k$, con $d = \text{Min}[d_A, d_B]$.

La analogía previa entre operadores y estados puede describirse de forma clara y elegante a través del isomorfismo de Choi [23, 24, 145-147]. Cualquier operador O en un sistema con un espacio de Hilbert \mathcal{H} de dimensión d puede asociarse con un estado puro $|O\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$, dado por

$$|O\rangle = (O \otimes \mathbb{1})|\mathbb{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{q} (O|q\rangle)|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{q,q'} \langle q'|O|q\rangle |q'\rangle |q\rangle, \quad (7.55)$$

donde $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{q} |q\rangle |q\rangle$ es un estado máximamente entrelazado en $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} y \{|q\rangle\}$ una base ortonormal. De esta forma,

$$\langle O|O'\rangle = \frac{1}{d} \operatorname{Tr}\left[O^{\dagger}O'\right].$$
 (7.56)

Por consiguiente, los operadores ortogonales que satisfacen Tr $[O_i^{\dagger}O_j] = d\delta_{ij}$, corresponden a estados ortonormales $\langle O_i | O_j \rangle = \delta_{ij}$. Y los operadores unitarios U a estados normalizados $|U\rangle$.

El operador (7.51) puede entonces asociarse con el estado puro (notar que $|\mathbb{1}_{AB}\rangle = |\mathbb{1}_A\rangle|\mathbb{1}_B\rangle$)

$$|\mathcal{W}\rangle = (\mathcal{W} \otimes \mathbb{1}_{A'B'})|\mathbb{1}_A\rangle|\mathbb{1}_B\rangle = \sum_{ij} M_{ij}|C_i\rangle|D_j\rangle, \qquad (7.57)$$

donde $|C_i\rangle = (C_i \otimes \mathbb{1}_{A'})|\mathbb{1}_A\rangle$, $|D_j\rangle = (D_j \otimes \mathbb{1}_{B'})|\mathbb{1}_B\rangle$ forman bases ortogonales: $\langle C_k | C_i \rangle = \delta_{ki}$, $\langle D_k | D_j \rangle = \delta_{kj}$. Luego, $M_{ij} = \langle C_i, D_j | \mathcal{W} \rangle$, con $\langle \mathcal{W} | \mathcal{W} \rangle =$ Tr $[M^{\dagger}M]$.

La representación del estado en la forma de Schmidt (7.53) adquiere la apariencia estándar

$$|\mathcal{W}\rangle = \sum_{k} \lambda_{k}^{\mathcal{W}} |A_{k}\rangle |B_{k}\rangle , \qquad (7.58)$$

con $\langle A_k | A_l \rangle = \delta_{kl} = \langle B_k | B_l \rangle$, y la entropía de entrelazamiento (7.54) de un operador unitario W puede también expresarse como

$$E(\mathcal{W}) = S(\rho_A^{\mathcal{W}}) = S(\rho_B^{\mathcal{W}}), \quad \rho_{A(B)}^{\mathcal{W}} = \operatorname{Tr}_{B(A)} |\mathcal{W}\rangle \langle \mathcal{W}|, \quad (7.59)$$

con $S(\rho) = -\text{Tr}\rho \log_2 \rho$. De igual forma, $E_2(\mathcal{W}) = S_2(\rho_A^{\mathcal{W}}) = S_2(\rho_B^{\mathcal{W}})$, con $S_2(\rho) = 2(1 - \text{Tr} \rho^2)$.

7.3. Operadores Generadores y Estados Historia de Operadores

El estado historia (7.1) puede ser generado a partir de un estado inicial producto $|S_0\rangle|0\rangle$ como

$$|\Psi\rangle = \mathcal{W}(I \otimes H^{\otimes n})|S_0\rangle|0\rangle, \qquad (7.60)$$

donde $H^{\otimes n}$ denota el operador Hadarmard actuando sobre los n qubits del reloj $(H^{\otimes n}|0) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{t=0}^{N-1} |t\rangle$, con $N = 2^n$) y

$$\mathcal{W} = \sum_{t} U_t \otimes |t\rangle \langle t|, \qquad (7.61)$$

el operador control- U_t . Expandiendo U_t en una base ortogonal de operadores C_i , obtenemos

$$\mathcal{W} = \sum_{t,i} M_{ti} C_i \otimes |t\rangle \langle t|, \quad M_{ti} = \frac{1}{d_S} \operatorname{Tr} C_i^{\dagger} U_t \,, \tag{7.62}$$

donde los coeficientes M_{tj} satisfacen $\sum_j |M_{tj}|^2 = \frac{1}{d_S} \text{Tr } U_t^{\dagger} U_t = 1$, y son, por lo tanto, probabilidades estándar a tiempo t fijo. Dado que los proyectores $|t\rangle\langle t|$ son también ortogonales y tienen traza uno, los coeficientes de Schmidt $\lambda_k^{\mathcal{W}}$ de (7.53) son simplemente los valores singulares de la matriz M/\sqrt{N} . La entropía de entrelazamiento resultante (7.54) es la misma que la de $\mathcal{W}(I \otimes H^{\otimes n})$, dado que difieren solo en una unitaria local.

El estado puro (7.57) asociado con el operador (7.61) es él mismo un *estado historia de operador*:

$$|\mathcal{W}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{t} |U_t\rangle |T_t\rangle,$$
 (7.63)

donde $|U_t\rangle = (U_t \otimes \mathbb{1}_{S'})|\mathbb{1}_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_S}} \sum_q U_t |q\rangle |q\rangle \text{ y } |T_t\rangle = (T_t \otimes \mathbb{1}_{T'})|\mathbb{1}_T\rangle = |tt\rangle$, con $T_t = \sqrt{N}|t\rangle \langle t| \text{ y } \langle T_t | T_{t'}\rangle = \delta_{tt'}$. Escribiendo $|tt\rangle$ simplemente como $|t\rangle$, la Ec. (7.63) es el estado historia estándar (7.1) para un estado máximamente entrelazado inicial $|\mathbb{1}_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_s}} \sum_q |q\rangle |q\rangle$ de un sistema bipartito bajo una evolución local $U_t \otimes \mathbb{1}_{S'}$, de forma tal que puede ser generado por el circuito de la Fig. 7.4.



Figura 7.4: Circuito esquemático en el que se representa la generación del estado historia de operador (7.63).

El entrelazamiento del estado historia (7.63) es el entrelazamiento de operador (7.54) de W, el cual es una medida de la distinguibilidad de los estados de operador $|U_t\rangle$. Su

entrelazamiento cuadrático puede evaluarse directamente con la Ec. (7.34), donde ahora $\langle U_t | U_{t'} \rangle = \frac{1}{d_S} \text{Tr} [U_t^{\dagger} U_{t'}]$:

$$E_2(\mathcal{W}) = 2(1 - \frac{1}{N^2} \sum_{t,t'} |\langle U_t | U_{t'} \rangle|^2).$$
(7.64)

Podemos apreciar de forma inmediata que si $N = d_S^2$ y 0 los operadores $\{U_t\}$ forman una base completa ortogonal (Ec. (7.24)), el estado historia del operador (7.63) es máximamente entrelazado:

$$E(\mathcal{W}) = \log_2 d_S^2 = 2\log_2 d_S \,, \tag{7.65}$$

con $E_2(\mathcal{W}) = 2(1 - \frac{1}{d_S^2})$, dado que todos los estados $|U_t\rangle$ pasan a ser ortogonales: $\langle U_t | U_{t'} \rangle = \delta_{tt'}$. La forma (7.63) es entonces ya la descomposición de Schmidt de $|\mathcal{W}\rangle$.

Dado que en este caso el estado historia original (7.1) tiene entrelazamiento máximo $E(S,T) = \log_2 d_S$ para cualquier estado inicial $|S_0\rangle$, este resultado indica una relación cercana entre el poder entrelazante (*entangling power*) de W y su entrelazamiento de operador, la cual será determinada a continuación. Podemos a su vez notar que si los d_S^2 operadores U_t no son todos ortogonales, entonces $E(\mathcal{U}) < 2\log_2 d_S$.

Para un número menor de tiempos $N < d_S^2$, $E(\mathcal{W})$ será máxima si todos los N estados $|U_t\rangle$ son ortogonales. En el caso de un Hamiltoniano *constante*, con energías E_k , tal que $U_t = e^{-iHt} \forall t$, entonces

$$\langle U_t | U_{t'} \rangle = \frac{1}{d_S} \sum_k e^{-iE_k(t-t')}.$$
 (7.66)

Para $N = d_S$, un espectro equiespaciado $E_k = 2\pi k/N + C$, k = 0, ..., N - 1, (Ec. (7.42) si $t = \frac{t_f}{N-1}j$) asegura que todos los $|U_t\rangle$ son estrictamente ortogonales: $\langle U_t|U_{t'}\rangle = \delta_{tt'} \forall t, t'$ (los operadores U_t resultantes son de hecho los primeros d_S operadores de la base de operadores de Weyl (7.28)). Por lo tanto, E(W) alcanzará el máximo valor para este espectro:

$$E(\mathcal{W}) = \log_2 d_S \,, \tag{7.67}$$

compatible con un H fijo y $N = d_S$ tiempos. Lo cual, a su vez, es válido para $E_2(\mathcal{W})$. Este resultado está vinculado con las propiedades extremas obtenidas para este espectro discutidas en la sección 7.1.3.

Por otro lado, dado que $U_{t,t-1} = U_t U_{t-1}^{\dagger}$, el operador \mathcal{U} de la Ec. (7.2) está relacionado con \mathcal{W} a través de

$$\mathcal{U} = \mathcal{W}(I \otimes \exp[-iP_T])\mathcal{W}^{\dagger}, \qquad (7.68)$$

donde $\exp[-iP_T] = \sum_t |t\rangle \langle t-1|$. El estado puro asociado es también un estado historia,

$$|\mathcal{U}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{t} |U_{t,t-1}\rangle |T_{t,t-1}\rangle, \qquad (7.69)$$

donde $|T_{t,t-1}\rangle = \sqrt{N}(|t\rangle\langle t-1|\otimes \mathbb{1}_{T'})|\mathbb{1}_{T}\rangle = |t, t-1\rangle$ son nuevamente estados ortogonales. Su entrelazamiento es entonces una medida de la distinguibilidad de los estados $|U_{t,t-1}\rangle$ asociados a los operadores de evolución, y depende del *orden* de los operadores U_t , al contrario de $E(\mathcal{W})$, se anula en el caso constante (7.5)–(7.6).

7.4. Entrelazamiento de Operador y Poder Entrelazante (*Entangling Power*)

Hemos visto que existe una relación entre el entrelazamiento del operador W y el del estado historia que este genera, $|\Psi\rangle = \sum_t U_t |S_0\rangle |t\rangle$. Demostraremos a continuación que la entropía de entrelazamiento cuadrática del operador W, $E_2(W) \equiv E_2(U,T)$, Ec. (7.64), es proporcional al poder entrelazante de W, definido como el entrelazamiento cuadrático promedio que este genera al ser aplicado a un estado inicial producto $|S_0\rangle|0\rangle$:

$$\langle E_2(S,T)\rangle = \frac{d_S}{d_S+1} E_2(\mathcal{W}), \qquad (7.70)$$

donde

$$\langle E_2(S,T)\rangle = \int_{\mathcal{H}} 2(1 - \operatorname{Tr} \rho_S^2) dS_0 \,, \tag{7.71}$$

es el promedio de la entropía de entrelazamiento cuadrática $E_2(S, T)$ del estado historia sobre todos los estados iniciales $|S_0\rangle$, con dS_0 la medida de Haar (la única medida normalizada unitariamente invariante sobre el espacio de Hilbert) y ρ_S es el estado reducido de S en $|\Psi\rangle$.

Demostración. Dado que $\rho_S = \frac{1}{N}\sum_t U_t |S_0\rangle \langle S_0 | U_t^\dagger,$ obtenemos

$$\langle \operatorname{Tr} \rho_S^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{t,t'} \int_{\mathcal{H}} \langle S_0 | U_t^{\dagger} U_{t'} | S_0 \rangle \langle S_0 | U_{t'}^{\dagger} U_t | S_0 \rangle dS_0 \,. \tag{7.72}$$

Podemos definir $O = U_t^{\dagger} U_{t'}$ y $P = U_{t'}^{\dagger} U_t = O^{\dagger}$ para usar la relación [148]

$$\int_{\mathcal{H}} \langle S_0 | O | S_0 \rangle \langle S_0 | P | S_0 \rangle dS_0 = \frac{\operatorname{Tr}[O] \operatorname{Tr}[P] + \operatorname{Tr}[OP]}{d_S(d_S + 1)} \,. \tag{7.73}$$

Dado que en este caso $OP = \mathbb{1}_S$, se obtiene

$$\langle \operatorname{Tr} \rho_S^2 \rangle = \frac{\frac{1}{N^2} \sum_{t,t'} |\operatorname{Tr} [U_t^{\dagger} U_{t'}]|^2 + d_S}{d_S (d_S + 1)}.$$
 (7.74)

Por otro lado, $E_2(\mathcal{W}) = 2(1 - \operatorname{Tr} \rho_U^2)$, con $\rho_U^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{t,t'} |U_t\rangle \langle U_t^{\dagger} | U_{t'}\rangle \langle U_{t'}^{\dagger} |$. Por lo que,

$$\operatorname{Tr} \rho_U^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{t,t'} |\langle U_t^{\dagger} | U_{t'} \rangle|^2 = \frac{1}{(d_S N)^2} \sum_{t,t'} |\operatorname{Tr}[U_t^{\dagger} U_{t'}]|^2.$$
(7.75)

Reemplazando (7.75) en (7.74) se tiene $\langle \operatorname{Tr} \rho_S^2 \rangle = \frac{d_S \operatorname{Tr} (\rho_U^2) + 1}{d_S + 1}$ por lo queda demostrada la Ec. (8.19).

Por consiguiente, el promedio del entrelazamiento cuadrático sistema-tiempo sobre todos los estados iniciales del sistema es simplemente el entrelazamiento cuadrático del operador unitario que genera al estado historia, multiplicado por el factor $\frac{d_S}{d_S+1}$. Se verifica que si los operadores U_t forman una base completa ortogonal, $E_2(\mathcal{W}) = 2(1 - d_S^{-2})$ es máximo y la Ec. (8.19) conduce a $\langle E_2(S,T) \rangle = 2(1 - d_S^{-1})$, el cual es el mayor valor para $E_2(S,T)$ que puede obtenerse en un espacio de dimensión d_S , lo que implica que este será siempre máximo, independientemente del estado inicial (sec. 7.1.2).

En general, para un conjunto reducido de d unitarias ortogonales U_t , con $N = d \le d_S^2$, $E_2(\mathcal{W}) = 2(1 - d^{-1})$ y por lo tanto

$$\langle E_2(S,T)\rangle = 2\frac{d_S(d-1)}{d(d_S+1)}.$$
 (7.76)

Para poder visualizar esta relación, definimos un número promedio efectivo de estados ortogonales que visita el sistema como

$$\overline{d}_{S,T} = \frac{1}{1 - \frac{1}{2} \langle E_2(S,T) \rangle} = \frac{d(d_S + 1)}{d_S + d}, \qquad (7.77)$$

tal que $\langle E_2(S,T)\rangle = 2(1 - 1/\overline{d}_{S,T})$. Si $d = d_S^2$, $\overline{d}_{S,T} = d_S$ es máximo, mientras que si $d = d_S$, el cual es, por ejemplo, el caso de un Hamiltoniano constante con espectro $2\pi k/N$ (d_S operadores ortogonales $U_t = \exp[-iHt]$), la Ec. (7.77) implica $\overline{d}_{S,T} = (d_S + 1)/2$, es decir, solo la *mitad* del valor máximo para d_S grande. Para cualquier otro espectro y $N = d_S$, $\overline{d}_{S,T} \leq (d_S + 1)/2$, es decir,

$$\langle E_2(S,T) \rangle \le 2 \frac{d_S - 1}{d_S + 1} \quad (U_t = e^{-iHt}, \ N = d_S).$$
 (7.78)

Es notable que es suficiente tener $d \propto d_S$ ($\ll d_S^2$ para d_S grande) para alcanzar un alto valor de $\overline{d}_{S,T}$, es decir, $\overline{d}_{S,T} \geq \frac{m}{m+1}(d_S + 1)$ para $d \geq md_S$ (y $m \leq d_S$), como se ve a partir de (7.77).

7.5. MIDIENDO LOS Overlaps DEL OPERADOR

Los overlaps $\langle U_t | U'_t \rangle$ son las fidelidades del operador definidas en [149] y están involucrados en la determinación del entrelazamiento cuadrático (7.64) del operador generador \mathcal{W} , pueden obtenerse experimentalmente midiendo $|T_t\rangle\langle T_{t'}|$ en la parte de tiempo T(Fig. 7.5). Notablemente, para esto alcanza con inicializar el sistema en un estado máximamente mezclado: Tomando traza sobre el sistema S' en el estado historia de operador (7.63), obtenemos

$$\rho_{ST} = \frac{1}{Nd_S} \sum_{t,t'} U_t U_{t'}^{\dagger} \otimes |t\rangle \langle t'| , \qquad (7.79)$$

donde hemos escrito $|T_t\rangle$ como $|t\rangle$. Por lo que traceando S se tiene

$$\rho_T = \frac{1}{N} \sum_{t,t'} \langle U_{t'} | U_t \rangle | t \rangle \langle t' | .$$
(7.80)



Figura 7.5: Circuito esquemático en el cual se representa la medida de los *overlaps* del operador (7.82).

Luego, eligiendo $U_{t,t'} = U_t U_{t'}^{\dagger}$,

$$\langle |t'\rangle\langle t|\rangle = \frac{1}{N}\langle U_{t'}|U_t\rangle = \frac{1}{Nd_S} \operatorname{Tr}\left[U_{t'}^{\dagger}U_t\right] = \frac{1}{Nd_S} \operatorname{Tr}\left[U_{t,t'}\right].$$
(7.81)

A través de los operadores $\sigma_{t't}^x = |t'\rangle\langle t| + |t\rangle\langle t'|, \sigma_{t't}^y = -i(|t'\rangle\langle t| - |t\rangle\langle t'|)$, se puede obtener la traza del operador evolución entre dos tiempos cualesquiera, midiendo los promedios de $\sigma_{tt'}^x$ y $\sigma_{t't}^y$, los cuales proveen las partes reales e imaginarias:

$$\langle \sigma_{t't}^x \rangle = \frac{2}{N} \operatorname{Re}[\langle U_t | U_{t'} \rangle], \quad \langle \sigma_{t't}^y \rangle = \frac{2}{N} \operatorname{Im}[\langle U_t | U_{t'} \rangle].$$
(7.82)

Para $U_0 = 1$, los promedios $\langle \sigma_{0t}^{\mu} \rangle$ determinan la traza del operador evolución para cualquier t: Tr U_t .

En el caso especial en que T es un *qubit* (N = 2), recuperamos el resultado estándar del esquema DQC1 para determinar la traza de un operador [25]. El estado historia para este caso se reduce a $|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|U_0\rangle|T_0\rangle + |U_1\rangle|T_1\rangle)$, y su entrelazamiento cuadrático es

$$E_2(\mathcal{W}) = 1 - |\langle U_0 | U_1 \rangle|^2 = 1 - |\operatorname{Tr} U|^2 / d_S^2.$$
(7.83)

Su raíz cuadrada es directamente el entangling power del circuito DQC1 definido en [150].

8 SIMULACIÓN EXPERIMENTAL

"Una vez, tu finado padre nos dijo que no se puede medir el tiempo por días, como el dinero por centavos o pesos, porque los pesos son iguales y cada día es distinto y tal vez cada hora."

Jorge Luis Borges

En este último capítulo, se investiga la posible simulación de estados historia provenientes del formalismo discreto introducido en los capítulos 6 y 7. En primer lugar, se muestra que a través de la aproximación de campo medio de pares, se puede considerar a las cadenas de espines dimerizadas como relojes cuánticos de espines, conectando de esta forma el entrelazamiento estudiado en ambas partes de la Tesis.

En segundo lugar, se presenta una realización experimental inicial en la cual se ven reflejadas las principales características del modelo a través de un experimento de óptica cuántica.

8.1. Simulación en Cadenas de Espines

En esta sección exploramos una conexión entre el tratamiento de campo medio de pares investigado en primer lugar (capítulos 3, 4 y 5) con el formalismo de tiempo desarrollado en los capítulos 6 y 7. Mostraremos que eligiendo una partición adecuada de la cadena de espines dimerizada, es posible simular estados historia de manera eficiente.

Consideremos una cadena cíclica de 2n espines *s* y una partición de la misma compuesta por los n espines "externos" y los n espines "internos (es decir, los n izquierdos y los n derechos de cada dímero), como se aprecia en la figura 8.1. El estado fundamental puede siempre escribirse como

$$|\Psi\rangle = \sum_{J,L} C_{JL} |J\rangle |L\rangle \tag{8.1}$$

8 Simulación experimental



Figura 8.1: Esquema que representa la simulación de un estado historia en una cadena de espines dimerizados.

donde $|J\rangle$ y $|L\rangle$ denotan estados de una base ortonormal arbitraria para el sistema de *n* espines internos y externos respectivamente. Mediante la correspondiente descomposición de Schmidt, este estado puede reescribirse como (ver (7.11))

$$|\Psi\rangle = \sum_{K} \sqrt{P_{K}} |K_{I}\rangle| - K_{E}\rangle$$
(8.2)

donde P_K y los estados ortogonales $|K_{I(E)}\rangle$ se obtienen a partir de la descomposición en valores singulares de la matriz C_{JL} . Estos valores P_K coinciden por su puesto con los autovalores de la matrices densidad reducidas $\rho_{I(E)} = \text{Tr}_{E(I)} |\Psi\rangle\langle\Psi|$.

A partir de (8.2) y la *DFT* de los estados de Schmidt, puede obtenerse, como se discutió previamente (ver (7.15)), un estado historia "externo-interno", donde uno de ellos puede interpretarse como reloj:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\tau} \frac{1}{d^{n/2}} \exp[-iH_I \tau] |I_0\rangle |\tau\rangle$$
(8.3)

donde $|\tau\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{d^n}} \sum_K e^{-i2\pi K \tau/d^n} |K_E\rangle$ son estados ortonormales del "reloj" E, con $d = 2s + 1, \tau = 0, \ldots, d^n - 1, H_I |K_I\rangle = (2\pi K/d^n) |K_I\rangle$ y $|I_0\rangle = \sum_K \sqrt{P_K} |K_I\rangle$ es el estado inicial efectivo del sistema I.

En el caso general, los estados locales de la base de Schmidt $|K_E\rangle$ y $|K_I\rangle$ son estados complejos entrelazados de *n* espines. Notablemente, en el caso de una cadena dimerizada en una fase dimerizada, que, como vimos, puede ser descripta muy satisfactoriamente por medio de la aproximación de campo medio de pares, tal estado se simplifica considerablemente: El estado global de la cadena tiene la forma de un producto de estados de pares,

$$|\Psi\rangle = \otimes_{i=1}^{n} |\psi_i\rangle \tag{8.4}$$

con $|\psi_i\rangle$ el estado del par *i* (que por simplicidad de notación consideraremos independiente de *i*, como en el caso de una cadena dimerizada uniforme):

$$|\psi_i\rangle = \sum_k \sqrt{p_k} |k_I\rangle| - k_E\rangle.$$
(8.5)

Aquí hemos utilizado la descomposición de Schmidt del estado del par, con k = 1, ..., dy d = 2s + 1 para el caso de un par de espines s.

Así, la descomposición de Schmidt (8.2) toma la forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{k_1\dots,k_n} \sqrt{p}_{k_1} \dots \sqrt{p}_{k_n} |k_{1I}\dots k_{nI}\rangle| - k_{1E}\dots - k_{nE}\rangle.$$
(8.6)

Esto es, los estados de Schmidt locales son precisamente estados producto de los n espines I o E. En otras palabras, los estados $|K_E\rangle = |k_{1E} \dots k_{nE}\rangle$, con $k_i = 1, \dots, 2s + 1$, $K = 1, \dots, d^n$, forman una base producto, con K expresado en notación de base d = 2s + 1 (binaria si s = 1/2, "ternaria" si s = 1, etc.). A partir de esta expresión, los estados locales de tiempo son la *DFT* de estos estados locales $|K_E\rangle$. El entrelazamiento "sistema-tiempo" toma la forma $E(S,T) = nS(|\psi_i\rangle)$, con $S(|\psi_i\rangle) = -\sum_k p_k \log_2 p_k$ el entrelazamiento de un par.

En particular, si el estado del par es máximamente entrelazado, $p_k = 1/\sqrt{2s+1} \forall k$, entonces $|\Psi\rangle$ es máximamente entrelazado en esta partición, y por ende cualquier base local $|K_E\rangle$ resulta en este caso equivalente.

Esto muestra que una cadena de espines puede ser utilizada para simulación de estados historia, con una dimensión que crece exponencialmente con el número n de pares.

8.2. Simulación de Estados Historia por Medios Ópticos

En esta sección se discute una simulación la simulación de estados historia discretos utilizando una arquitectura completamente óptica. Esta investigación se realizó en colaboración con el laboratorio de Procesado de Imágenes del Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad de Buenos Aires [26].

8 Simulación experimental

Con este fin, se utilizó el momento transverso lineal de fotones individuales para representar al tiempo $|t\rangle$ del sistema cuántico reloj T, y su polarización lineal para codificar al estado $|S_t\rangle$ del sistema cuántico S.



Figura 8.2: Generación y caracterización de estados historia.

El arreglo experimental para simular evolución cuántica paralela en el tiempo se presenta en la Fig. 8.2. En la primera parte, se ilumina con un láser de estado sólido de 660nm, el cual es filtrado y colimado de forma tal que incida en un modulador espacial de luz programable (*Spatial Light Modulator:* SLM) con una onda plana de fase aproximadamente constante y amplitud distribuida sobre la región de interés (Region Of Interest: ROI). Este SLM, basado en un micro-display de Liquid Crystal-on-Silicon: (LCoS) reflectivo, con una resolución espacial de 1024x768 píxeles, se emplea para representar al estado historia $|\Psi\rangle$, dando la posibilidad de modificar dinámicamente la función óptica en la pantalla, píxel a píxel. En particular, el SLM utilizado en nuestro experimento, está formado por un HoloEye Lc-R 2500 en combinación con un polarizador (P1) y una placa de cuarto de onda (QW1) que provee el estado de luz polarizada incidente adecuado para alcanzar la amplitud máxima y modulación de fase entre dos polarizaciones ortogonales [151, 152]. Esto nos permite tener un amplio rango de modulación de polarización para la cual la amplitud del campo electromagnético se mantiene constante, independientemente del nivel de gris para el cual se configuran los píxeles del LCoS. A su vez, para este estado inicial, no hay fase inicial adicional en el estado de salida debida al camino óptico.

Finalmente, dado que cada píxel se puede controlar de forma individual, se puede programar una función particular $f(\mathbf{x})$ que caracteriza la distribución de modulación. Luego, el frente de onda del campo adquiere una polarización específica condicionada por la posición transversal al plano del *SLM*. En la Fig. 8.3 se muestra, esquemáticamente, un ejemplo de esto cuando se configuran ocho regiones rectangulares independientes en la pantalla del *SLM*, cada una con un nivel de gris constante particular.



Figura 8.3: Esquema del modulador espacial de luz (*SLM*) con ocho regiones independientes en la pantalla, permitiendo generar ocho estados de polarización.

En la segunda parte del arreglo experimental, se utiliza un analizador de polarización del estado (*Polarization State Analyzer: PSA*) para la caracterización del *SLM* como un generador de estados en polarización (*Polarization State Generator: PSG*). Con este fin, se dispuso un nivel de gris constante en toda la pantalla. Luego de reflejar en el *SLM*, el haz saliente se enfocó por medio de la lente *L3* en el plano de detección del fotodiodo, que no se muestra aquí. La placa de cuarto de onda (QW2) y el polarizador lineal (P2) proyectan al estado inicial del fotón en distintas bases, mientras que medidas de intensidad se registran en el plano imagen (IP). Esto permite la completa reconstrucción de las matrices de Mueller del *SLM* a partir de las cuales se puede obtener la intensidad de modulación para cada nivel de gris. En la Fig. 8.4 se presenta los estados de salida de polarización accesibles a través del *SLM* cuando el haz incidente es preparado en un estado particular con polarización elíptica. Cada punto en la esfera de Bloch corresponde a un único nivel de gris, entre 0 y 255, configurado en el *SLM*. Asimismo, se realizaron medidas de interferencia en el plano de Fourier (FP), entre los haces provenientes de dos regiones del *SLM* configuradas con diferentes niveles de gris.

Una vez que hemos caracterizado completamente al *SLM*, el mismo sistema *PSG-PSA* se empleó para simular experimentalmente distintos estados historia sistema-tiempo discretos $|\Psi\rangle$, y la subsecuente evolución unitaria del estado del sistema $|S_t\rangle = U_t |S_0\rangle$ (t = 0, ..., N - 1).

8 Simulación experimental



Figura 8.4: Estados de polarización accesibles.

8.2.1. Generación de Estados Historia Discretos

Como hemos visto en el capítulo 6, el estado historia $|\Psi\rangle$ se puede generar a partir de un estado inicial producto $|S_0\rangle|0\rangle$ como

$$|\Psi\rangle = \mathcal{W}(\mathbb{1} \otimes H)|S_0\rangle|0\rangle.$$
(8.7)

En la implementación experimental, el estado inicial total es un estado fotónico definido por el producto entre su estado de polarización ($|S_0\rangle$) y su estado espacial ($|0\rangle$) descripto por el perfil transversal del frente de onda . El tratamiento, tanto de la polarización como del grado de libertad espacial de los fotones en la utilización del *SLM*, se enmarcó dentro de un formalismo similar al empleado en [153, 154].

Con el fin de simular la generación de estados historia asumimos que el campo del fotón individual es paraxial y monocromático, considerándolo descripto por un estado puro

$$|S_0\rangle|0\rangle = \sum_{\mu} \int d\mathbf{x} \,\alpha_{\mu} \psi(\mathbf{x})|\mu\rangle|1\mathbf{x}\rangle,\tag{8.8}$$

donde μ barre dos polarizaciones ortogonales, $\mathbf{x} = (x, y)$ es la coordenada de la posición transversal, y $\psi(\mathbf{x})$ es la amplitud de probabilidad transversal normalizada para este esta-

do: $\int d\mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 = 1$. El *SLM* introduce una modulación dependiente de la polarización que puede ser idealmente interpretado como la acción del operador

$$\hat{f} = \sum_{\alpha,\beta} \int d\mathbf{x} f_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) |\alpha, 1\mathbf{x}\rangle \langle \beta, 1\mathbf{x}|, \qquad (8.9)$$

tal que, luego de atravesar el SLM, el estado del fotón es

$$|\Psi\rangle \propto \sum_{\mu,\nu} \int d\mathbf{x} \, \alpha_{\nu} \psi(\mathbf{x}) f_{\mu\nu}(\mathbf{x}) |\mu\rangle |1\mathbf{x}\rangle.$$
 (8.10)

Consideremos una distribución de modulación $f_{\mu\nu}(\mathbf{x})$, la cual define una matriz de N regiones espaciales adyacentes de ancho 2a, y largo 2b. En cada una de estas regiones se tiene una modulación compleja constante, $C_{\mu\nu}^{(t)}$. Luego,

$$f_{\mu\nu}(\mathbf{x}) = \sum_{t=0}^{N-1} C_{\mu\nu}^{(t)} \operatorname{rect}\left(\frac{x-x_t}{2a}\right) \operatorname{rect}\left(\frac{y-y_t}{2b}\right)$$

$$C_{\mu\nu}^{(t)} = c_{\mu\nu}^{(t)} e^{i\phi_{\mu\nu}^{(t)}}, \ c_{\mu\nu}^{(t)} \ge 0$$
(8.11)

donde $\operatorname{rect}(u) = 1$ si $|u| < \frac{1}{2}$, 0 en caso contrario, y los centros de estas regiones están en $\{(x_t, y_t)\}_{t=0}^{N-1}$, con $x_t = a, 3a, 5a, \dots$, y $y_t = b, 3b, 5b, \dots$

Sin pérdida de generalidad y en acuerdo con las condiciones del experimento, podemos asumir que $\psi(\mathbf{x})$ es constante a lo largo de la región de interés (*ROI*). Por lo que podemos reescribir al estado (8.10) como

$$|\Psi\rangle \propto \sum_{t=0}^{N-1} \sum_{\mu,\nu} \alpha_{\nu} C_{\mu\nu}^{(t)} |\mu\rangle |t\rangle, \qquad (8.12)$$

donde $|t\rangle = \frac{1}{\sqrt{A_t}} \int d\mathbf{x} \operatorname{rect}\left(\frac{x-x_t}{2a}\right) \operatorname{rect}\left(\frac{y-y_t}{2b}\right) |1\mathbf{x}\rangle.$

En la implementación experimental, la modulación introducida por el *SLM* implica solamente una transformación en el grado de libertad de polarización. Esto significa que $\sum_{\mu,\nu} \alpha_{\nu} C_{\mu\nu}^{(t)} |\mu\rangle |t\rangle = (U_t \otimes \mathbb{1}) |S_0\rangle |t\rangle \equiv |S_t\rangle |t\rangle$, con U_t una matriz unitaria tal que $|S_t\rangle = U_t |S_0\rangle = \sum_{\mu,\nu} \alpha_{\nu} C_{\mu\nu}^{(t)} |\mu\rangle$ es el estado de polarización asociado a la región t. Luego, el *SLM* transforma al estado inicial del fotón de la siguiente forma:

$$|S_{0}\rangle|0\rangle \stackrel{\text{SLM}}{\Longrightarrow} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{t=0}^{N-1} U_{t}|S_{0}\rangle|t\rangle = \mathcal{W}\left(|S_{0}\rangle \sum_{t=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{N}}|t\rangle\right)$$
$$= \mathcal{W}(\mathbb{1} \otimes H)|S_{0}\rangle|0\rangle,$$
(8.13)

generando por lo tanto al estado historia (8.7), donde el sistema S y el sistema reloj T son emulados a través de la polarización y el grado de libertad espacial, respectivamente.

8.2.2. Evolución del Sistema y Valores Medios

En la sección previa se describió el arreglo experimental para simular estados historia. Esta implementación nos permite determinar el promedio temporal de valores medios del sistema, de dos formas distintas:

- Por medio de medidas secuenciales en el sistema S
- Con una sola medida sobre el estado historia, que contiene toda la evolución del sistema S.

Por un lado, si se realiza una medida de intensidad en el plano imagen, los valores medio de los operadores de Pauli $\hat{\sigma}_{\mu}$, variarán dependiendo del voltaje asignado a las distintas regiones definidas en Ec. (8.11). Si el estado de polarización asociado a la región t es $|S_t\rangle$, luego $\hat{\sigma}_{\mu}$ tendrá el valor medio $\langle S_t | \hat{\sigma}_{\mu} | S_t \rangle$, y el promedio de estos operadores dentro de la región de interés será $\frac{1}{N} \sum_{t=0}^{N-1} \langle S_t | \hat{\sigma}_{\mu} | S_t \rangle$.

Por otro lado, si se realiza una medida de intensidad en el plano de Fourier, no hay distinción entre las regiones y el promedio está dado por $\langle \Psi | \hat{\sigma}_{\mu} \otimes \mathbb{1} | \Psi \rangle$. Por supuesto, estas dos formas de promedios temporales coinciden:

$$\frac{1}{N}\sum_{t=0}^{N-1} \langle S_t | \hat{\sigma}_{\mu} | S_t \rangle = \langle \Psi | (\hat{\sigma}_{\mu} \otimes \mathbb{1}) | \Psi \rangle .$$
(8.14)

Esto refleja la ventaja cuantitativa de poder simular el estado historia. El presente esquema proporciona un método eficiente para obtener promedios temporales de la polarización del sistema mediante una única medida.

En la Fig. (8.5) se muestran resultados para los valores medios de los observables de polarización obtenidos en distintas trayectorias y por los dos métodos descriptos por la Ec. (8.14): promediando los valores medios de medidas secuenciales y por medio de una única medida del estado historia en el plano de Fourier, observándose un buen acuerdo entre ambos métodos. Las distintas trayectorias constan de 2, 4 u 8 estados de tiempo (rendijas), para niveles de gris entre 0 y 40, y los estados de polarización $|S_t\rangle$ de estos estados historia están expresados en términos de los valores medios de los operadores de Pauli $\langle \sigma_{\mu} \rangle$ (ver 8.2.3), los cuales son directamente los parámetros de Stokes medidos que se muestran en la Fig. (8.6).

Con el fin de atenuar el poder del haz láser a nivel de régimen de un fotón, de forma que corresponda a la presencia de un fotón en promedio, a todo tiempo, en el experimento, se



Figura 8.5: Valores medios de los observables de polarización $\langle \sigma_{\mu} \rangle$ para diferentes evoluciones del estado inicial $|S_0\rangle$. Se comparan los resultados teóricos (\circ) con los valores experimentales obtenidos promediando sobre todas las regiones (\times), y por medio de una única medida (∇).

Trayectoria	1	2	3	4	5	6	7
Nº de Estados de tiempo (N)	2	4	4	8	4	4	8

insertaron filtros neutrales en el esquema experimental, previos a la etapa *PSG*. Esta pseudo fuente puede ser utilizada para simular el estado de un fotón individual, y es usual en implementaciones ópticas de simulaciones cuánticas o de estimaciones de estados cuánticos [155, 156].

En este caso permite comprobar la factibilidad del método propuesto para simular las características principales de una evolución cuántica paralela en el tiempo. Además, en lugar de una cámara *CCD*, se utilizó una cámara de tecnología *CMOS* de alta sensibilidad (*Andor Zyla 4.2 sCMOS*) para realizar las medidas de intensidad en este régimen.

8.2.3. Operadores Evolución y Poder Entrelazante

Anteriormente en la sección 8.2.1, se indicó que la modulación introducida por el SLM puede describirse por una transformación unitaria en el espacio de polarización. Experimentalmente, la modulación asociada a un dado nivel de gris en la pantalla se describe por una matriz de Mueller M de 4×4 [152]. La matriz de Mueller actúa como una transfor-



Figura 8.6: Parámetros de Stokes en función del nivel de gris, registrados a través de una cámara *CCD* (*C*₁) y una cámara de tecnología *CMOS* de alta sensibilidad (*C*₂).A su vez se muestran los resultados obtenidos para las matrices de Mueller para dichos niveles de gris.

mación lineal en el estado de polarización, el cual se representa por el vector de Stokes *s*, definido como

$$\boldsymbol{s} = \begin{pmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{00} + P_{\frac{\pi}{2}0} \\ P_{00} - P_{\frac{\pi}{2}0} \\ P_{\frac{\pi}{4}0} + P_{-\frac{\pi}{4}0} \\ P_{\frac{\pi}{4}\frac{\pi}{2}} + P_{-\frac{\pi}{4}\frac{\pi}{2}} \end{pmatrix},$$
(8.15)

donde los coeficientes $P_{\theta\phi}$ en el último vector son el resultado de seis medidas de polarización: polarización lineal horizontal y vertical $(P_{00}, P_{\frac{\pi}{2}0})$, polarización lineal 45° y 135° $(P_{\frac{\pi}{4}0}, P_{-\frac{\pi}{4}0})$, y polarización circular derecha e izquierda $(P_{\frac{\pi}{4}\frac{\pi}{2}}, P_{-\frac{\pi}{4}\frac{\pi}{2}})$. Estas medidas corresponden en el formalismo cuántico a proyecciones sobre estados de polarización $|P_{\theta\phi}\rangle = \cos(\theta)|H\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta)|V\rangle$, por lo que tenemos (dado que $P_{00} + P_{\frac{\pi}{2}0} = 1$), $s_1 = \langle \hat{\sigma}_z \rangle, s_2 = \langle \hat{\sigma}_x \rangle, s_3 = \langle \hat{\sigma}_y \rangle$, donde $\langle \hat{\sigma}_\mu \rangle$ denota el valor medio del i-ésimo operador de Pauli definido respecto de la base $\{|H\rangle, |V\rangle\}$. Luego, el estado de polarización del fotón individual está dado por

$$\rho = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + \boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \tag{8.16}$$

con $r = \frac{1}{s_0}(s_1, s_2, s_3)$. Una transformación unitaria en el espacio de polarización corresponde entonces a una rotación del vector de Bloch r, la cual está asociada a una matriz de Mueller de la forma

$$M_R = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & m_R \end{pmatrix} \tag{8.17}$$

donde m_R denota una matriz de rotación arbitraria de 3×3 . Una matriz de Mueller como (8.17) describe el efecto de un retardador ideal. Sin embargo, el *SLM* utilizado en la implementación, modula simultáneamente fase y amplitud, es decir, no solo introduce un retraso sino también cierta atenuación. Por lo tanto, la matriz de Mueller asociada a un dado nivel de gris no tendrá exactamente la forma (8.17), que mapea a una transformación unitaria en el espacio de polarización. No obstante, es posible a partir de la descomposición de Lu-Chipman [157] extraer una matriz de retardo que tiene en cuenta la transformación de fase introducida por el *SLM*. De esta forma, se obtuvo un conjunto de matrices unitarias efectivas que describen las transformaciones realizadas sobre la polarización del fotón para 54 niveles de gris entre 0 y 255. En la Fig. 8.7 se muestran ejemplos de estas evoluciones simuladas para la polarización del fotón como trayectorias en la esfera de Bloch.

Para cualquiera de estos estados historia simulados podemos reconsiderar al operador generador $W = \sum_t U_t \otimes |t\rangle \langle t|$, el cual se puede expresar, utilizando su descomposición de Schmidt (ver 7.53) como

$$\mathcal{W} = \sum_{t} \left(\frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^{3} r_{\mu}(t) \sigma_{\mu}\right) \otimes |t\rangle \langle t| = \sum_{\mu=0}^{3} \lambda_{\mu} \tilde{\sigma}_{\mu} \otimes O_{\mu} \,. \tag{8.18}$$

En primer lugar se expandieron los operadores unitarios en el espacio de polarización en operadores de Pauli y luego se escribió su correspondiente descomposición de Schmidt, de acuerdo al formalismo general del capítulo previo, donde $\tilde{\sigma}_{\mu}$ y O_{μ} son operadores ortogonales de polarización y espaciales ($\text{Tr}(\tilde{\sigma}_{\mu}^{\dagger}\tilde{\sigma}_{\nu}) = 2\delta_{\mu,\nu}$, $\text{Tr}(O_{\mu}^{\dagger}O_{\nu}) = N\delta_{\mu,\nu}$). Los números reales λ_{μ} son los coeficientes de Schmidt, los cuales satisfacen $\sum_{\mu} \lambda_{\mu}^2 = 1$. Son los valores singulares de la matriz de $4 \times N$, $r_{\mu}(t)/\sqrt{N}$.

8 Simulación experimental



Figura 8.7: Simulación de evoluciones para la polarización del fotón como trayectorias en la esfera de Bloch, para tres estados "semilla" $|S_0\rangle$ distintos.

Su entrelazamiento cuadrático, $E_2(W) = 2(1 - \sum_{\mu} \lambda_{\mu}^4)$ es proporcional al *entangling power* de W, discutido en el capítulo precedente (ver 7.4)

$$\langle E_2(S,T)\rangle = \frac{d_S}{d_S+1}E_2(\mathcal{W}),$$
(8.19)

donde

$$\langle E_2(S,T)\rangle = \int_{\mathcal{H}} 2(1 - \operatorname{Tr} \rho_S^2) dS_0$$
(8.20)

es el promedio del entrelazamiento cuadrático $E_2(S,T)$ del estado historia sobre todos los estados iniciales $|S_0\rangle$ con medida de Haar dS_0 .

Se verificó esta relación considerando el conjunto completo de unitarias de polarización disponibles, las cuales proporcionaron una entropía $E_2(W) = 0.712$. A través de una simulación sobre 1000 estados iniciales, se corroboró la relación previa con un error menor a 0.01.
9 CONCLUSIONES

"Cuando la mente está serena, tranquila sin buscar respuesta ni solución alguna, sin resistir ni esquivar, solo entonces puede haber regeneración, porque entonces la mente es capaz de captar lo que es verdadero; y es la verdad lo que libera, no vuestro esfuerzo por ser libres."

Jiddu Krishnamurti

En este trabajo hemos investigado en primer lugar una aproximación general autoconsistente para el operador densidad de un sistema cuántico arbitrario, válido tanto para temperatura finita como temperatura 0. El esquema general está basado en aproximar el Hamiltoniano del sistema por medio de una combinación lineal de operadores pertenecientes a un cierto subconjunto arbitrario de operadores, determinándose la combinación lineal óptima a través de la minimización de la energía libre (o la energía media en el caso de temperatura 0). Esto conduce a una solución general autoconsistente. En el caso de que los operadores elegidos sean operadores de un cuerpo fermiónicos o bosónicos, el esquema se reduce a las aproximaciones de campo medio conocidas, tales como Hartree-Fock o Hartree-Fock-Bogoliubov (térmicas o a temperatura 0) en el caso fermiónico.

Cuando se aplica el formalismo general anterior a un sistema de espines, la aproximación estándar de campo medio se obtiene al considerar solamente operadores de un espín. A temperatura 0, esto conduce al estado producto óptimo (el de menor energía). Este estado, si bien proporciona en algunos casos un panorama básico del comportamiento del sistema, resulta claramente insuficiente para describir las correlaciones cuánticas entre los espines. Y si bien incorporando correlaciones por medio de la restauración de simetría en las fases con alguna simetría rota, es posible lograr en ciertos sistemas una descripción básica correcta, en otros, tales como el de cadenas dimerizadas, la aproximación resultante no logra describir correctamente el entrelazamiento cuántico entre las distintas componentes del sistema ni tampoco un diagrama de fases adecuado por lo que no es posible considerarlo como un punto de partida básico apropiado.

El formalismo introducido permite, no obstante, considerar aproximaciones autoconsistente más generales, en las que se incluyen, además de operadores de un espín, ciertos operadores de dos espines. Mientras en la aproximación de campo medio estándar la unidad o "sitio" queda asociado a un espín, en la aproximación generalizada el sitio puede

9 Conclusiones

quedar asociado a un par, o en general, a un subconjunto arbitrario de espines. De esta forma, las interacciones internas en el sitio son tenidas en cuenta de manera "exacta", y solo las interacciones entre los sitios son tratadas en forma aproximada. A temperatura 0, el esquema conduce así al estado producto óptimo en los subconjuntos elegidos. Remarquemos que este estado no es un estado producto de espines individuales, conteniendo entonces correlaciones dentro de cada sitio.

Si se elige el sitio adecuadamente, tal que las correlaciones fuertes queden dentro del sitio, el esquema anterior proporcionará una aproximación mucho más sólida que la aproximación de campo medio estándar, permaneciendo a la vez tratable si el sitio se compone de pocos espines. A su vez, es posible describir correlaciones entre los sitios compuestos, por medio de la restauración de simetría en las fases con simetría rota, y también por medio de tratamientos perturbativos. Mencionemos aquí que la ruptura de simetría en la aproximación generalizada ocurrirá cuando existan efectos no perturbativos de interacción entre los sitios compuestos, y por lo tanto el diagrama de fases puede ser muy distinto al proporcionado por la aproximación estándar, en la que la ruptura de simetría será generada típicamente por las interacciones internas.

Todos estos aspectos resultan bien visibles en el caso de una cadena dimerizada de espín 1/2, que hemos estudiado en detalle para el caso de temperatura 0. Aquí, la aproximación de campo medio estándar resulta claramente inadecuada para describir correlaciones e incluso estados de espines individuales, mostrando un diagrama de fases que es esencialmente el mismo que el de una cadena con acoplamientos uniformes.

Por el contrario, una aproximación de campo medio generalizada, basada en pares de espines (en lugar de espines individuales), es capaz de lograr una descripción muy precisa del sistema, permaneciendo a la vez tratable e incluso analítica. En primer lugar, la aproximación proporciona un nuevo diagrama de fases: La ruptura de simetría de paridad se produce ahora en una ventana de campo $B_{c1} < B < B_{c2}$ (en lugar de por debajo de un cierto campo crítico B_c , como en la aproximación estándar), si el acoplamiento débil es suficientemente bajo. Para $B < B_{c1}$ el sistema retorna a una fase con simetría de paridad restaurada pero profundamente correlacionada: El de una cadena dimerizada, con pares en estados máximamente correlacionados (estados de Bell). Tal estado está claramente más allá de las posibilidades de la aproximación de campo medio estándar. Así, al aumentar el campo el sistema evoluciona de una fase dimerizada para $B < B_{c1}$ a una fase parcialmente dimerizada para $B > B_{c2}$, en la que los pares están en estados débilmente entrelazados. La transición se produce por medio de una fase con simetría de paridad rota $(B_{c1} < B < B_{c2})$, dentro de la cual se encuentra el campo factorizante: En su vecindad el estado fundamental pierde por completo la estructura dimerizada. Mencionemos también que la solución exacta obtenida por medio de la fermionización de Jordan-Wigner, presenta también dos campos críticos cuando el acoplamiento débil es suficientemente bajo.

Complementando la aproximación de campo medio generalizada con la restauración de simetría y el tratamiento perturbativo, hemos visto que es posible alcanzar un excelente

acuerdo con los resultados exactos, no solo para el entrelazamiento del par fuertemente acoplado, sino también del entrelazamiento de un par débilmente acoplado. Asimismo hemos obtenido un excelente acuerdo para el entrelazamiento de un espín y de un par de espines con el resto del sistema. Podemos claramente interpretar la fase con simetría rota en la aproximación de pares como la fase donde las correlaciones entre el par fuertemente acoplado y el resto del sistema son significativas (recordar el gráfico del entrelazamiento del par con el resto del sistema). Otro punto importante es que aun en el caso de cadenas con acoplamiento uniforme ($\alpha = 1$) la aproximación de pares logra una sustancial mejora respecto a la aproximación estándar.

Luego, se extendió el tratamiento de campo medio de pares a cadenas dimerizada de espín general s con acoplamientos XY anisotrópicos en un campo transverso, analizándose el comportamiento del entrelazamiento del par y de la magnetización para valores $s \geq 1$. En primer lugar, se mostró que en el caso de acoplamiento débil entre pares, estas cantidades se pueden describir correctamente por medio de esta aproximación, la cual predice hasta 2s fases dimerizadas por debajo del campo factorizante si α es lo suficientemente pequeño y $\chi = J_y/J_x > 0$. Estas fases están separadas por fases con ruptura de paridad de espín. Los sectores dimerizados son visibles en los resultados exactos a través de mesetas aproximadas en la magnetización de la cadena y también en la negatividad del par, N_{12} , y de valores muy bajos de la entropía de entrelazamiento S_2 del par con el resto de la cadena. Por el contrario, los intervalos con ruptura de paridad dan lugar a mínimos de la negatividad del par N_{12} y máximos de la entropía S_2 , junto con incrementos cualitativamente lineales de la magnetización de la cadena, efectos que pueden ser todos descriptos correctamente por el tratamiento de campo medio de pares si se emplea restauración de simetría básica en estas fases. A su vez, se observó una correspondencia entre la magnetización y la entropía de entrelazamiento de espín individual S₁, la cual es en este sistema mayor que S_2 (excepto en la vecindad del campo factorizante B_s), reflejando la dimerización.

Las múltiples fases dimerizadas son posibles para valores cada vez más pequeños del acoplamiento entre pares a medida que s aumenta, siendo el caso XX el más favorable. No obstante, para acoplamientos mayores subsiste un comportamiento magnético no monótono de N_{12} y S_2 , en acuerdo con la no monotonía del parámetro de orden asociado a la ruptura de paridad de la aproximación de campo medio de pares.

Se mostró también que la negatividad del par aislado satura rápidamente a medida que s aumenta en el caso anisotrópico XY, en concordancia con las predicciones del tratamiento campo medio mas RPA con restauración de simetría, mientras que en el caso XX esta crece como \sqrt{s} debido a una distribución gaussiana de ancho $\propto \sqrt{s}$ de los coeficientes de Schmidt, representando un caso intermedio entre el régimen anisotrópico XY y el completamente antiferromagnético.

Estos resultados indican en general que sistemas de espín *s* con acoplamientos no homogéneos e inmersos en un campo magnético, pueden exhibir fases y propiedades de entrelazamiento interesantes y no triviales, conduciendo a regímenes lejanos del límite bo-

9 Conclusiones

sónico, esperado para espín *s* alto. Los tratamientos autoconsistentes de campo medio generalizado, basados en unidades no triviales como pares o *clusters*, pueden proveer una descripción adecuada de estos sistemas en estos regímenes, especialmente si se los complementa con restauración de simetría en las fases con simetría rota, ofreciendo un punto de partida conveniente para tratamientos más complejos.

En la segunda parte de esta tesis, determinamos algunas propiedades fundamentales relacionadas con la generación y el entrelazamiento de estados historia discretos, en el marco de un modelo discreto paralelo en el tiempo de evolución cuántica, basado en un reloj cuántico de dimensión finita [16]. Se mostró en primer lugar que a partir de una ecuación de autovalores estática (que se puede escribir en una forma de Wheeler-DeWitt generalizada) se impone una evolución discreta general unitaria a los estados del sistema. Y para cualquier estado inicial fijo del sistema, existe siempre una elección de "tiempo especial" en la base del reloj para la cual la evolución corresponde a un Hamiltoniano constante. Se examinan también los restantes autovalores y autoestados del superador asociado a la ecuación generalizada de Wheeler-DeWitt, mostrándose que implican también evoluciones unitarias en el sistema. El esquema discreto posee la ventaja de ser simulable por medio de un circuito cuántico, y permite además la evaluación eficiente de promedios temporales.

El entrelazamiento sistema-tiempo resultante es una medida del número de estados distinguibles visitados por el sistema en tiempos distinguibles y satisface una relación de incerteza entrópica energía-tiempo. Mientras este depende en general del estado inicial, se presentó un esquema simple de dos relojes que genera un estado historia *máximamente entrelazado*, independientemente del estado "semilla". En consecuencia, se puede generar un estado historia esencialmente independiente de las condiciones iniciales.

Se mostró a su vez que el entrelazamiento cuadrático sistema-tiempo provee una herramienta conveniente para medir este entrelazamiento: Se puede determinar de forma analítica y satisface cotas superiores e inferiores estrictas y físicas. La cota superior está conectada con con la dispersión en energía del estado inicial (y se alcanza para un espectro de energía uniforme), y la cota inferior está relacionada con la trayectoria geodésica entre los estados inicial y final, la cual provee también la entropía de entrelazamiento cuadrática S - T mínima. El entrelazamiento cuadrático es también accesible experimentalmente.

A su vez, por medio de la dualidad *channel-state* se demostró que el operador unitario generador del estado historia se puede considerar, él mismo, como un estado historia de operador. Su entropía de entrelazamiento cuadrática representa su *entangling power*, es decir, su capacidad de generar entrelazamiento, medida a través del entrelazamiento promedio generado. Se presenta asimismo un esquema simple que permite obtener de forma eficiente los *overlaps* entre los estados del sistema (y por lo tanto el entrelazamiento cuadrático S - T), y también las trazas del operador evolución entre dos tiempos cualesquiera, a través de medidas en el reloj. Otros aspectos que fueron examinados en detalle incluyen el análisis del caso en que el reloj es un qubit, determinándose aquí el límite continuo y mostrándose que este representa una cota inferior a todos los casos discretos. También

se analizó en este caso el estado historia asociado a estados no puros, mostrándose que el entrelazamiento S-T está aquí relacionado con la fidelidad entre los estados inicial y final.

Finalmente, se investigó la simulación experimental de estados historia. En primer lugar, se trabajó en la simulación por medios ópticos, en colaboración con el Laboratorio de Procesado de Imágenes del Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires. Se logró generar estados historia de polarización, mediante moduladores espaciales de luz (SLM), disponibles en dicho laboratorio, logrando un esquema que reproduce las principales características del modelo y que es eficiente para medir promedios temporales. Asimismo, se mostró una conexión entre el formalismo de campo medio autoconsistente generalizado basado en pares y el modelo cuántico de tiempo presentado. El tratamiento de campo medio de pares en cadenas de espines interactuantes bajo campos magnéticos logra describir correctamente las fases dimerizadas del estado fundamental de estos sistemas, permitiendo a la vez una representación del estado muy conveniente para simular estados historia, utilizando una partición adecuada. La ventaja de este tipo de simulación es que la dimensión del sistema crece exponencialmente con el número de espines, lo cual permitiría en este contexto simulaciones con un número muy grande de tiempos o pasos.

Los modelos presentados en la presente Tesis abren varias posibilidades tanto teóricas como experimentales. Entre las primeras se contempla analizar con mayor detalle su extensión a estados no puros y sistemas abiertos [146], y a estados historia de operadores [22, 131, 132, 134], por medio del isomorfismo Choi-Jamiołkowski [23]. Asimismo, es posible examinar la extensión a sistemas multipartitos con varios relojes [22, 158], su potencial para el análisis de los denominados Floquet Time-Crystals [159] y su formulación relativista, siguiendo la línea iniciada en [160]. El formalismo también permitiría un nuevo enfoque en el análisis de circuitos cuánticos basado en la simulación paralela en el tiempo. Cabe mencionar que el famoso esquema DQC1 de Knill-Laflamme [25] se recupera como caso particular de este formalismo (al considerar un qubit como reloj) y que el entrelazamiento sistema tiempo caracteriza el poder entrelazante de un circuito [22]. Por último se puede mencionar su posible aplicación a la problemática de Quantum Machine *Learning*, que ha despertado últimamente un gran interés recientemente [161]. Por el lado de las posibilidades experimentales, se investigarán esquemas más complejos basados en fotones entrelazados en polarización, siguiendo la línea utilizada en [162]. Por último, se profundizará en la simulación de estados historia sistema-tiempo a través de sistemas de materia condensada, en particular cadenas de espines dimerizadas.

Agradecimientos

"Gracias a la vida que me ha dado tanto Me ha dado la risa y me ha dado el llanto Así yo distingo dicha de quebranto Los dos materiales que forman mi canto Y el canto de ustedes que es el mismo canto Y el canto de todos que es mi propio canto."

Violeta Parra

Entendiendo al universo como un gran estado historia, agradezco al mismo por permitirme ser parte de la vida.

Como estados reducidos de "este" quisiera agradecer profundamente:

- En el aspecto académico: a todo el grupo de Información Cuántica de La Plata, y
 en particular a mi director por la predisposición, la libertad para trabajar y el buen
 humor en todo momento y a mi codirector de tesina por ayudarme a terminar la licenciatura e introducirme al grupo de información cuántica. También al grupo del
 Laboratorio de Procesado de Imágenes- UBA por la disponibilidad para colaborar.
- A *amistades y familiares*: particularmente a mis padres por darme la vida, a las madres de mis hijos y en especial a la mamá de mi hijo menor, por a su vez compartir el día a día.
- Y *fundamentalmente* a mis hijos, que condensan el estado más puro y con una simple mirada me recuerdan lo esencial a cada instante.

1. CAMPO FACTORIZANTE EN CADENAS DIMERIZADAS

Consideremos la cadena de dímerizada descripta por el Hamiltoniano

$$H_d = \sum_{i=1}^{n/2} \left[B(s_{2i-1}^z + s_{2i}^z) - \sum_{\mu=x,y,z} J^o_{\mu} s_{2i-1}^{\mu} s_{2i}^{\mu} + J^e_{\mu} s_{2i}^{\mu} s_{2i+1}^{\mu} \right].$$
(1)

donde hemos supuesto un campo uniforme. Aquí J^e_{μ} puede ser considerado como el acoplamiento (débil) entre dímeros y J^o_{μ} el acoplamiento (fuerte) interno. Este sistema obviamente se dimeriza (es decir, se convierte en un arreglo de pares de espines independientes) para $J^e_{\mu} \to 0$.

No obstante, en esta cadena un autoestado separable uniforme ($\theta_i = \theta_j \forall i, j$) se vuelve factible si existe una anisotropía *común* $\chi = \frac{J_y^{\sigma}}{J_x^{\sigma}} \in [0, 1)$ para $\sigma = o, e, y$ el campo se elige como

$$B = \sqrt{\chi} (J_x^o + J_x^e) s, \tag{2}$$

donde *s* es el espín. En una cadena *abierta* debemos simplemente agregar las *correcciones de borde*.

Luego, en un caso tipo ferromagnético $|J_y^{\sigma}| \leq J_x^{\sigma}$ para $\sigma = o, e$, la cadena posee un estado fundamental producto *uniforme* para el campo factorizante (??), *independientemente de la razón* J_x^e/J_x^o (mientras que no se anule), perdiendo así todo vestigio de la estructura dimerizada.

Notemos a su vez que para los acoplamientos a primeros vecinos de (1), el caso antiferromagnético $J_x^{\sigma} < 0 \ \forall \sigma$ puede transformase en el caso previo, a través de rotaciones locales de ángulo π alrededor del eje z para sitios pares (implicando $s_i^{\mu} \rightarrow (-1)^{i+1} s_i^{\mu}$ y por lo tanto $J_{\mu}^{\sigma} \rightarrow -J_{\mu}^{\sigma} \ \forall \sigma$ para $\mu = x, y$). Un autoestado uniforme separable $|\nearrow \nearrow \ldots \rangle \equiv |\theta\theta\ldots\rangle$ en el sistema rotado corresponde entonces a una solución *alternada* $\theta_i = (-1)^{i+1}\theta$ (estado de tipo Neél $|\nearrow \nearrow \ldots \rangle \equiv |\theta, -\theta, \theta, \ldots \rangle$) en el sistema original. Notar que esto es válido para espín *s arbitrario*. La separabilidad en la cadena de espín 1/2, fue discutida en [56, 80], y el caso más general en [55, 57, 163, 164].

Para m = n/2 par, el caso mixto $J_x^o > 0$, $J_x^e < 0$ (o viceversa) también puede reformularse como caso ferromagnético $J_x^\sigma > 0 \forall \sigma$ a través de rotaciones locales de ángulo π alrededor del eje z en los pares correspondientes a sitios pares $(s_{2i+k}^{\mu} \rightarrow (-1)^{i+1} s_{2i+k}^{\mu}$ pa-

ra k = -1, 0 y $\mu = x, y$). La solución uniforme corresponde aquí a $\theta_{2i+k} = (-1)^{i+1}\theta$ para k = -1, 0 en el sistema mixto original, es decir [80, 164] $| \nearrow \nearrow \checkmark \checkmark \ldots \rangle \equiv |\theta, \theta, -\theta, -\theta, \theta, \ldots \rangle$. Luego, para n/2 par podemos siempre asumir $J_x^{\sigma} > 0 \forall \sigma$ en (1).

En el campo factorizante, el estado fundamental será doblemente degenerado y los estados de paridad definida tendrán una concurrencia C uniforme para todo par i, j [55, 56]:

$$C^{\pm} = \frac{(1-\chi^{2s})\chi^{S-2s}}{1\pm\chi^S}, \qquad (3)$$

donde S = ns es el espín total. El alcance del entrelazamiento entres dos espines aumentará a media que el campo se acerca al campo factorizante (2), volviéndose *independiente* de la separación y del alcance del acoplamiento. No obstante, el valor será muy pequeño si χ no es muy cercano a 1 y s no es muy pequeño.

2. Transformación de Jordan-Wigner

En este apéndice se hará una descripción del método de Jordan-Wigner, el cual básicamente permite hacer una fermionización: mapeo entre los estados de espín de la cadena y los números de ocupación de estados de fermiones. Esto permite realizar el cálculo exacto, ya que reduce la matriz a diagonalizar de $2^N \times 2^N$ a $2N \times 2N$.

Solución Exacta de una Cadena de Dímeros en un Campo Externo

A través de la transformación de Jordan-Wigner [89], para un valor *fijo* $p = \pm$ de la paridad global de espín P_z , podemos reescribir al Hamiltoniano de dímeros XY (1) como una forma cuadrática en operadores fermiónicos de creación y aniquilación c_j^{\dagger}, c_j . Notemos que el espacio de Hilbert de un sistema de N espines 1/2 es isomorfo al de un sistema fermiónico con N estados de un fermión accesibles, permitiendo que el número total de fermiones varíe entre 0 y N. Los operadores fermiónicos se definen en términos de los operadores de espín como

$$c_{j}^{\dagger} = s_{j}^{+} \exp[-i\pi \sum_{k=1}^{j-1} s_{k}^{+} s_{k}^{-}]$$
(4)

donde $S_j^+ = S_j^x + iS_j^y$. Se verifica que estos operadores satisfacen exactamente las relaciones de anticonmutación fermiónicas: $[c_j, c_k^{\dagger}]_+ = \delta_{jk}, [c_j, c_k]_+ = 0.$ La transformación inversa está dada por

$$s_{j}^{+} = c_{j}^{\dagger} \exp[i\pi \sum_{k=1}^{j-1} c_{k}^{\dagger} c_{k}]$$
 (5)

Para un campo uniforme B, obtenemos para el caso cíclico,

$$H_d^p = \sum_{j=1}^n \left[B(c_j^{\dagger}c_j - \frac{1}{2}) - \eta_j^p (J_+^{\sigma_j}c_j^{\dagger}c_{j+1} + J_-^{\sigma_j}c_j^{\dagger}c_{j+1}^{\dagger} + h.c.) \right]$$
(6)

donde $n+1 \equiv 1$, $J_{\pm}^{\sigma} = \frac{1}{4} (J_x^{\sigma} \pm J_y^{\sigma})$ y $\eta_j^- = 1$, $\eta_j^+ = 1 - 2\delta_{jn}$. Utilizando transformadas de Fourier discretas dependientes de la paridad para sitios pares e impares,

$$\begin{pmatrix} c_{2j-1}^{\dagger} \\ c_{2j}^{\dagger} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k \in k_{\pm}} e^{-i\omega kj} \begin{pmatrix} c'_{ko} \\ c'_{ke} \end{pmatrix}, \quad \omega = \frac{4\pi}{n}$$

donde $k_+ = \{\frac{1}{2}, \dots, \frac{n}{2} - \frac{1}{2}\}, k_- = \{0, \dots, \frac{n}{2} - 1\}$, podemos reescribir (6) como

$$H_{d}^{p} = \sum_{k \in k_{p}} \{ \sum_{\sigma} Bc'_{k\sigma}^{\dagger} c'_{k\sigma} - [J_{+}^{k} c'_{ko}^{\dagger} c'_{ke} + J_{-}^{k} c'_{ko}^{\dagger} c'_{-ke} + h.c.] \}$$

$$= \sum_{k \in k_{p}} \sum_{\nu = \pm} \lambda_{k}^{\nu} (a_{k\nu}^{\dagger} a_{k\nu} - \frac{1}{2}), \qquad (7)$$

donde $J_{\pm}^k = J_{\pm}^o \pm J_{\pm}^e e^{-i\omega k}$. La forma diagonal final (7) se obtiene gracias a una transformación de Bogoliubov

$$\begin{pmatrix} c'\\c'^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V\\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a\\a^{\dagger} \end{pmatrix}$$
(8)

donde las matrices U y V deben satisfacer las condiciones

$$UU^{\dagger} + VV^{\dagger} = I, \qquad (9)$$

$$UV^t + VU^t = 0, (10)$$

para que se preserven las relaciones de anticonmutación fermiónicas. Explícitamente, la Ec.(8) conduce en este caso a

$$c'^{\dagger}_{k\sigma} = \sum_{\nu=\pm} U^{\nu}_{k\sigma} a^{\dagger}_{k\nu} + V^{\nu}_{k\sigma} a_{-k\nu}$$
(11)

145

donde los elementos de U y V se determinan a través de la diagonalización de bloques de 4×4 :

$$\mathcal{H}_{k} = \begin{pmatrix} B & -J_{+}^{k} & 0 & -J_{-}^{k} \\ -\bar{J}_{+}^{k} & B & \bar{J}_{-}^{k} & 0 \\ 0 & J_{-}^{k} & -B & J_{+}^{k} \\ -\bar{J}_{-}^{k} & 0 & \bar{J}_{+}^{k} & -B \end{pmatrix}$$
(12)

cuyos autovalores son $\pm \lambda_k^+, \pm \lambda_k^-$, con

$$\left(\lambda_{k}^{\pm}\right)^{2} = \Delta \pm \sqrt{\Delta^{2} - |B^{2} - (J_{+}^{k} + J_{-}^{k})(\bar{J}_{+}^{k} - \bar{J}_{-}^{k})|^{2}}$$
(13)

y $\Delta = B^2 + |J_+^k|^2 + |J_-^k|^2$. Es necesario tener en cuenta el signo correcto de λ_k^{\pm} de forma tal que el vacío de los operadores $a_{k\nu}$ posea la paridad de espín P_z adecuada y represente el estado más bajo para esta paridad.

Las correlaciones de espín en el estado más bajo para cada paridad P_z pueden deducirse de las contracciones fermiónicas básicas

$$f_{ij} = \langle c_i^{\dagger} c_j \rangle - \frac{1}{2} \delta_{ij} \tag{14}$$

$$g_{ij} = \langle c_i^{\dagger} c_j^{\dagger} \rangle \tag{15}$$

las cuales pueden obtenerse directamente de la transformada de Fourier inversa de

$$\langle c'_{k\sigma}^{\dagger}c'_{k\sigma'}\rangle = \sum_{\nu} V_{k\sigma}^{\nu}\bar{V}_{k\sigma'}^{\nu}, \qquad (16)$$

$$\langle c'^{\dagger}_{k\sigma} c'^{\dagger}_{-k\sigma'} \rangle = \sum_{\nu} V^{\nu}_{k\sigma} U^{\nu}_{-k\sigma'}.$$
(17)

Luego obtenemos, a través del teorema de Wick,

$$\langle s_i^z \rangle = f_{ii}, \tag{18}$$

$$\langle s_i^z s_j^z \rangle = f_{ii} f_{jj} - f_{ij}^2 + g_{ij}^2,$$
 (19)

y

$$\langle s_i^+ s_j^\mp \rangle = \frac{1}{2} [\det(A_{ij}^+) \pm \det(A_{ij}^-)],$$
 (20)

donde A_{ij}^{\pm} son matrices de $(i-j) \times (i-j)$ cuyos elementos son de la forma

$$(A_{ij}^{\pm})_{pq} = 2(f+g)_{i+p+_{1}^{0},j+q+_{0}^{1}}.$$
(21)

146

De la fórmula (13) se observa que la energía de cuasipartícula λ_k^- se anula para k=0 $(e^{i\omega k}=1)$ cuando

$$B = B_{c2}^{ex} = \frac{1}{2}\sqrt{(\alpha J_x + J_y)(J_x + \alpha J_y)}$$
(22)

y para $k=N/4\,(e^{i\omega k}=-1)$ cuando

$$B = B_{c2}^{ex} = \frac{1}{2}\sqrt{(J_y - \alpha J_x)(J_x - \alpha J_y)}.$$
 (23)

Esta última expresión es real sólo para $\alpha \leq J_y/J_x$ en el caso que estamos considerando $(|J_y| \leq |J_x| \text{ y } \alpha \geq 0)$. Cabe destacar, que los λ_k^- no se anulan para los otros valores de k.

3. Trayectoria de Entrelazamiento Mínimo

Demostración de la cota inferior provista por la Ec. (7.44). En primer lugar, consideramos un tiempo final t_f lo suficientemente pequeño tal que $|\frac{(E_k - E_{k'})t_f}{2}| \leq \pi \forall k \neq k'$. Notar que el overlap $|\langle S_0 | S_{t_f} \rangle|$, Ec. (7.45), no se ve afectada por ninguna traslación $E_k \to E_k + 2j\pi/t_f \forall j \in \mathbb{Z}$, para un dado k. El ángulo $\phi \in [0, \pi/2]$ determinado por este overlap también se puede reescribir como

$$\phi = \arcsin \sqrt{1 - |\langle S_0 | S_{t_f} \rangle|^2}$$
(24)

$$= \arcsin \sqrt{2 \sum_{k \neq k'} |c_k c_{k'}|^2 \sin^2 \frac{(E_k - E_{k'})t_f}{2}}.$$
 (25)

Ahora, es de esperar que el *overlap* entre cualquier par de estados intermedios sea menor que el obtenido entre estados $|S_t^{\min}\rangle = e^{-iH_{\min}t}|S_0\rangle$ a lo largo de la geodésica, tal que (Ec. (7.48)) $|\langle S_t|S_{t'}\rangle| \leq |\langle S_t^{\min}|S_{t'}^{\min}\rangle| = |\cos[\phi \frac{t-t'}{t_f}]|$. Esta desigualdad se verifica dado que la función

$$F(s) = \arcsin\sqrt{2\sum_{k \neq k'} |c_k c_{k'}|^2 \sin^2 \frac{(E_k - E_{k'})t_f s}{2}} - \phi s$$
(26)

donde $s = \left|\frac{t-t'}{t_f}\right| \leq 1$, es una función cóncava de s para $s \in [0, 1]$ y satisface F(0) = F(1) = 0, tal que $F(s) \geq 0 \forall s \in [0, 1]$. Por lo tanto, para tiempo cortos t_f tal que todas las fases relativas no completaron aún un período ($|E_k - E_{k'}|t_f < 2\pi \forall k, k'$), todos los *overlaps* intermedios en la evolución serán menores que aquellos de evoluciones a través de la geodésica, por lo que la entropía $E_2(S, T)$ será mayor que la que se obtiene a lo largo de la trayectoria geodésica.

Para tiempos t_f grandes, la desigualdad (7.44) continua siendo válida pero por un motivo distinto: Si $\left|\frac{(E_k - E_{k'})t_f}{2}\right| > \pi$ para algunos pares k, k', F(s) puede no ser cóncava

y ser incluso negativa para algunos valores de s. Sin embargo, el término relevante de la expresión exacta para $E_2(S,T)$ satisface

$$\frac{\sin^2 \frac{\gamma N}{N-1}}{N^2 \sin^2 \frac{\gamma}{N-1}} \le \frac{\sin^2 \frac{(\gamma - j\pi)N}{N-1}}{N^2 \sin^2 \frac{(\gamma - j\pi)}{N-1}},\tag{27}$$

donde $\gamma = \frac{(E_k - E_{k'})t_f}{2}$ y j es tal que $|\gamma - j\pi| \in [0, \pi/2]$. Esta traslación de la diferencia de energía no afecta al *overlap* (Ec. (25)), pero muestra que la entropía $E_2(S, T)$ para tiempos grandes no será menor que la cota obtenida previamente. En este caso algunas fases relativas pueden haber completado uno o más períodos, pero el efecto final será disminuir el *overlap* promedio y por lo tanto aumentar $E_2(S, T)$.

Bibliografía

- 1. D. Deutsch. «Quantum theory, the Church-Turing Principle and the universal quantum computer». *Proc. R. Soc. Lond. A* 400, 1985, pág. 97.
- P. Shor. «Algorithms for Quantum Computation: Discrete Logarithms and Factoring». Proc. Ann. Symp. Found. Comp. Science, IEEE Press, Ca. 35, 1994, pág. 29.
- L. Grover. «Quantum Mechanichs Helps in Searching for a Needle in a Haystack». *Phys. Rev. Lett.* 79, 1997, pág. 325.
- 4. M. A. Nielsen e I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. 2000.
- S. A. and A. Arkhipov. «A Universal Training Algorithm for Quantum Deep Learning». Proceedings of the forty-third annual ACM symposium on Theory of computing, 2011, págs. 333-342.
- C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres y W. K. Wootters. «Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels». *Phys. Rev. Lett.* 70:13, 1993, págs. 1895-1899. DOI: 10.1103/PhysRevLett.70.1895.
- E. Schrödinger. «Discussion of Probability Relations Between Separated Systems». *Proc. Cambridge Philos. Soc.* 31, 1935. ibid, 32, 446 (1936), págs. 555-563.
- 8. A. Boette, R. Rossignoli, N. Canosa y J. Matera. «Generalized mean field treatment for dimerized spin chains». *Phys. Rev. B* 91, 2015, pág. 064428. DOI: 10. 1103/PhysRevB.91.064428.
- 9. A. Boette, R. Rossignoli, N. Canosa y J. Matera. «Pair entanglement in dimerized spin-s chains». *Phys. Rev. B* 94, 2016, pág. 214403. DOI: 10.1103/PhysRevB.94. 214403.
- 10. D. N. Page y W. K. Wootters. Phys. Rev. D 27, 1983, pág. 2885.
- 11. R. Gambini, R. Porto, J. Pullin y S. Torterolo. *Phys. Rev. D* 79, 2009, 041501(R).
- 12. V. Giovannetti, S. Lloyd y L. Maccone. Phys. Rev. D 92, 2015, pág. 045033.
- 13. E. Moreva y col. Phys. Rev. A 89, 2014, pág. 052122.
- 14. S. Massar, P. Spindel, A. Varón y C. Wunderlich. Phys. Rev. A 92, 2015, 030102(R).
- 15. A. A.-G. J.R. McClean J.A. Parkhill. Proc. Natl. Ac. Sci. U.S.A. 110, 2013, E3901.

- A. Boette, R. Rossignoli, N. Gigena y M. Cerezo. «System-time entanglement in a discrete-time model». *Phys. Rev. A* 93, 2016, pág. 062127. DOI: 10.1103/PhysRevA. 93.062127.
- P. Erker, M. Mitchison, R. Silva, M. Woods, N. Brunner y M. Huber. *Phys. Rev.* X 7, 2017, pág. 031022.
- 18. E. Dias y F. Parisio. Phys. Rev. A 95, 2017, pág. 032133.
- 19. A. Nikolova, G. K. Brennen, T. Osborne, G. Milburn y T. Stace. *Phys. Rev. A* 97, 2018, 030101(R).
- 20. P. Coles, V. Katariya, S. Lloyd, I. Marvian y M. Wilde. arXiv:1805.07772, 2018.
- 21. B. DeWitt. Phys. Rev. D 160, 1967, pág. 1113.
- 22. A. Boette y R. Rossignoli. «History states of systems and operators». *Phys. Rev.* A 98, 3 2018, pág. 032108. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.032108.
- 23. A. Jamiołkowski. Rep. Math. Phys. 3, 1972, pág. 275.
- 24. M. Choi. Linear Algebra Appl. 10, 1975, pág. 285.
- 25. E. Knill y R. Laflamme. Phys. Rev. Lett. 81, 1998, pág. 5672.
- D. Pabon, A. Bordakevich, C. Iemmi, S. Ledesma, L. Rebón, N. Gigena, A. Boette y R. Rossignoli. «System-time entanglement in an optical simulation of parallelin-time quantum evolution», 2018 (En preparación).
- 27. G. Vidal. «Entanglement renormalization.» Phys. Rev. Lett. 2007, 99:220405.
- 28. B. Schumacher. «Quantum coding». *Phys. Rev. A* 51, 4 1995. C.H. Bennett, H. Bernstein, S. Popescu and B. Schumacher, Phys. Rev. A 53 2046 (1996), págs. 2738-2747. DOI: 10.1103/PhysRevA.51.2738. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.51.2738.
- 29. C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin y W. K. Wootters. «Mixed-state entanglement and quantum error correction». *Phys. Rev. A* 54:5, 1996, págs. 3824-3851. DOI: 10.1103/PhysRevA.54.3824.
- 30. A. Wehrl. «General properties of entropy». *Rev. Mod. Phys.* 50, 21978, págs. 221-260. DOI: 10.1103/RevModPhys.50.221. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/ RevModPhys.50.221.
- 31. J. von Neumann. «Wahrscheinlichkeitstheoretischer Aufbau der Quantenmechanik». *Göttinger Nachrichten*, 1927, pág. 245.
- C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres y W. K. Wootters. «Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels». *Phys. Rev. Lett.* 70, 13 1993, págs. 1895-1899. DOI: 10.1103/PhysRevLett.70.1895. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.70.1895.

- R. F. Werner. «Quantum states with Einstein-Podolsky-Rosen correlations admitting a hidden-variable model». *Phys. Rev. A* 40:8, 1989, págs. 4277-4281. DOI: 10. 1103/PhysRevA.40.4277.
- 34. R. Rossignoli y C. T. Schmiegelow. «Entanglement generation resonances in *XY* chains». *Phys. Rev. A* 75:1, 2007, pág. 012320. DOI: 10.1103/PhysRevA.75.012320.
- F. Giraldi y P. Grigolini. «Quantum entanglement and entropy.» *Phys. Rev. A* 64:2, 2001, pág. 032310.
- 36. A. Peres. «Separability Criterion for Density Matrices». *Phys. Rev. Lett.* 77:8, 1996, págs. 1413-1415. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.1413.
- M. Horodecki, P. Horodecki y R. Horodecki. «Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions». *Physics Letters A* 223:1-2, 1996, págs. 1-8. ISSN: 0375-9601. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/S0375-9601(96)00706-2. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960196007062.
- 38. N. Canosa y R. Rossignoli. «Generalized nonadditive entropies and quantum entanglement». *Physical Review Letters* 88:17, 2002, págs. 1704011-1704014.
- 39. R. Rossignoli y N. Canosa. «Generalized entropic criterion for separability». *Phys. Rev. A* 66:4, 2002, pág. 042306. DOI: 10.1103/PhysRevA.66.042306.
- 40. M. A. Nielsen y J. Kempe. «Separable States Are More Disordered Globally than Locally». *Phys. Rev. Lett.* 86:22, 2001, págs. 5184-5187. DOI: 10.1103/PhysRevLett. 86.5184.
- 41. S. Hill y W. Wootters. «Entanglement of a pair of quantum bits». *Phys. Rev. Lett.* 78, 1997, pág. 5022.
- 42. G. Vidal y R. Werner. Phys. Rev. A 65, 2002, pág. 032314.
- K. Zyczkowski, P. Horodecki, A. Sanpera y M. Lewenstein. *Phys. Rev. A* 58, 1998, pág. 883.
- 44. K. Zyczkowski. Phys. Rev. A 60, 1999, pág. 3496.
- 45. «Statistical theory of superlattices». Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 150:871, 1935, págs. 552-575. ISSN: 0080-4630. DOI: 10.1098/rspa.1935.0122. eprint: http://rspa.royalsocietypublishing. org/content/150/871/552.full.pdf. URL: http://rspa.royalsocietypublishing. org/content/150/871/552.
- 46. R. Rossignoli y A. Plastino. «Extended mean-field treatments and information theory». *Phys. Rev. A* 42:1, 1990, pág. 2065. DOI: 1.
- R. R. y P. A. «Generalized statistical self-consistent approach». *Phys. Rev. C* 40:1, 1989, pág. 1798. DOI: 1.

Bibliografía

- 48. R. Rossignoli, A. Plastino y H. G. Miller. «Finite-temperature mean-field and higher-order approaches in canonical ensembles». *Phys. Rev. C* 43:1, 1991, pág. 1599. DOI: 1.
- 49. M. Dantziger, B. Glinsmann, S. Scheffler, B. Zimmermann y P. J. Jensen. «Inplane dipole coupling anisotropy of a square ferromagnetic Heisenberg monolayer». *Phys. Rev. B* 66, 9 2002, pág. 094416. DOI: 10.1103/PhysRevB.66.094416. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.094416.
- 50. I. Etxebarria, L. Elcoro y J. M. Perez-Mato. «Generalized boundary conditions for periodic lattice systems: Application to the two-dimensional Ising model on a square lattice». *Phys. Rev. E* 70, 6 2004, pág. 066133. DOI: 10.1103/PhysRevE. 70.066133. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.70.066133.
- 51. D. Yamamoto. «Correlated cluster mean-field theory for spin systems». *Phys. Rev. B* 79, 14 2009, pág. 144427. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.144427. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.144427.
- 52. D. DiVincenzo, D. Bacon, J. Kempe, G. Burkard y K. Whaley. «Universal quantum computation with the exchange interaction». *Nature* 408, 2000. DOI: 10. 1038/35042541.
- D. Loss y D. P. DiVincenzo. «Quantum computation with quantum dots». *Phys. Rev. A* 57:1, 1998. Phys. Rev. B 59, 2070 (1999)., págs. 120-126. DOI: 10.1103 / PhysRevA.57.120.
- 54. S. C. Benjamin y S. Bose. «Quantum Computing with an Always-On Heisenberg Interaction». *Phys. Rev. Lett.* 90:24, 2003. Phys. Rev. A 70, 032314 (2004)., pág. 247901. DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.247901.
- 55. N. Canosa, R. Rossignoli y J. M. Matera. «Separability and entanglement in finite dimer-type chains in general transverse fields». *Phys. Rev. B* 81:5, 2010, pág. 054415. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.054415.
- R. Rossignoli, N. Canosa y J. M. Matera. «Entanglement of finite cyclic chains at factorizing fields». *Phys. Rev. A* 77:5, 2008, pág. 052322. DOI: 10.1103/PhysRevA. 77.052322.
- R. Rossignoli, N. Canosa y J. M. Matera. «Factorization and entanglement in general XYZ spin arrays in non-uniform transverse fields». *Phys. Rev. A* 80, 2009, pág. 062325. DOI: 10.1103/PhysRevA.80.062325.
- 58. F. T. Arecchi, E. Courtens, R. Gilmore y H. Thomas. «Atomic Coherent States in Quantum Optics». *Phys. Rev. A* 6:6, 1972, págs. 2211-2237. DOI: 10.1103 / PhysRevA.6.2211.

- 59. G. Müller y R. E. Shrock. «Implications of direct-product ground states in the one-dimensional quantum xyz and xy spin chains.» *Physical Review B* 32, 1985, págs. 5845-5850.
- 60. W. K. Wootters. «Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits.» *Physical Rev. Lett.* 80, 1998, págs. 2245-2248.
- 61. R. Rossignoli y N. Canosa. «Thermal dependence of pairing correlations in small superconducting particles in a finite magnetic field». *Phys. Rev. B* 63:13, 2001, pág. 134523. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.134523.
- R. Rossignoli y N. Canosa. «Violation of majorization relations in entangled states and its detection by means of generalized entropic forms». *Phys. Rev. A* 67:4, 2003, pág. 042302. DOI: 10.1103/PhysRevA.67.042302.
- 63. L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh y V. Vedral. Rev. Mod. Phys. 80, 2008, pág. 517.
- 64. J. Eisert, M. Cramer y M. B. Plenio. «Colloquium: Area laws for the entanglement entropy». *Rev. Mod. Phys.* 82:1, 2010, págs. 277-306. DOI: 10.1103/RevModPhys. 82.277.
- 65. T. J. Osborne y M. A. Nielsen. «Entanglement in a simple quantum phase transition». *Phys. Rev. A* 66:3, 2002, pág. 032110. DOI: 10.1103/PhysRevA.66.032110.
- 66. S. Haroche y J. Raimond. Exploring the Quantum. 2006.
- 67. D. Porras y J. Cirac. Phys. Rev. Lett. 92, 2004, pág. 207901.
- 68. I. Georgescu, S. Ashhab y F. Nori. Rev. Mod. Phys. 86, 2014, pág. 153.
- 69. R. Blatt y C. Roos. Nat. Phys. 8, 2012, pág. 277.
- C. Senko, P. Richerme, J. Smith, A. Lee, I. Cohen, A. Retzker y C.Monroe. *Phys. Rev. X* 5, 2015, pág. 021026.
- 71. R. Barends y col. *Nature* 534, 2016, pág. 222.
- 72. R. Barends y col. Phys. Rev. Lett. 111, 2013, pág. 080502.
- 73. M. Lewenstein, A. Sanpera y V. Ahufinger. *Ultracold Atoms in Optical Lattices*. 2012.
- 74. (a) J. Perk, H. Capel, M. Zuilhof y T. Siskens. *Phys. A* 81, 1975, pág. 319; (b) T. Siskens, H. Capel y J. Perk. *Phys. Lett. A* 53, 1975, pág. 21.
- 75. (a) J. Perk, H. Capel y T. Siskens. *Phys. A* 89, 1977, pág. 304; (d) J. Perk y H. Capel. *Phys. A* 92, 1978, pág. 163; (e) J. Perk y H. Au-Yang. *J. Stat. Phys.* 135, 2009, pág. 599; (d) J. Perk y H. Capel. *Phys. A* 92, 1978, pág. 163; (e) J. Perk y H. Au-Yang. *J. Stat. Phys.* 135, 2009, pág. 599.
- 76. (a) E. Kutznetsova y E. Fel'dman. *JETP. Lett.* 102, 2006, pág. 882; (b) E. Fel'dman y M. Rudavets. *JETP. Lett.* 81, 2005, pág. 47; (c) S. Doronin, A. Pyrkov y E. Fel'dman. *JETP. Lett.* 85, 2007, pág. 519.

- 77. (a) C. Majundar y D. Gosh. J. Math. Phys. 10, 1969, pág. 1388; (b) C. Majundar y D. Gosh. J. Math. Phys. 10, 1969, pág. 1399; (c) B. Shastry y B. Sutherland. Phys. Rev. Lett. 47, 1981, pág. 964.
- (a) J. Sirker, A. Herzog, A. Oles y P. Horsch. *Phys. Rev. Lett.* 101, 2008, pág. 157204;
 (b) A. Herzog, P. Horsch, A. Oles y J. Sirker. *Phys. Rev. B* 84, 2011, pág. 134428.
- 79. (a) C. Lamas y J. Matera. Phys. Rev. B 92, 2015, pág. 115111; (b) J. Matera y C. Lamas. J. Phys.: Condens. Matter 26, 2014, pág. 326004.
- 80. G. L. Giorgi. «Ground-state factorization and quantum phase transition in dimerized spin chains». *Phys. Rev. B* 79:6, 2009, pág. 060405. DOI: 10.1103/PhysRevB. 79.060405.
- 81. H. Schmidt. J. Phys. A 38, 2005, pág. 2123.
- D. Kaszlikowski, W. Son y V. Vedral. «Dimensionality-induced entanglement in macroscopic dimer systems». *Phys. Rev. A* 76:5, 2007, pág. 054302. DOI: 10.1103/ PhysRevA.76.054302.
- M.-G. Hu, K. Xue y M.-L. Ge. «Exact solution of a Yang-Baxter spin- 1/2 chain model and quantum entanglement». *Phys. Rev. A* 78:5, 2008, pág. 052324. DOI: 10. 1103/PhysRevA.78.052324.
- P. Merchant, B. Normand, K. Kramer, M. Boehm, D. McMorrow y C. Rüegg. Nature Phys. 10, 2014, pág. 373.
- 85. V. Ohanyan, O. Rojas, J. Strečka y S. Bellucci. Phys. Rev. B 92, 2015, pág. 214423.
- 86. (a) T. Ramos, H. Pichler, A. Daley y P. Zoller. *Phys. Rev. Lett.* 113, 2014, pág. 237203;
 (b) A. Glaetzle, M. Damonte, R. Nath, C. Gross, I. Bloch y P. Zoller. *Phys. Rev. Lett.* 114, 2015, pág. 173002; (c) I. Bloch, J. Dalibard y W. Zwerger. *Rev. Mod. Phys.* 80, 2006, pág. 885.
- 87. J. M. Matera y C. A. Lamas. «Phase diagram study of a dimerized spin-S zig-zag ladder». *Journal of Physics: Condensed Matter* 26:32, 2014, pág. 326004. URL: http://stacks.iop.org/0953-8984/26/i=32/a=326004.
- C. A. Lamas y J. M. Matera. «Dimerized ground states in spin S frustrated systems». Phys. Rev. B 92, 11 2015, pág. 115111. DOI: 10.1103/PhysRevB.92.115111.
 URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.115111.
- E. Lieb, T. Schultz y D. Mattis. «Two soluble models of an antiferromagnetic chain». *Annals of Physics* 16:3, 1961, págs. 407-466. ISSN: 0003-4916. DOI: DOI: 10.1016/0003-4916(61)90115-4. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/B6WB1-4DF520B-1J6/2/9fa7a2285d82e7db7386ac37243fod77.
- J. M. Matera, R. Rossignoli y N. Canosa. «Evaluation of ground-state entanglement in spin systems with the random phase approximation». *Phys. Rev. A* 82:5, 2010, pág. 052332. DOI: 10.1103/PhysRevA.82.052332.

- 91. C. Rovelli. Quantum Gravity. 2004.
- 92. K. V. Kuchar. Int. J. Mod. Phys. D 20, 2011, pág. 3.
- 93. C. J. Isham. Int. J. Mod. Phys. D 20, 1993, pág. 157.
- 94. J. Tamborino. SIGMA 8, 2012, pág. 017.
- 95. M. Bojowald, P. A. Höhn y A. Tsobanjan. Phys. Rev. D 83, 2011, pág. 125023.
- 96. P. A. Höhn, E. Kubalová y A. Tsobanjan. Phys. Rev. D 86, 2012, pág. 065014.
- 97. W. K. Wootters. Int. J. Theor. Phys. 23, 1984, pág. 701.
- 98. C. Rovelli. Phys. Rev. D 42, 1990, pág. 2638.
- 99. C. R. A. Connes. Class. Quant. Grav. 11, 1994, pág. 2899.
- 100. C. J. Isham. J. Math. Phys. 35, 1994, pág. 2157.
- 101. C. B. E. Castro-Ruiz F. Giacomini. arXiv:1507.01955, 2015.
- 102. L. M. V. Giovannetti S. Lloyd. Phys. Rev. D 92, 2015, pág. 045033.
- 103. E. Moreva, M. Gramegna, G. Brida, L. Maccone y M. Genovese. «Quantum time: Experimental multitime correlations». *Phys. Rev. D* 96, 10 2017, pág. 102005.
 DOI: 10.1103/PhysRevD.96.102005. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.96.102005.
- 104. A. Schild. arXiv:1808.04643, 2018.
- 105. P. A. Hoehn y A. Vanrietvelde. arXiv:1810.04153, 2018.
- 106. T. Martinelli y D. O. Soares-Pinto. arXiv:1808.04209, 2018.
- 107. S. H. J.B. Hartle. Phys. Rev. D 28, 1983, pág. 2960.
- 108. A. A.-G. J.R. McClean. Phys. Rev. A 91, 2015, pág. 012311.
- 109. W. W. V. Coffman J. Kundu. Phys. Rev. A 61, 2000, pág. 052306.
- 110. N. Gigena y R. Rossignoli. Phys. Rev. A 90, 2014, pág. 042318.
- 111. T. Tanaka y col. Phys. Rev. A 85, 2012, pág. 042316.
- 112. H. N. T. Tanaka G. Kimura. Phys. Rev. A 87, 2013, pág. 012303.
- 113. R. Bhatia. Matrix Analysis. 1997.
- 114. J. A. Dembo T.M. Cover. IEEE Trans. on Inf. Th. 37, 1991, pág. 1501.
- 115. T. Przebinda y col. IEEE Trans. on Inf. Th. 47, 2001, pág. 2086.
- 116. L. Hirschman. Amer. J. Math. 79, 1957, pág. 152.
- 117. P. S. D.L. Donoho. SIAM J. Appl. Math. 49, 1989, pág. 906.
- 118. P. S. S. Massar. Phys. Rev. Lett. 100, 2008, pág. 190401.

- 119. R. Werner. Phys. Rev. A 40, 1989, pág. 4277.
- 120. C. Bennett, D. DiVincenzo, J. Smolin y W. Wootters. Phys. Rev. A 54, 1996, pág. 3824.
- 121. H. Ollivier y W. Zurek. Phys. Rev. Lett. 88, 2001, pág. 017901.
- 122. L. Henderson y V. Vedral. Phys. Rev. A 34, 2001, pág. 6899.
- 123. V. Vedral. Phys. Rev. Lett. 90, 2003, pág. 050401.
- 124. K. Modi y col. Rev. Mod. Phys. 84, 2012, pág. 1655.
- R. Rossignoli, N. Canosa y L. Ciliberti. «Generalized entropic measures of quantum correlations». *Phys. Rev. A* 82:5, 2010, pág. 052342. DOI: 10.1103/PhysRevA. 82.052342.
- 126. A. C. Doherty, P. Parrilo y F. Spedalieri. Phys. Rev. A 69, 2004, pág. 022308.
- 127. Y. Huang. New. J. Phys. 16, 2014, pág. 033027.
- 128. S. Hill y W. Wootters. Phys. Rev. Lett. 78, 1997, pág. 5022.
- 129. W. Wootters. Phys. Rev. Lett. 80, 1998, pág. 2245.
- 130. T. Osborne y F. Verstraete. Phys. Rev. Lett. 96, 2006, pág. 220503.
- 131. P. Zanardi, C. Zalka y L. Faoro. Phys. Rev. A 62, 2000, pág. 030301.
- 132. M. Nielsen y col. Phys. Rev. A 67, 2003, pág. 052301.
- 133. T. Prosen e I. Pizorn. Phys. Rev. A 73, 2007, pág. 032316.
- 134. M. Musz, M. Kuś y K. Zyczkowski. Phys. Rev. A 87, 2013, pág. 022111.
- 135. H. Weyl. The Theory of Groups and Quantum Mechanics. 1950.
- 136. D. Galetti y A. D. T. Piza. Physica A 149, 1988, págs. 267-282.
- 137. A. Asadian, P. Erker, M. Huber y C. Klöckl. *Phys. Rev. A* 94, 2016, 010301(R).
- 138. N. Canosa y R. Rossignoli. Phys. Rev. A 67, 2003, pág. 042302.
- J. Anandan e Y. Aharonov. «Geometry of quantum evolution». *Phys. Rev. Lett.* 65, 1990, pág. 1697.
- 140. H. Laba y V. Tkachuk. Cond. Matt. Phys. 20, 2017, pág. 13003.
- 141. I. T. L. Mandelstam. J. Phys. USSR 9, 1945, pág. 249.
- 142. K. Battacharyya. J. Phys. A 16, 1983, pág. 2993.
- 143. D. Brody y L. Hughston. *Phys. Rev. Lett.* 77, 1996, pág. 2851.
- 144. W. Wootters. Phys. Rev. D 23, 1981, pág. 357.
- 145. R. Griffiths. Phys. Rev. A 71, 2005, pág. 042337.
- 146. W. Dür, M. Hein, J. Cirac y H. Briegel. Phys. Rev. A 72, 2005, pág. 052326.

- 147. M. Jiang, S. Luo y S. Fu. Phys. Rev. A 87, 2013, pág. 022310.
- 148. M. Renes, R. Blume-Kohout, A. Scott y C. M. Caves. J. Math. Phys. 45, 2004, pág. 2171.
- 149. X. Wang, Z. Sun y Z. Wang. Phys. Rev. A 79, 2009, pág. 012105.
- 150. C. Yu, X. Yi, H. Song y H. Fan. Phys. Rev. A 87, 2013, pág. 022322.
- 151. A. Márquez, C. Iemmi, I. Moreno, J. A. Davis, J. Campos y M. J. Yzuel. «Quantitative prediction of the modulation behavior of twisted nematic liquid crystal displays based on a simple physical model». *Optical Engineering* 40:11, 2001, págs. 2558-2564. DOI: 10.1117/1.1412228. URL: http://dx.doi.org/10.1117/1.1412228.
- 152. A. Márquez, I. Moreno, C. Iemmi, A. Lizana, J. Campos y M. J. Yzuel. «Mueller-Stokes characterization and optimization of a liquid crystal on silicon display showing depolarization». *Opt. Express* 16:3, 2008, págs. 1669-1685. DOI: 10.1364/0E.
 16.001669. URL: http://www.opticsexpress.org/abstract.cfm?URI=0e-16-3-1669.
- 153. M. A. Solís-Prosser, A. Arias, J. J. M. Varga, L. Rebón, S. Ledesma, C. Iemmi y L. Neves. «Preparing arbitrary pure states of spatial qudits with a single phase-only spatial light modulator». *Opt. Lett.* 38:22, 2013, págs. 4762-4765. DOI: 10.1364/ 0L.38.004762. URL: http://ol.osa.org/abstract.cfm?URI=ol-38-22-4762.
- 154. G. B. Lemos, J. De Almeida, S. Walborn, P. S. Ribeiro y M. Hor-Meyll. «Characterization of a spatial light modulator as a polarization quantum channel». *Physical Review A* 89:4, 2014, pág. 042119.
- 155. M. Malik, M. Mirhosseini, M. P. J. Lavery, J. Leach, M. J. Padgett y R. W. Boyd. «Direct measurement of a 27-dimensional orbital-angular-momentum state vector». *Nature Communications* 5, 3115, 2014, pág. 3115. DOI: 10.1038/ncomms4115. URL: http://dx.doi.org/10.1038/ncomms4115.
- 156. Q. Pears Stefano, L. Rebón, S. Ledesma y C. Iemmi. «Determination of any pure spatial qudits from a minimum number of measurements by phase-stepping interferometry». *Phys. Rev. A* 96, 6 2017, pág. 062328. DOI: 10.1103/PhysRevA.96. 062328. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.96.062328.
- 157. S.-Y. Lu y R. A. Chipman. «Interpretation of Mueller matrices based on polar decomposition». J. Opt. Soc. Am. A 13:5, 1996, págs. 1106-1113. DOI: 10.1364/JOSAA.13.001106. URL: http://josaa.osa.org/abstract.cfm?URI=josaa-13-5-1106.
- 158. E. Castro-Ruiz, F. Giacomini y Č. Brukner. PNAS 114, 2017, E2303-E2309.
- 159. D. Else, B. Bauer y C. Nayak. Phys. Rev. Lett. 117, 2016, pág. 090402.
- A. Peres y D. R. Terno. «Quantum information and relativity theory». *Rev. Mod. Phys.* 76:1, 2004, pág. 93. DOI: 10.1103/RevModPhys.76.93.

- 161. M. B. G. Verdon J. Pye. «A Universal Training Algorithm for Quantum Deep Learning». *arXiv:1806.09729*, 2018.
- 162. L. Rebón, R. Rossignoli, J. Varga, N. Gigena, N. Canosa, C. Iemmi y S. Ledesma. «Conditional purity and quantum correlation measures in two qubit mixed states». *Journal Phys. B* 49, 2016, pág. 215501.
- 163. S. M. Giampaolo, G. Adesso y F. Illuminati. «Theory of Ground State Factorization in Quantum Cooperative Systems». *Phys. Rev. Lett.* 100:19, 2008, pág. 197201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.197201.
- 164. S. M. Giampaolo, G. Adesso y F. Illuminati. «Separability and ground-state factorization in quantum spin systems». *Phys. Rev. B* 79:22, 2009, pág. 224434. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.224434.