



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

DINÁMICA Y ESTACIONARIEDAD EN EL  
MODELO EXTENDIDO DE BOSE-HUBBARD  
PARA DOS SITIOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

Alan Josep Barrios de la Cruz

TUTOR

Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez



Ciudad Universitaria, Ciudad de México, 2021



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



*A mi madre.*

# Resumen

El análisis de la dinámica de un sistema cuántico puede ser extremadamente complejo respecto a las características que se deseen estudiar. Particularmente, cuando se trata de limitaciones fundamentales como el *principio de incertidumbre de Heisenberg* se vuelve importante conocer los recursos de los cuales dispone un sistema cuántico, como el valor esperado de su energía o la dispersión de esta misma; de igual manera resulta deseable el conocer la relación, si es que existe, entre estos recursos y otras propiedades del sistema como la producción de entrelazamiento, o ciertos parámetros particulares como los tiempos de evolución entre estados distinguibles. Este trabajo presenta un estudio exhaustivo del comportamiento de estas características en un sistema de baja dimensionalidad conformado por un arreglo de dos sitios ocupado por dos bosones sin espín, que evoluciona unitariamente en el tiempo. Partiendo de la interpretación geométrica de la condición de ortogonalidad sobre estados puros propagados en el tiempo, se presenta una clasificación general de estados del sistema y se examina la evolución de tres estados particulares bajo cuatro Hamiltonianos distintos, constituidos por diferentes procesos en el sistema que consideran tunelaje entre sitios de una y dos partículas. Por otro lado, se estima y discute el comportamiento del entrelazamiento entre sitios a lo largo de la propagación estudiando la evolución de la concurrencia para sistemas bipartitos. Complementariamente, se aborda la relación existente entre los recursos energéticos del sistema y los tiempos de ortogonalidad para las tres configuraciones de estados revisados al introducir las cotas fundamentales presentadas por Mandelstam-Tamm y Margolus-Levitin. Finalmente, se discute la influencia de los distintos procesos en el sistema sobre las propiedades antes revisadas.

# Agradecimientos

Deseo expresar mis más sinceros agradecimientos al Dr. Francisco J. Sevilla, quien con paciencia benedictina se encargó de dirigir, comentar y discutir el desarrollo del presente trabajo, manteniéndose siempre al pendiente con la excelente calidez humana y el profesionalismo que como físico y como mentor lo caracterizan. De la misma forma me gustaría agradecer a la Dra. Rosario Paredes y la Dra. Ana María Cetto del IF-UNAM, así como a la Dra. Marcela Dolores Grether y al Dr. Victor Manuel Velázquez de la Facultad de Ciencias de la UNAM, por sus opiniones y comentarios para enriquecer esta tesis. Finalmente me gustaría agradecer a la Dra. Andrea Valdés del IF-UNAM por el tiempo prestado a la discusión de conceptos que resultaron fundamentales para la exposición de este estudio.

Esta investigación fue realizada gracias al **Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT)** de la UNAM bajo el proyecto **IN110120**. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida.

# Índice general

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Representación de Estados</b>	<b>4</b>
2.1	Sistemas de Muchas Partículas . . . . .	4
2.2	Representación de Fock . . . . .	7
2.3	Representación de Operadores . . . . .	9
2.4	Matriz de Densidad . . . . .	11
2.5	Sistemas Bipartitos . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Hamiltoniano de Bose-Hubbard</b>	<b>15</b>
3.1	Construcción del Hamiltoniano . . . . .	15
3.2	Funciones de Wannier . . . . .	17
3.3	Clasificación de Procesos . . . . .	19
3.4	Problema de Eigenvalores . . . . .	22
<b>4</b>	<b>Dinámica del Sistema</b>	<b>26</b>
4.1	Propagación Unitaria . . . . .	26
4.2	Tiempo entre Estados Distinguibles . . . . .	28
4.3	El Límite de Rapidez Cuántica . . . . .	34
<b>5</b>	<b>Entrelazamiento entre Sitios</b>	<b>38</b>
5.1	Concurrencia como Medida de Entrelazamiento . . . . .	39
5.2	Efectos en el Valor de $\tau$ . . . . .	53
<b>6</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>59</b>
<b>A</b>	<b>Desarrollo Numérico</b>	<b>62</b>
A.1	Diagonalización del Hamiltoniano . . . . .	62
A.2	Cálculo de $\tau$ . . . . .	68
A.3	Cálculo de la Concurrencia . . . . .	69

# Índice de figuras

2.1	Diagrama de construcción de los estados del espacio de Fock para dos sitios a partir del estado nulo $ 0, 0\rangle$ , y los operadores de creación $\hat{a}_i^\dagger$ y aniquilación $\hat{a}_i$ . . . . .	9
3.1	Diagrama del sistema de dos sitios como una trampa formada por un potencial de dos pozos. El Hamiltoniano del sistema (ec. (3.32)) incluye procesos de tunelaje entre sitios de un bosón ( $J$ y $J_\mu$ ) y tunelaje a pares ( $K$ ), además de contribuciones energéticas que promueven la localización de las partículas. . . . .	22
4.1	Es posible descomponer el estado (4.7) como una función compleja en $\mathbb{C}^3$ , donde cada componente puede ser representada en $\mathbb{R}^2$ . En (4.1a) se compara la parte real de un estado inicial $ \psi(0)\rangle$ , $\text{Re}( \psi(0)\rangle)$ , con la parte correspondiente del mismo estado después de ser propagado durante un tiempo $t$ , mientras que en (4.1b) se compara su parte imaginaria, $\text{Im}( \psi(0)\rangle)$ . Puede observarse para este caso que el estado inicial tiene una parte compleja nula, y después de ser propagado dicha componente adquiere una magnitud definida dentro del plano formado por los estados $ G_2\rangle$ y $ G_3\rangle$ . . . . .	28
4.2	Distribuciones posibles para estados del sistema de dos sitio con dos bosones en el plano adimensional formado $(\omega_{21}\tau, \omega_{32}/\omega_{21})$ . El gradiente de colores en las franjas señala los valores de $\alpha$ para cada punto del plano según la ecuación (4.27), mientras que los las « $\times$ » en rojo indican las distribuciones para las cuales $\alpha = 1$ . Marcadores adicionales señalan algunas de las distribuciones $\{r_i\}$ indicadas en el cuadro 4.1. . . . .	32
4.3	Histogramas para los conteos de las incidencias de los distintos valores de $\alpha$ en el espacio de muestreo $[0, 10] \times [0, 2\pi]$ sobre mallado de $5 \times 10^3$ puntos con: <b>(a)</b> $\omega_{32}/\omega_{21} \approx 1$ , <b>(b)</b> $\omega_{32}/\omega_{21} \approx 2$ , <b>(c)</b> $\omega_{32}/\omega_{21} \approx 5$ y <b>(d)</b> $\omega_{32}/\omega_{21} \approx 6.5$ . La columna de color azul denota el intervalo de $\alpha$ en el cual se encuentra la mediana de cada caso. . . . .	36

- 4.4 Comportamiento de la mediana para el conjunto de distribuciones asociado a un valor de  $\omega_{32}/\omega_{21}$ . El aumento en el valor de  $\alpha$  para la mediana refleja que la cantidad de distribuciones posibles con  $\alpha > 0$  incrementa conforme  $\omega_{32}/\omega_{21}$  es mayor. Las distribuciones asociadas a  $\omega_{32}/\omega_{21}$  par componen conjuntos con una cantidad mayor de elementos donde  $\alpha < 1$  respecto a valores de  $\omega_{32}/\omega_{21}$  cercanos, por lo que la mediana correspondiente se presenta en mínimos locales. Las medianas del conjunto de distribuciones mostrados en la Figura 4.3 se encuentran marcados por ( $\blacklozenge$ ) de color rojo. . . . . 37
- 5.1 Evolución de la concurrencia para el estado  $|\psi_1(0)\rangle$ . En (a) la superficie verde corresponde al cálculo de  $C_{01}$  bajo la propagación producida con distintos valores de  $J/\varepsilon$  en el Hamiltoniano. En (b) el comportamiento de la concurrencia se representa por curvas de nivel donde las regiones con un tono rojo oscuro corresponden a zonas donde el entrelazamiento es mayor, mientras que la franja de color azul oscuro alrededor de  $t/\tau = 1$  denota la región donde el estado propagado alcanza una forma ortogonal separable  $|\psi_1(\tau)\rangle$ . . . . . 44
- 5.2 Evolución temporal de la concurrencia como función del parámetro adimensional  $J/\varepsilon_1$ . En (a) y (c) el estado inicial es  $|\psi_2(0)\rangle$ , mientras que (b) y (d) muestran la información equivalente para el estado inicial  $|\psi_3(0)\rangle$ . En ambos casos el límite  $\tilde{\varepsilon}_1 \rightarrow \infty$  produce valores de  $C_{01}$  tales que  $\sqrt{13}/4 \leq C_{01} \leq \sqrt{21}/4$ , donde el mínimo corresponde a  $t = \pi/\omega_{32}$ , mientras que el máximo a  $t = \pi/2\omega_{32}$ . . . . . 45
- 5.3 Evolución en el tiempo de  $C_{01}$  para el estado propagado  $|\psi_1(t)\rangle$  bajo la configuración de Hamiltoniano  $\hat{H}_P$ . (a) y (b) muestran las superficies producidas en los casos  $\tilde{K} = 0.8$  con  $\tilde{J}$  variable y  $\tilde{J} = 0.8$  con  $\tilde{K}$  como variable en el intervalo  $[0.1, 1000]$ , respectivamente. (c) y (d) son los planos gradiente para dichas superficies. La línea punteada vertical en (c) corresponde al valor  $\tilde{J}_M = (2\tilde{K}^2 + 1/2)^{1/2}$  donde  $\phi$  como función de  $\tilde{J}$  es máximo, mientras que en (d) corresponde a  $\tilde{K}_M = (\tilde{J}^2/2 + 1/8)^{1/2}$  donde  $\phi(\tilde{K})$  alcanza su mayor valor posible. . . . . 50
- 5.4 Evolución en el tiempo de  $C_{01}$  para el estado propagado  $|\psi_2(t)\rangle$  bajo la configuración  $\hat{H}_P$ . (a) corresponde a la superficie producida bajo  $\tilde{K} = 0.8$  con  $\tilde{J}$  variable, mientras que en (b) los parámetros son  $\tilde{J} = 0.8$  con  $\tilde{K}$  como variable. (c) y (d) son los planos gradiente producido por la magnitud de  $C_{01}$  para ambas superficies, respectivamente. La línea punteada vertical en (c) corresponde al valor  $\tilde{J}_M = (2\tilde{K}^2 + 1/2)^{1/2}$ , mientras que en (d) corresponde a  $\tilde{K}_M = (\tilde{J}^2/2 + 1/8)^{1/2}$ . . . . . 51

5.5 Evolución en el tiempo de  $C_{01}$  para el estado propagado  $|\psi_3(t)\rangle$  bajo la configuración de Hamiltoniano  $\hat{H}_P$ . (a) corresponde a la superficie producida bajo la configuración de parámetros  $\tilde{K} = 0.8$  con  $\tilde{J}$  variable, mientras que en (b) los parámetros son  $\tilde{J} = 0.8$  con  $\tilde{K}$  como variable en el intervalo  $[0.1, 1000]$ . (c) y (d) son los planos gradiente producido por la magnitud de  $C_{01}$  para ambas superficies, respectivamente. La línea punteada vertical en (c) corresponde al valor  $\tilde{J}_M = (2\tilde{K}^2 + 1/2)^{1/2}$  donde  $\phi$  como función de  $\tilde{J}$  es máximo, mientras que en (d) corresponde a  $\tilde{K}_M = (\tilde{J}^2/2 + 1/8)^{1/2}$  donde  $\phi$  alcanza su mayor valor posible como función de  $\tilde{K}$ . . . . . 52

5.6 En (a) se grafican los tiempos de ortogonalidad obtenidos de forma numérica para los estados  $|\psi_1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle$  y  $|\psi_3\rangle$  bajo el Hamiltoniano  $\hat{H}_{S1}$  como función de  $\tilde{\varepsilon}_1$ . En (b) se muestran los valores de  $\tau$  para los mismos estados pero bajo  $\hat{H}_P$  con  $\tilde{K} = 0.8$  y  $J_0 = 0$ , la recta roja punteada indica el valor mínimo de  $\omega_{32}$ . (c) contiene la información equivalente para  $\hat{H}_P$  con  $\tilde{J} = 0.8$  y  $J_0 = 0$ , la recta roja punteada indica mínimo de  $\omega_{32}$ , ahora como función de  $\tilde{K}$ . Los tiempos de ortogonalidad están adimensionalizados por el parámetro  $\tau_D = \pi\hbar/2\varepsilon_1$  en todos los casos. 55

5.7 Proyección de valores de  $\phi(\tilde{J}, \tilde{K})$  sobre el plano  $[0.1, 1000] \times [0.1, 1000]$ . La recta punteada vertical corresponde a la configuración con de  $\hat{H}_P$  con  $\tilde{K} = 0.8$ , mientras que la horizontal denota los valores de  $\phi$  obtenidos con  $\tilde{J} = 0.8$ ; estas son las configuraciones bajo las cuales los tiempos de ortogonalidad de las Figuras 5.6b y 5.6c fueron calculados, respectivamente. La curva de color azul claro señala los valores de  $(\tilde{K}, \tilde{J})$  para los cuales  $\partial\phi/\partial\tilde{J} = 0$ , de la misma manera la curva amarilla indica los valores para los cuales  $\partial\phi/\partial\tilde{K} = 0$ . En regiones con  $\tilde{J} \ll \tilde{K}$  y  $\tilde{K} \ll \tilde{J}$ , así como cerca del origen,  $\phi(\tilde{J}, \tilde{K})$  tiende a  $\pi/2$ ; mientras que toma valores más cercanos a  $\pi$  conforme los parámetros crecen alrededor de las curvas  $\tilde{J}(\tilde{K}) = (2\tilde{K}^2 + 1/2)^{1/2}$  y  $\tilde{J}(\tilde{K}) = (2\tilde{K}^2 - 1/4)^{1/2}$ . 58

A.1 Diagrama de flujo para la construcción numérica de la matriz asociada al Hamiltoniano  $\hat{H}$ . . . . . 64



# Capítulo 1

## Introducción

Los primeros planteamientos que afirmaban la factibilidad de manipular un sistema cuántico para realizar operaciones computables en el sentido de las máquinas de Turing, pueden ser remontados a los trabajos de Paul Benioff [1, 2] y Yuri Manin [3] de finales de los años 70's, quienes sostenían que era posible modelar los componentes fundamentales de un computador convencional mediante diferentes estados cuánticos que evolucionan bajo un Hamiltoniano definido. Un par de años más tarde, Feynman en una cátedra impartida en 1982 [4], al discutir las complicaciones que representaba para la electrónica de silicio el replicar sistemas cuánticos por su naturaleza probabilista, acuñó el término «*computador cuántico*» para referirse a un sistema capaz de subsanar esta deficiencia y que, de manera similar a las ideas de Benioff y Manin, debía responder por sí mismo a una naturaleza cuántica con principios bien definidos. Aunque la discusión de Feynman no afirmaba que el cómputo cuántico fuera de momento viable en la práctica, y mucho menos que fuera una opción para mejorar el computo convencional; algunos entusiastas comenzaron a adaptar y diseñar algoritmos que pudieran aprovechar las propiedades de un sistema cuántico ideal [5-7] y, en 1994, Peter Shor presentó un algoritmo de esta índole orientado a la descomposición de números enteros en factores [8], que no sólo mostraba una aplicación práctica de cómputo cuántico, si no la posibilidad de mejorar los tiempos de cálculo significativamente respecto a su equivalente convencional. El trabajo de Shor atrajo gran interés hacia el desarrollo de técnicas experimentales cada vez más sofisticadas que permitieran manipular sistemas cuánticos de forma precisa y, en última instancia, permitieran corroborar estos resultados de la teoría.

En los últimos 20 años, desde que el algoritmo de Shor fue puesto en práctica de forma experimental por primera vez [9], el desarrollo de tecnología dedicada a la manipulación de sistemas cuánticos ha avanzado con rapidez y la variedad de arreglos cuánticos experimentales que permiten realizar cómputo se ha robustecido significativamente al implementar diferentes principios físicos como el confinamiento de iones o de átomos neutros en trampas ópticas [10, 11], el uso de técnicas de resonancia magnética nuclear en moléculas [9, 12], el fenómeno de superconductividad en arreglos

de estado sólido [13], e incluso la formación de condensados de tipo Bose-Einstein [14], entre otros. Si bien la composición experimental de estos arreglos es distinta, su comportamiento como sistema físico y los fundamentos a partir de los cuales pueden usarse para realizar cómputo se encuentran sujetas a las reglas de la mecánica cuántica; en este sentido resulta prudente preguntar: ¿en qué forma la naturaleza física restringe estos sistemas?, y ¿cómo propiedades cuánticas como el *entrelazamiento* pueden usarse para mejorar el cómputo en el sistema?

Con la intención de enriquecer el entendimiento sobre las implicaciones de estas preguntas, este trabajo presenta un estudio detallado de la dinámica de un sistema cuántico de baja dimensionalidad que puede ser tomado como ejemplo de uno de los elementos básicos del cómputo cuántico: una *puerta cuántica*. Para ello el sistema es planteado como un arreglo físico unidimensional de tipo reticular con dos sitios idénticos ocupados por dos bosones sin espín que evolucionan de manera unitaria (reversible) en el tiempo. El enfoque del estudio está centrado en analizar el tiempo mínimo necesario para que el sistema evolucione hacia una forma ortogonal si es inicialmente preparado en un estado puro con una estructura definida, es decir, el tiempo de propagación entre dos estados puros *distinguibiles*. Este tiempo es importante pues corresponde al tiempo de operación de la puerta cuántica que transforma al estado inicial en un estado final mediante el operador de propagación. También se discuten las cotas que impone la mecánica cuántica sobre dichos tiempos y se revisan los cambios en el entrelazamiento entre sitios producidos durante la propagación.

Aunque este análisis se desarrolla alrededor de las restricciones impuestas por el Hamiltoniano del sistema que considera tanto un *potencial externo de confinamiento* como un *potencial de interacción* a pares entre partículas, las formas explícitas de dichos potenciales serán omitidas, así como la declaración explícita de otras funciones auxiliares como las *funciones de Wannier*. De esta manera, al presentar un intervalo de valores para los parámetros del Hamiltoniano se supondrá que las integrales correspondientes (ver sección 3.3) existen y están bien definidas. Si el lector así lo desea, puede consultar algunas maneras de plantear estos potenciales y funciones de forma explícita en [15, 16], mientras que puede encontrar propuestas para elaboración experimental en [17, 18], por otro lado, una enriquecedora discusión sobre el uso de este tipo de arreglos para realizar operaciones cuánticas puede hallarse en [19-21].

El escrito está compuesto de la siguiente manera:

El Capítulo 2 presenta el sistema de dos sitios con dos bosones desde la perspectiva de sistemas cuánticos de muchas partículas, haciendo uso de la representación de números de ocupación y del formalismo de segunda cuantización para representar los estados cuánticos del sistema, así como los operadores de campo que permiten llevar operadores de interés a una estructura consistente. De forma complementaria se incluye la representación de estados en matrices de densidad y se presenta la notación para estados de sistemas bipartitos.

En el Capítulo 3 se construye un Hamiltoniano general en el espacio de números de ocupación a partir de dos potenciales de interacción: uno de confinamiento y otro de interacción entre pares de partículas. Se clasifican los distintos procesos que componen el Hamiltoniano, y se muestran soluciones al problema de valores propios que presenta este mismo sobre la base de Fock del sistema.

El Capítulo 4 muestra la estructura general del estado propagado después de introducir un operador de propagación unitaria y se plantea la condición de ortogonalidad, a partir de la cuál se realiza una clasificación general de las distribuciones de probabilidad  $\{r_i\}$  asociadas a los posibles del sistema de acuerdo a sus tiempos de ortogonalidad  $\tau$ . Se introduce también el límite de rapidez cuántico (QSL, del inglés “quantum speed limit”) como la cota inferior al tiempo de vida de un estado antes de alcanzar una estructura ortogonal cuando se propaga en el tiempo, se discuten dos expresiones para este valor, a saber, la cota de Mandelstam-Tamm [22] y la de Margolus-Levitin [23].

En el Capítulo 5 se discute el comportamiento de las correlaciones entre los sitios del arreglo a partir de la estimación de su concurrencia como medida de entrelazamiento bajo cuatro configuraciones especiales del Hamiltoniano general. También se discuten los efectos de las distintas configuraciones sobre los tiempos de ortogonalidad de estados iniciales particulares. Finalmente el Capítulo 6 presenta las conclusiones más relevantes del trabajo, así como comentarios complementarios.

# Capítulo 2

## Representación de Estados

Para poder estudiar del sistema cuántico de dos sitios con dos bosones, se presenta un desarrollo previo con las bases teóricas que permiten abordar el problema. Estos fundamentos se encuentran divididos en los dos capítulos siguientes. Mientras que el Capítulo 3 se centra en la construcción del Hamiltoniano en el formalismo de segunda cuantización, en este capítulo se exponen de forma sencilla las representaciones esenciales de los estados del sistema cuántico, buscando esclarecer la relación existente entre la representación convencional de vectores estado y la representación de Fock en números de ocupación. Se refiere también la representación de estados del sistema en matrices de densidad y se define la pureza de un estado cuántico. Complementariamente, se indica la manera en que operadores cuánticos convencionales pueden ser construidos en estas representaciones a partir de operadores convenientes, a saber, los operadores de creación  $\hat{a}^\dagger$  y aniquilación  $\hat{a}$ .

### 2.1. Sistemas de Muchas Partículas

Fundamentalmente, un sistema cuántico de una sola partícula se estudia a través de una función de onda  $\Psi(\vec{r}, t)$  que contiene toda la *información* acerca de su dinámica, y que es solución a la ecuación de Schrödinger dada por

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

donde  $V(\vec{r}, t)$  describe el potencial al cual se encuentra sujeta la partícula con posición  $\vec{r}$  en el sistema,  $m$  es su masa y  $\hbar = 1.054571817 \times 10^{-34}$  J·s es la constante de Planck reducida. La naturaleza de los sistemas cuánticos es mayormente probabilista y mientras que  $\Psi(\vec{r}, t)$  no posee una interpretación física directa,  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r}$  se interpreta como la probabilidad de que la partícula se encuentre en una vecindad de  $\vec{r}$  en el tiempo  $t$ . Para sistemas de  $N$  partículas idénticas, la información acerca de su

dinámica aún se encuentra contenida en una función de onda que resuelve la ecuación (2.1), pero que considera las contribuciones individuales del conjunto de partículas con posiciones  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$ ; es decir

$$\Psi(\vec{r}) \implies \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N). \quad (2.2)$$

con lo cual  $|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N$  ahora debe interpretarse como la probabilidad de hallar al sistema en la localidad  $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  dentro de un espacio de configuraciones  $3N$ -dimensional. La mecánica cuántica plantea que cada función de onda  $\Psi(\vec{r}, t)$  puede ser representada por un vector estado  $|\Psi\rangle$  dentro de un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ , y que basta con conocer una base completa de vectores estado  $\{|\psi_i\rangle\}$  del espacio de Hilbert de una sola partícula para construir una representación de la función de onda  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  como el vector estado  $|\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_N\rangle$  expresado de la forma

$$|\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_N\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes |\psi_3\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle, \quad (2.3)$$

que corresponde al producto tensorial de los estados de la base de  $\mathcal{H}$  ocupados por cada partícula individual del sistema. En consecuencia, si  $\mathcal{H}_i$  denotara el conjunto de estados posibles para cada partícula, el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}^N$  al cual pertenecen los estados del sistema de  $N$  partículas puede expresarse como el producto exterior

$$\mathcal{H}^N = \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_i. \quad (2.4)$$

Por otro lado, la función de onda  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  contiene información adicional sobre el tipo de partículas que conforman el sistema a través de su simetría. Esta característica de la función de onda se obtiene al considerar que el conjunto de partículas que componen el sistema es *indistinguible*, es decir que resulta imposible identificar cuál partícula ocupa una vecindad  $\vec{r}_i + d\vec{r}_i$  determinada ya que todas son equivalentes, en este sentido una permutación entre un par de coordenadas dentro de la función de onda debe resultar en una nueva función de onda que difiere de la original en a lo más un factor constante  $\delta$  tal que la ecuación (2.1) permanece invariante. Por ejemplo, si se realiza una permutación entre las coordenadas  $\vec{r}_i$  y  $\vec{r}_j$ , la función de onda resultante debe satisfacer

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_i, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N) = \delta \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_j, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N), \quad (2.5)$$

de manera que si se realiza una segunda permutación entre el mismo par de coordenadas, la función de onda original debe ser recuperada con un escalamiento por un factor de  $\delta^2$ . Ya que el sistema no fue modificado, la función de onda debe ser idéntica, con lo cual debe cumplirse que  $\delta = \pm 1$ . El valor de este parámetro ante permutaciones discretas de pares de coordenadas en la función de onda se llama *simetría* de la función de onda y discrimina entre dos tipos de partículas en sistemas cuánticos, los bosones ( $\delta = 1$ ) y los fermiones ( $\delta = -1$ ). Para que los vectores estado del sistema de  $N$  partículas consideren esta propiedad es necesario replantear la representación

(2.3) para los vectores que componen la base de  $\mathcal{H}^N$ , esto puede lograrse expresando cada uno de estos elementos de la forma

$$|\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_N\rangle = \frac{1}{\prod_k \sqrt{n_k!}} \hat{S}_\pm \bigotimes_{i=1}^N |\psi_i(\vec{r}_i)\rangle, \quad (2.6)$$

con  $n_k$  el número de veces que un vector estado con índice  $k$  de la base de una sola partícula aparece en el producto, y  $\hat{S}_\pm$  el operador de simetría en el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}^N$ . Puede obtenerse una interpretación intuitiva del operador  $\hat{S}_\pm$  al identificar el elemento a la derecha de (2.6) como

$$\frac{1}{\prod_k \sqrt{n_k!}} \hat{S}_\pm \bigotimes_{i=1}^N |\psi_i(\vec{r}_i)\rangle = \begin{vmatrix} |\psi_1(\vec{r}_1)\rangle & |\psi_1(\vec{r}_2)\rangle & \dots & |\psi_1(\vec{r}_i)\rangle \\ |\psi_2(\vec{r}_1)\rangle & |\psi_2(\vec{r}_2)\rangle & \dots & |\psi_2(\vec{r}_i)\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\psi_N(\vec{r}_1)\rangle & |\psi_N(\vec{r}_2)\rangle & \dots & |\psi_N(\vec{r}_i)\rangle \end{vmatrix}, \quad (2.7)$$

con lo cual el operador de simetría  $\hat{S}_\pm$  permite asociar cada vector producto de la base a un determinante de Slater si la simetría es impar ( $\hat{S}_-$ , para fermiones), o a un permanente si la simetría es par ( $\hat{S}_+$  para bosones). Esta correspondencia resulta particularmente útil para el caso de sistemas con fermiones ya que si  $|\psi_i(\vec{r}_k)\rangle = |\psi_j(\vec{r}_i)\rangle$ , es decir, si dos fermiones se encuentran en el mismo estado, el determinante de Slater correspondiente es nulo y  $|\Psi(r_1, \dots, r_N)\rangle = 0$ , satisfaciendo el principio de exclusión de Pauli.

Por otro lado, la incidencia de estados  $n_k$  de la expresión (2.6) puede ser interpretada de forma equivalente como el número partículas que ocupan un mismo estado con índice  $k$  de la base de una sola partícula en la expresión del vector estado del sistema de  $N$  partículas, restringiendo así  $n_k = 0, 1$  para fermiones y  $n_k = 1, 2, \dots, N$  para bosones. Esta magnitud será fundamental para la representación de estados de Fock en la Sección 2.2. Finalmente, la forma general del vector estado asociado a la función de onda del sistema de  $N$  partículas  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  es la superposición

$$|\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)\rangle = \sum_{\{i\}} C_{1,\dots,N} |\psi_1(\vec{r}_1)\rangle \otimes |\psi_2(\vec{r}_2)\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N(\vec{r}_N)\rangle \quad (2.8)$$

donde la suma corre sobre las diferentes combinaciones de vectores estado en la base de  $\mathcal{H}^N$  y los coeficientes complejos  $C_{1,\dots,N}$  corresponden a las proyecciones del vector estado global sobre los estados de la base de una sola partícula. Vale la pena resaltar que, pese a que la construcción de estos vectores estados es adecuada según la teoría, resulta apenas tratable en la práctica aún para cuando  $N$  es de unas cuantas partículas. Si la función de onda para el sistema de una sola partícula es una función compleja en un espacio 3-dimensional, la función de onda del sistema de  $N$  partículas debe ser asumida como una función compleja en el espacio de configuraciones  $3N$ -dimensional, y por tanto (2.1) debe resolverse en términos de estas nuevas  $3N$  variables. En la siguiente sección se presenta una alternativa para replantear la manera en que estos estados pueden ser abordados.

## 2.2. Representación de Fock

Si bien la ecuación (2.6) permite una descripción completa de los vectores estado del sistema de  $N$  partículas, esta representación se vuelve poco adecuada en el sentido pragmático ya que si se desea calcular, por ejemplo, la proyección entre dos vectores estado descritos de la forma (2.8), es necesario calcular por lo menos  $N! \times N!$  productos diferentes entre los estados de la base de  $\mathcal{H}$ . La *representación de Fock* o representación en números de ocupación es una herramienta originada dentro del campo de la materia condensada que resulta muy útil cuando la estructura del sistema obedece cierta periodicidad y es posible trabajar sobre una base de vectores estado *localizados* como, por ejemplo, las funciones de Wannier, que serán presentadas más adelante.

La representación de Fock puede construirse a partir de la relación que existe entre los elementos de la base del sistema de una sola partícula,  $\{|\psi_i\rangle\}$ , y el número de veces que cada uno de estos aparece en la expresión de los vectores estado (2.6), donde únicamente los estados ocupados de la base resultan relevantes, es decir, los vectores  $|\psi_i\rangle$  que no describen el estado actual de una partícula dentro del estado global resultan irrelevantes. Esta relación es denotada directamente por los números de ocupación  $n_i$  para cada  $|\psi_i\rangle$ , de manera que, en un sistema de dimensión  $K$ , es posible reescribir la información de cada vector estado de la base de  $\mathcal{H}^N$  según la siguiente correspondencia

$$\frac{1}{\prod_k \sqrt{n_k!}} \hat{S}_\pm \bigotimes_{i=1}^K |\psi_{n_i}(\vec{r}_i)\rangle \implies |n_1, n_2, n_3, \dots, n_K\rangle, \quad (2.9)$$

es decir, los estados producto son representados por nuevos estados cuya notación en *kets* contiene en cada entrada el número de ocupación asociado a cada elemento de  $\{|\psi_i\rangle\}$ , donde la posición de cada número se da según el orden de esta base. Ya que el estudio que aquí se expone considera únicamente sistemas aislados, es necesario agregar la condición de conservación de partículas en el sistema, implicando que

$$\sum_{i=1}^K n_i = N, \quad (2.10)$$

donde  $n_i$  refiere de forma indistinta al número de partículas en el sistema que ocupan el estado individual  $|\psi_i\rangle$ , o a la cantidad de veces que este mismo estado aparece en el estado producto (2.6). Para garantizar la consistencia entre las representaciones es requisito que estados ortogonales y unitarios en la representación usual sean expresados por vectores ortogonales y unitarios en la representación de números de ocupación, esto implica que, dados dos vectores arbitrarios en la base de  $\mathcal{H}^N$  representados por  $|n_1, \dots, n_i, \dots, n_K\rangle$  y  $|n'_1, \dots, n'_i, \dots, n'_K\rangle$ , debe cumplir

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots, n_K | n'_1, \dots, n'_i, \dots, n'_K \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \cdots \delta_{n_i, n'_i} \cdots \delta_{n_K, n'_K}, \quad (2.11)$$

con  $\delta_{n_j, n'_j}$  es una delta de Kronecker asociada a la entrada  $j$ -ésima de los vectores. La condición (2.11) permite construir una representación completa de los elementos en

el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}^N$ , la cual es conocida en conjunto como el *espacio de Fock*,  $\mathcal{F}$ . Complementariamente, en la base de  $\mathcal{F}$  se cumple la relación de completéz

$$\sum_{\{|n_1, \dots, n_K\rangle\}} |n_1, \dots, n_K\rangle \langle n_1, \dots, n_K| = \mathbb{I}, \quad (2.12)$$

donde  $\mathbb{I}$  es la matriz identidad en  $M_{K \times K}(\mathbb{R})$  y la suma corre sobre todos los vectores que componen la base. Bajo esta nueva estructura resulta útil introducir un par de operadores no Hermitianos que, como se verá en la sección 2.3, resultan fundamentales para construir la mayor parte de los operadores de interés del sistema, estos son los operadores de creación  $\hat{a}_i^\dagger$  y aniquilación  $\hat{a}_i$ , que transforman un estado de  $\mathcal{F}$  llevándolo a otro cuyo número de ocupación corresponde al número original  $n_i$  aumentando o disminuido en una unidad, respectivamente (para el caso de un sistema, por ejemplo, ver Figura 2.1). En términos de estos operadores puede definirse al operador de población como  $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ , cuyo valor propio es el número de ocupación  $n_i$ . La acción explícita de estos operadores sobre los elementos de  $\mathcal{F}$  puede obtenerse al notar que cada vector de su base debe estar normalizado, y que  $\hat{a}_i = (\hat{a}_i^\dagger)^\dagger$ . Si se supone, por ejemplo, que  $\hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_K\rangle = A_{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_K\rangle$  con  $A_{n_i}$  un coeficiente real, puede verificarse que la siguiente expresión

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots, n_K | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i | n_1, \dots, n_i, \dots, n_K \rangle = A_{n_i}^2, \quad (2.13)$$

corresponde, por la definición del operador de población  $\hat{n}_i$ , a la ecuación

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots, n_K | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i | n_1, \dots, n_i, \dots, n_K \rangle = n_i, \quad (2.14)$$

de donde se puede concluir que  $A_{n_i} = \sqrt{n_i}$ , y el operador de aniquilación puede definirse respecto a los vectores de la representación de números de ocupación como

$$\hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_K\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_K\rangle, \quad (2.15)$$

Partiendo de este resultado puede obtenerse una expresión equivalente para el operador de creación  $\hat{a}_i^\dagger$ , después de reescribir al estado  $\hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_K\rangle$  mediante la relación (2.12) como

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_K\rangle = \sum_{\{|n'_1, \dots, n'_K\rangle\}} \sqrt{n'_i} \delta_{n_1, n'_1} \cdots \delta_{n_i, n'_i - 1} \cdots \delta_{n_K, n'_K} |n'_1, \dots, n'_K\rangle, \quad (2.16)$$

donde para obtener un resultado no nulo debe cumplirse que  $n'_i = n_i + 1$ , de manera que el estado resultante de la operación satisface la ecuación

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_K\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_K\rangle, \quad (2.17)$$

La simetría ante permutaciones de los vectores de estado en la representación clásica se conserva al garantizar que los operadores para sitios distintos  $\hat{a}_j$  y  $\hat{a}_k$ , así como sus respectivos conjugados,  $\hat{a}_j^\dagger$  y  $\hat{a}_k^\dagger$ , conmutan; no así cuando estos mismos operadores corresponden a un mismo sitio, como puede observarse de (2.15) y (2.17) si se considera el conmutador  $[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] = \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  operando bajo un estado arbitrario de  $\mathcal{F}$ ,

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots, n_K | [\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] | n_1, \dots, n_i, \dots, n_K \rangle = 1, \quad (2.18)$$

Las propiedades anteriores garantizan que los estados en el espacio de Fock conservan la simetría de la representación convencional y se sintetizan en las conocidas *relaciones de conmutación* para bosones,

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{i,j}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \quad (2.19)$$

más aún, la estructura de los operadores de creación y aniquilación dentro de la representación de números de ocupación permite construir cualquier estado en la base de  $\mathcal{F}$  al agregar un estado *vacío* abstracto  $|0, \dots, 0, \dots, 0\rangle$  que representa una configuración en la que ninguno de los estados de una sola partícula está ocupado, y a partir del cual sucesivas operaciones de creación o aniquilación llevan a vectores en el espacio de ocupación (ver figura 2.1). Este resultado se traduce en que cualquier estado en la base de  $\mathcal{F}$  puede expresarse de la siguiente manera:

$$|n_1, \dots, n_K\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! \dots n_k!}} (\hat{a}_K^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{a}_1^\dagger)^{n_K} |0, \dots, 0\rangle. \quad (2.20)$$

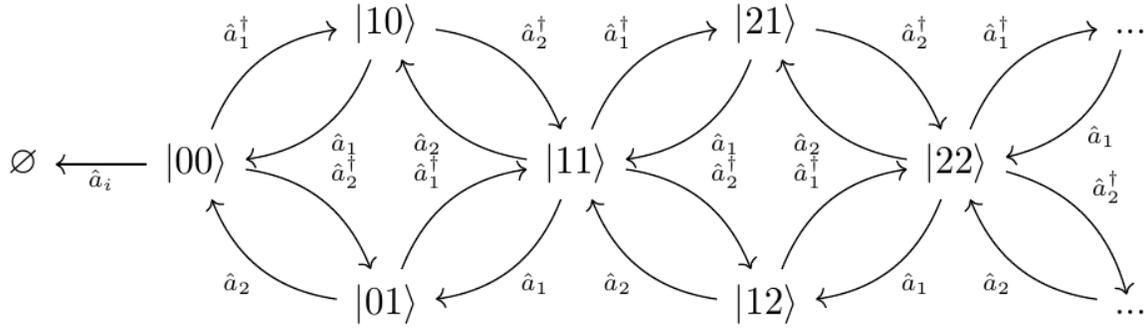


Figura 2.1: Diagrama de construcción de los estados del espacio de Fock para dos sitios a partir del estado nulo  $|0, 0\rangle$ , y los operadores de creación  $\hat{a}_i^\dagger$  y aniquilación  $\hat{a}_i$ .

## 2.3. Representación de Operadores

Ya que la representación de Fock denota los vectores estado de  $\mathcal{H}^N$  en términos de la incidencia de los estados individuales de  $\mathcal{H}$  en lugar del producto explícito de los mismos, es necesario para garantizar la consistencia matemática de la estructura que los operadores convencionales a través de los cuales se obtiene información del sistema sean reformulados para poder operar sobre los elementos del espacio de Fock. Para ello supóngase  $\hat{O}$ , un operador arbitrario asociado al sistema de  $N$  partículas en la representación usual, en un sistema sin interacción dicho operador puede ser representado como una superposición de operadores individuales  $\hat{o}_i$  asociados a la acción de la  $i$ -ésimo partícula del sistema. Considérese  $\hat{o}$  el operador equivalente asociado a una partícula arbitraria tal que su representación matricial en la base de estados de una sola partícula  $\{|\psi_i\rangle\}$  está dada por

$$\hat{o} = \sum_{\mu, \eta} o_{\mu\eta} |\psi_\mu\rangle \langle \psi_\eta|, \quad (2.21)$$

donde  $o_{\mu\eta}$  corresponden a los elementos de matriz del operador representado sobre esta base y están dados como

$$o_{\mu\eta} = \langle \psi_\mu | \hat{O} | \psi_\eta \rangle, \quad (2.22)$$

así, con (2.21) la forma del operador para una sólo partícula, el operador equivalente para el sistema de  $N$  partículas puede expresarse como la suma de las contribuciones individuales, tal que si  $\vec{r}_j$  es el vector de posición de la  $j$ -ésima partícula, entonces en la representación convencional el operador  $\hat{O}$  es

$$\hat{O} = \sum_{j=1}^N \sum_{\mu,\eta} o_{\mu\eta} |\psi_\mu(\vec{r}_j)\rangle \langle \psi_\eta(\vec{r}_j)|. \quad (2.23)$$

Ahora es necesario transformar los elementos  $|\psi_\mu(\vec{r}_j)\rangle \langle \psi_\eta(\vec{r}_j)|$  escritos en la representación usual a la representación de Fock, para ello basta verificar cómo la suma de dichos elementos actúa sobre un estado arbitrario  $|F_K\rangle = |n_1, \dots, n_\mu, \dots, n_\eta, \dots, n_K\rangle$ , reescrito a partir de (2.9)

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N |\psi_\mu(\vec{r}_j)\rangle \langle \psi_\eta(\vec{r}_j)| F_K\rangle &= \sum_{j=1}^N |\psi_\mu(\vec{r}_j)\rangle \langle \psi_\eta(\vec{r}_j)| \frac{1}{\prod_k \sqrt{n_k!}} \hat{S}_+ \bigotimes_{i=1}^K |\psi_i(\vec{r}_j)\rangle \\ &= \frac{1}{\prod_k \sqrt{n_k!}} \sum_{j=1}^N \hat{S}_+ |\psi_\mu(\vec{r}_j)\rangle \langle \psi_\eta(\vec{r}_j)| \bigotimes_{i=1}^K |\psi_i(\vec{r}_j)\rangle, \end{aligned} \quad (2.24)$$

Dado que los elementos de la base de estados son ortonormales, la suma de vectores producto en (2.24) sólo tendrá elementos no nulos cuando  $i = \eta$ , y ya que  $\langle \psi_\eta(\vec{r}_j) | \psi_\eta(\vec{r}_j) \rangle = 1$ ,  $n_\eta$  se verá reducido en una unidad, mientras que para los mismo elementos  $n_\mu$  aumentará en una unidad. Así la suma sobre  $j$  es en realidad una suma de  $n_\eta$  veces el mismo vector producto, y usando las expresiones (2.15) y (2.17) se tiene

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N |\psi_\mu(\vec{r}_j)\rangle \langle \psi_\eta(\vec{r}_j)| F_K\rangle &= \frac{n_\eta}{\prod_k \sqrt{n_k!}} \hat{S}_+ |\psi_\mu(\vec{r}_j)\rangle \otimes |\psi_1(\vec{r}_j)\rangle \cdots \otimes |\psi_\eta(\vec{r}_j)\rangle \cdots \otimes |\psi_K(\vec{r}_j)\rangle \\ &= \frac{n_\eta \sqrt{n_\mu + 1}}{\sqrt{n_1! \cdots (n_\mu + 1)! \cdots}} \hat{S}_+ |\psi_\mu(\vec{r}_j)\rangle \cdots \otimes |\psi_\eta(\vec{r}_j)\rangle \cdots \otimes |\psi_K(\vec{r}_j)\rangle \\ &= \frac{n_\eta \sqrt{n_\mu + 1}}{\sqrt{n_\eta}} |n_1, \dots, n_\mu + 1, \dots, n_\eta - 1, \dots, n_K\rangle \\ &= \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\eta |F_K\rangle, \end{aligned} \quad (2.25)$$

con lo cual se establece una correspondencia directa entre los elementos  $|\psi_\mu(\vec{r}_j)\rangle \langle \psi_\eta(\vec{r}_j)|$  y este par de operadores en  $\mathcal{F}$ ,

$$\sum_{j=1}^N |\psi_\mu(\vec{r}_j)\rangle \langle \psi_\eta(\vec{r}_j)| = \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\eta, \quad (2.26)$$

en consecuencia, es posible reescribir el operador  $\hat{O}$  de (2.23) a partir de los operadores de creación y aniquilación, tal que cualquier operador individual extendido al sistema de  $N$  partículas puede expresarse como

$$\hat{O} = \sum_{\mu,\eta} o_{\mu\eta} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\eta. \quad (2.27)$$

Ya que este estudio considera potenciales de interacción a pares (ver Capítulo 3) es relevante mencionar que mediante un razonamiento análogo al arriba expuesto, también es posible expresar los operadores que actúan sobre pares de partículas a partir de  $\hat{a}_j^\dagger$  y  $\hat{a}_i$ . Puede verse que si  $\hat{t}(\vec{r}_\gamma, \vec{r}_\sigma)$  es un operador arbitrario que caracteriza alguna interacción por pares, este puede expresarse en la representación convencional como

$$\hat{t} = \sum_{i,j,k,l} t_{i,j,k,l} |\psi_i\rangle |\psi_j\rangle \langle \psi_k| \langle \psi_l| \quad (2.28)$$

donde nuevamente  $t_{i,j,k,l}$  son los elementos matriciales del operador sobre la base de una partícula que, aprovechando la relación entre vectores estado y funciones de onda, están dados por

$$t_{i,j,k,l} = \int \int \psi_i^*(\vec{r}_\gamma) \psi_j^*(\vec{r}_\sigma) \hat{t}(\vec{r}_\gamma, \vec{r}_\sigma) \psi_k(\vec{r}_\gamma) \psi_l(\vec{r}_\sigma) d\vec{r}_\sigma d\vec{r}_\gamma, \quad (2.29)$$

nuevamente, considerando que la contribución total al sistema se descompone como la suma de las contribuciones de cada par individual, puede sumarse cada contribución de pares no idénticos de bosones tal que el operador equivalente  $\hat{T}$  para  $N$  partículas es de la forma

$$\hat{T} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma \neq \gamma} \sum_{i,j,k,l} t_{i,j,k,l}(\vec{r}_\gamma, \vec{r}_\sigma) |\psi_i(\vec{r}_\gamma)\rangle |\psi_j(\vec{r}_\sigma)\rangle \langle \psi_k(\vec{r}_\gamma)| \langle \psi_l(\vec{r}_\sigma)|. \quad (2.30)$$

Si se procede de forma análoga al caso de operadores de una sola partícula, identificando la acción de la suma de elementos  $|\psi_i\rangle |\psi_j\rangle \langle \psi_k| \langle \psi_l|$  sobre un estado arbitrario en la representación de Fock, eventualmente emerge la siguiente relación

$$\sum_{\sigma \neq \gamma} |\psi_i(\vec{r}_\gamma)\rangle |\psi_j(\vec{r}_\sigma)\rangle \langle \psi_k(\vec{r}_\gamma)| \langle \psi_l(\vec{r}_\sigma)| = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l, \quad (2.31)$$

que será de vital importancia más adelante, al construir el Hamiltoniano de Bose-Hubbard para un sistema de  $N$  bosones.

## 2.4. Matriz de Densidad

A pesar de que la formulación de Fock presenta de forma más compacta la información sobre configuración del sistema cuántico, esta sigue basándose en el efecto de operadores determinados sobre vectores estado característicos, como los que conforman su base y sus posibles combinaciones lineales; sin embargo, no siempre es posible

en la práctica *preparar* un sistema cuántico tal que su configuración quede totalmente determinada por alguna de dichas combinaciones de estados. Resulta conveniente para tratar algunos problemas, tales como el estudio de sistemas multipartitos, el reformular la representación matemática de los estados cuánticos a una estructura más robusta. Supóngase que el espacio de Hilbert de un sistema cuántico tiene por base al conjunto  $\{|\psi_{ij}\rangle\}$ , con una probabilidad  $\sqrt{p_{ij}}$  asociada a su estado con índice  $ij$ , la descripción más completa de su configuración corresponde a la superposición de estos vectores estado, pesados por sus respectivas probabilidades, la información del estado total formado también puede representarse por la *matriz de densidad*  $\rho_i$  correspondiente, dada por

$$\rho_i = \sum_j p_{ij} |\psi_{ij}\rangle \langle \psi_{ij}|. \quad (2.32)$$

Por su estructura, (2.32) también es referida como el operador de densidad  $\hat{\rho}_i$  y, dado que  $i$  denota el índice de la  $i$ -ésima configuración posible,  $\rho_i$  puede ser llamada propiamente *el  $i$ -ésimo estado posible del sistema*. En la definición (2.32) se ha introducido de forma discreta la noción de que es posible describir cualquier estado  $\rho_i$  si se conoce el *ensemble* que conforman los estados de la base y sus *probabilidades cuánticas* correspondientes,  $\{|\psi_{ij}\rangle, \sqrt{p_{ij}}\}$ , por lo que el estado general del sistema puede ser descrito de manera natural como la combinación de las  $i$  configuraciones posibles pesadas por sus *probabilidades clásicas*,  $p_i$ , tal que la matriz de densidad total con la información del sistema puede escribirse como

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i = \sum_{i,j} p_i p_{ij} |\psi_{ij}\rangle \langle \psi_{ij}|. \quad (2.33)$$

Se dice que  $\rho$  es un *estado mezclado* si para  $p_i \neq 1$ , no puede ser reducido a una simple superposición de estados de la forma (2.32). A su vez, los estados  $\rho_i$  son llamados *estados puros* ya que basta con conocer su descomposición sobre elementos de la base para determinarlos completamente. El concepto de *estado mezclado* no debe confundirse con la construcción de estados por *principio de superposición* [24], pues estados puros también pueden ser expresados como la superposición de elementos de alguna base adecuada. Por otro lado, hay que señalar que aunque una matriz de densidad  $\rho$  contenga la información asociada a un *estado mezclado* dado, esta misma puede expandirse de la forma (2.33) en una gran variedad de configuraciones distintas [25], por lo que puede representar la información de estados diferentes. La matriz de densidad como operador resulta ser Hermítico,  $\rho = \rho^\dagger$ , semidefinido positivo, y satisface la condición

$$\text{Tr}(\rho) = \sum_{j=0}^K \langle \psi_j | \rho | \psi_j \rangle = 1, \quad (2.34)$$

donde  $\text{Tr}(\rho)$  es la traza de la matriz y  $|\psi_j\rangle$  es un vector arbitrario en  $\mathcal{F}$ . Puede demostrarse de forma sencilla que si  $\rho$  corresponde a un estado puro, la matriz asociada es idempotente, con lo cual un criterio suficiente para clasificar un estado dado del sistema como *estado puro* es que satisfaga

$$\text{Tr}(\rho^2) = 1. \quad (2.35)$$

Esta propiedad, junto con la capacidad de  $\rho$  para representar también estados de sistemas compuestos será recuperada más adelante cuando se aborde la *correlación* entre subsistemas.

## 2.5. Sistemas Bipartitos

La formulación de los estados del sistema según (2.8) permite representar al sistema entero como un conjunto de subsistemas a partir de la construcción de su espacio de Hilbert. El ejemplo más sencillo de esto es considerar el sistema global como el agregado de dos subsistemas con espacios de Hilbert independientes  $\mathcal{H}_0$  y  $\mathcal{H}_1$ , respectivamente, tal que el espacio total de Hilbert del agregado es, de acuerdo a la ecuación (2.4),  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_1$ . Con  $\dim(\mathcal{H}) = K$  y  $\dim(\mathcal{H}_0) = k_0$ , sucede en general que  $\dim(\mathcal{H}_1) = K/k_0 = k_1$ ; y si los subespacios  $\mathcal{H}_0$  y  $\mathcal{H}_1$  tienen como base a los conjuntos  $\{|\psi_0\rangle_\eta\}$  y  $\{|\psi_1\rangle_\mu\}$ , un vector estado global para este *sistema bipartito* puede simplemente expresarse como

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu=0}^{k_1} \sum_{\eta=0}^{k_0} c_{\eta\mu} |\psi_0\rangle_\eta \otimes |\psi_1\rangle_\mu. \quad (2.36)$$

En tanto esta segmentación del sistema es arbitraria, es posible reducir, sin pérdida de generalidad, cada uno de estos subespacios en subespacios de menor dimensión de forma que el vector estado (2.36) coincida con la multipartición que se presenta en (2.8). La bipartición del sistema permite estudiar la dinámica de sus subsistemas a partir de los estados globales del agregado. Para ello basta con conocer la manera en que cualquier operador dinámico  $\hat{o}_1$ , que actúa únicamente sobre los vectores estados de  $\mathcal{H}_1$ , está definido sobre dicho espacio, de manera que puede ser generalizado para operar sobre los vectores estado del espacio de Hilbert global si se expresa como

$$\hat{o}_1 = \hat{o}_1 \otimes \hat{\mathbb{I}}_0, \quad (2.37)$$

con  $\hat{\mathbb{I}}_0$  el operador identidad en el espacio  $\mathcal{H}_0$  del subsistema complementario de la bipartición. Con esta estructura el valor esperado asociado a  $\hat{o}_1$  medido sobre un vector estado global puede calcularse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \langle \hat{o}_1 \rangle &= \langle \psi | \hat{o}_1 \otimes \mathbb{I}_0 | \psi \rangle \\ &= \sum_{\epsilon, \lambda} \sum_{\eta, \mu} c_{\epsilon\lambda}^* c_{\eta\mu} (\langle \psi_0 |_\epsilon \langle \psi_1 |_\lambda \hat{o}_1 \otimes \mathbb{I}_0 (|\psi_0\rangle_\eta \otimes |\psi_1\rangle_\mu) \\ &= \sum_{\eta, \mu, \lambda} c_{\eta\lambda}^* c_{\eta\mu} (\langle \psi_1 |_\lambda \hat{o}_1 (|\psi_1\rangle_\mu), \end{aligned} \quad (2.38)$$

donde la reducción de un índice sobre la suma entre la segunda y tercera línea es equivalente a considerar únicamente los estados para los cuales  $\epsilon = \eta$ , es decir, se calcula una *traza parcial* sobre los elementos del subsistema con espacio de Hilbert

$\mathcal{H}_0$ , denotando dicha operación como  $\text{Tr}_0$  se obtiene la matriz de densidad reducida como

$$\rho^1 = \text{Tr}_0(\rho) = \sum_{\eta,\mu,\lambda} c_{\eta\lambda}^* c_{\eta\mu} |\psi_1\rangle_\lambda \langle \psi_1|_\mu, \quad (2.39)$$

con lo cual la expresión (2.38) para el valor esperado del observable asociado a  $\hat{o}_1$  está dado por

$$\langle \hat{o}_1 \rangle = \text{Tr}(\hat{o}_1 \rho^1). \quad (2.40)$$

Ya que la elección del subsistema para el desarrollo anterior fue arbitraria, la construcción de la matriz reducida (2.39) para el espacio  $\mathcal{H}_1$  es equivalente tal que se puede definir  $\rho^0 = \text{Tr}_1(\rho)$ . La forma de las matrices reducidas asociadas a los subsistemas es consistente con la estructura desarrollada anteriormente para los estados producto, sin embargo la correspondencia de la información entre una expresión y otra no es sencilla en general. Es necesario, por ejemplo, tener información sobre qué tan *correlacionados* están entre sí los estados de los subsistemas en el producto de (2.36) para poder escribir la matriz de densidad de un estado arbitrario en términos de las matrices reducidas de sus subsistemas componentes [26]. La noción de *correlación* entre los subsistemas en este trabajo será planteada a través de la medida del *entrelazamiento entre modos* en el Capítulo 5, y está intrínsecamente relacionada con el concepto de *separabilidad*. En el sentido práctico, se dice que un estado es separable si su matriz de densidad  $\rho$  puede expresarse en términos de las matrices reducidas de sus subsistemas componentes  $\rho^0$  y  $\rho^1$  como

$$\rho = \sum_{i=0}^K p_i \rho_i^0 \otimes \rho_i^1, \quad (2.41)$$

donde  $\rho_i^0 = |\psi_0\rangle_i \langle \psi_0|_i$  y  $\rho_i^1 = |\psi_1\rangle_i \langle \psi_1|_i$ , mientras que  $p_i$  corresponde a los elementos de una distribución de probabilidad adecuada sobre el espacio del producto tensorial con  $\dim(\{\rho_i^0 \otimes \rho_i^1\}) = K$ . Aunque la definición (2.41) puede resultar igual o menos intuitiva que la representación (2.36), permite extender de manera natural conceptos como la pureza de estados discutida en la Sección 2.4 a los vectores estado de los subsistemas. En lo posterior, por simplicidad de la notación, la matriz de densidad reducida  $\rho^i$  será denotada por  $\rho_i$ .

# Capítulo 3

## Hamiltoniano de Bose-Hubbard

Originado como una versión alterna del planteamiento de Hubbard para describir la dinámica de arreglos de partículas fermiónicas que presentaban comportamiento de superfluidez [27], el modelo de Bose-Hubbard (BH) clásico busca modelar las restricciones energéticas en un sistema con una población confinada de bosones sin espín que experimentan el efecto de potenciales reticulares externos e interacciones punto a punto entre sí [28]. El modelo corresponde a un Hamiltoniano de muchas partículas dentro del formalismo de segunda cuantización y es usado comúnmente para modelar sistemas de átomos bosónicos ultrafríos, en los cuales se han logrado recientemente grandes avances en técnicas experimentales y se han convertido en referencias en cuanto el estudio de fenómenos tales como transiciones de fase cuánticas [29-33].

A lo largo de este capítulo se presentan los fundamentos necesarios para la construcción del Hamiltoniano BH, comenzando por una revisión esencial del formalismo de segunda cuantización, para posteriormente introducir las funciones de Wannier como elementos auxiliares que permiten llevar dicho Hamiltoniano a una representación en términos de los operadores de creación y aniquilación discutidos en el Capítulo 2; una vez logrado esto, se clasifican e interpretan los distintos elementos que lo componen. Finalmente, se aborda la representación matricial del Hamiltoniano sobre la base de Fock efectiva del sistema de dos sitios con dos bosones, y se obtienen expresiones para sus valores y vectores propios.

### 3.1. Construcción del Hamiltoniano

El Hamiltoniano BH es un resultado particular del estudio teórico de sistemas de muchas partículas idénticas (que obedecen la estadística de Bose), abordados mediante el formalismo de segunda cuantización. La idea fundamental detrás de este formalismo es plantear la función de onda  $\Psi(\vec{r}_i, t)$  que contiene la información del sis-

tema para una partícula en la vecindad de  $\vec{r}_i$  como un operador asociado a un *campo clásico*, de forma que la ecuación de Schrödinger para el sistema puede ser cuantizada de forma canónica; aquí procederemos como se hace en [34], planteando la densidad Lagrangiana del sistema y aplicando una transformada de Legendre con un par de variables conjugadas convenientes para obtener así una densidad de Hamiltoniano que pueda integrarse. En primera instancia, la ecuación (2.1) se convierte en la ecuación de campo

$$\tilde{\mathcal{H}}\Psi(\vec{r}_i, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}_i, t)}{\partial t}, \quad (3.1)$$

donde, para el caso de interés,  $\tilde{\mathcal{H}}$  resulta el Hamiltoniano que considera tanto el potencial puntual  $V(\vec{r}_i)$  de (2.1) como un potencial de interacción entre partículas por pares  $W(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ , tal que para una partícula en una vecindad  $\vec{r}_i + d\vec{r}_i$  del sistema se tiene

$$\tilde{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}_i) + \int d^3\vec{r}_j \Psi^*(\vec{r}_j, t) W(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \Psi(\vec{r}_j, t). \quad (3.2)$$

Para conseguir una expresión de (3.2) que sea consistente con el resto de la teoría expuesta en el Capítulo 2 se requiere traducir la información de la dinámica del sistema mediante una formulación variacional. Para ello es necesario comenzar por construir la densidad Lagrangiana  $\mathcal{L}[\Psi(\vec{r}, t), \nabla\Psi(\vec{r}, t), \dot{\Psi}(\vec{r}, t)]$  del sistema tal que satisfaga las ecuaciones de Euler-Lagrange para el campo  $\Psi(\vec{r}, t)$  así como para su conjugado  $\Psi^*(\vec{r}, t)$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}(\vec{r}, t)} \right) + \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \Psi(\vec{r}, t)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi(\vec{r}, t)} = 0, \quad (3.3a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*(\vec{r}, t)} \right) + \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \Psi^*(\vec{r}, t)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*(\vec{r}, t)} = 0; \quad (3.3b)$$

ya que las ecuaciones (3.3) son las ecuaciones de movimiento para el sistema y la ecuación de Schrödinger contiene toda la información de su dinámica, debe ser posible replantear estas expresiones de manera que se satisfaga (3.1). Este resultado puede obtenerse si la densidad Lagrangiana satisface

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[\Psi(\vec{r}_i, t), \nabla\Psi(\vec{r}_i, t), \dot{\Psi}(\vec{r}_i, t)] &= \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla\Psi^*(\vec{r}_i, t) \nabla\Psi(\vec{r}_i, t) + V(\vec{r}_i, t) \Psi^*(\vec{r}_i, t) \Psi(\vec{r}_i, t) + \\ &\int d^3\vec{r}_j \Psi^*(\vec{r}_i, t) \Psi^*(\vec{r}_j, t) W(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \Psi(\vec{r}_j, t) \Psi(\vec{r}_i, t) + i\hbar \Psi^*(\vec{r}_i, t) \dot{\Psi}(\vec{r}_j, t), \end{aligned} \quad (3.4)$$

con lo cual la variable canónica conjugada para el campo  $\Psi(\vec{r}, t)$  es simplemente

$$\pi(\vec{r}_i, t) := \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}(\vec{r}_i, t)} = i\hbar \Psi^*(\vec{r}_i, t). \quad (3.5)$$

En consecuencia, es posible obtener la densidad del Hamiltoniano (3.2) a través de la siguiente transformación de Legendre

$$\mathcal{H}[\Psi(\vec{r}_i, t), \nabla\Psi(\vec{r}_i, t), \dot{\Psi}(\vec{r}_i, t)] = \pi(\vec{r}_i, t) \dot{\Psi}(\vec{r}_i, t) - \mathcal{L}[\Psi(\vec{r}_i, t), \nabla\Psi(\vec{r}_i, t), \dot{\Psi}(\vec{r}_i, t)], \quad (3.6)$$

así, usando las expresiones (3.5) y (3.4), esta densidad se reduce a

$$\mathcal{H}[\Psi(\vec{r}_i, t), \nabla\Psi(\vec{r}_i, t), \dot{\Psi}(\vec{r}_i, t)] = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla\Psi^*(\vec{r}_i, t) \nabla\Psi(\vec{r}_i, t) + V(\vec{r}_i, t) \Psi^*(\vec{r}_i, t) \Psi(\vec{r}_i, t) + \int d^3\vec{r}_j \Psi^*(\vec{r}_i, t) \Psi^*(\vec{r}_j, t) W(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \Psi(\vec{r}_j, t) \Psi(\vec{r}_i, t). \quad (3.7)$$

En tanto  $\Psi(\vec{r}_i, t)$  describe un campo que se anula en fuera del sistema, la integral de (3.7) sobre el espacio permite expresar a  $\tilde{\mathcal{H}}$  en términos del campo y su conjugado. Esta descripción del Hamiltoniano resulta fundamental pues, como se discutirá en la siguiente sección, es compatible con la representación de operadores descrita en la Sección 2.3 si se considera finalmente que  $\Psi(\vec{r}_i, t)$  y  $\pi(\vec{r}_i, t)$  pueden ser *ascendidos* a los operadores de campo  $\hat{\Psi}(\vec{r}_i, t)$  y  $\hat{\pi}(\vec{r}_i, t) = i\hbar\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}_i, t)$ . Con este resultado el Hamiltoniano como operador puede escribirse como

$$\hat{H} = \int d^3\vec{r}_i \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}_i, t) \left[ \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}_i, t) \right] \hat{\Psi}(\vec{r}_i, t) + \int \int d^3\vec{r}_i d^3\vec{r}_j \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}_i, t) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}_j, t) W(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \hat{\Psi}(\vec{r}_i, t) \hat{\Psi}(\vec{r}_j, t). \quad (3.8)$$

Aunque este Hamiltoniano aún no brinda mucha información sobre los procesos que acontecen en el sistema, sí nos permitirá más adelante aproximar los operadores de campo como una superposición de estados auxiliares que están bien localizados, a saber: las funciones de Wannier. Complementariamente, vale la pena notar que el par de operadores de campo conjugados satisfacen las siguientes reglas de conmutación, preservando así las propiedades de simetría de la función de onda para bosones de la representación convencional,

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}_i), \hat{\Psi}(\vec{r}_j)] = [\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}_i), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}_j)] = 0, \quad [\hat{\Psi}(\vec{r}_i), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}_j)] = \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j). \quad (3.9)$$

## 3.2. Funciones de Wannier

La forma explícita del operador Hamiltoniano (3.8) depende directamente de la función de campo  $\Psi(\vec{r}_i, t)$  que se encuentra, por lo general, extendida sobre todo el sistema, es decir, no está localizada; en este sentido resulta útil expresar dichas funciones en términos de otras más sencillas que se encuentren bien definidas sobre alguna vecindad del sistema. Para ello se puede aprovechar la geometría del sistema como un arreglo de partículas ordenado en una configuración periódica conformada por dos pozos de potencial simétricos, de manera similar a como se modela un arreglo cristalino, tal que su espectro de energías puede caracterizarse en *bandas* y las funciones de onda con la información del sistema pueden obtenerse mediante el teorema de Bloch [35] como

$$\Psi_{n,k}(\vec{r}_i) = u_n(\vec{r}_i) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i}, \quad (3.10)$$

donde  $n$  refiere al índice de la banda de energía,  $\vec{k}$  es el vector de onda asociado a una partícula restringido a la *primera zona de Brillouin*, y  $u_n(\vec{r}_i)$  es una función con el mismo periodo que el potencial de confinamiento, en este caso  $V(\vec{r}_i)$ , que define la estructura del sistema. En sistemas reticulares, las funciones de Bloch describen estados no localizados a lo largo de todo el arreglo, para los cuales es posible elegir una base de funciones  $u_n(\vec{r}_i)$  adecuada que permita expresarlas como una combinación de funciones que sí están localizadas alrededor de los sitios del arreglo<sup>1</sup>. Dada la periodicidad de la función de Bloch, esta puede expresarse como una expansión discreta en serie de Fourier para una  $\vec{r}_i$  fija sobre la base de funciones  $\{w_n(\vec{r}_j, \vec{r}_i)\}$ , conocida como base de *Wannier*

$$\Psi_{n,k}(\vec{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\vec{r}_j} w_n(\vec{r}_j, \vec{r}_i) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_j}, \quad (3.11)$$

donde  $N_s$  es el número de sitios en el sistema,  $\vec{r}_j$  es un vector característico de la estructura (en cristales corresponde al vector de *Bravais*). Como consecuencia de la periodicidad de las funciones de Bloch y de que los elementos de la base de Wannier son los coeficientes de Fourier en el desarrollo de (3.11), el argumento de las funciones puede reducirse a la diferencia  $\vec{r}_i - \vec{r}_j$ , tal que los elementos de la base de Wannier componen un conjunto ortonormal que satisface

$$\int w_n^*(\vec{r}_i - \vec{r}_j) w_m(\vec{r}_i - \vec{r}_j) d^3\vec{r}_i = \delta_{\vec{r}_i, \vec{r}_j} \delta_{n,m}, \quad (3.12)$$

ya que las funciones  $w_n(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$  dependen de la fase de las funciones de Bloch, no hay una manera única de determinarlas; sin embargo, para un potencial simétrico es posible determinar una fase adecuada para las funciones de Bloch que permita obtener funciones de Wannier con una simetría definida (par para bosones), y cuyas amplitudes alcanzan su máximo en el centro de cada sitio y decaen exponencialmente fuera del mismo. Explícitamente, considerando  $\Omega_1$  como la primera zona de Brillouin, éstas funciones pueden escribirse como

$$w_n(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\vec{k}}^{\Omega_1} \Psi_{n,k}(\vec{r}_i) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_j}. \quad (3.13)$$

Aunque las funciones de Wannier no son funciones propias del Hamiltoniano (3.8), permiten introducir la representación del espacio de ocupaciones en la descripción usual del sistema a partir de la periodicidad de sus vecindades. Identificando  $\vec{r}_j$  como el vector de red asociado al centro del  $j$ -ésimo sitio y definiendo operadores de creación  $\hat{a}_{n,j}^\dagger$  y aniquilación  $\hat{a}_{n,j}$ , para la  $n$ -ésima banda, es posible expresar los operadores de campo de (3.8) que corresponden a las funciones de Bloch del sistema como la superposición de funciones de Wannier sobre el espacio de Fock,

$$\hat{\Psi}_{n,j}^\dagger(\vec{r}_i) = \sum_n \sum_j w_n^*(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \hat{a}_{n,j}^\dagger, \quad \hat{\Psi}_{n,j}(\vec{r}_i) = \sum_n \sum_j w_n(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \hat{a}_{n,j}. \quad (3.14)$$

---

<sup>1</sup>La suposición de que esta base existe es conocida como aproximación de *tight binding* o de *enlace fuerte*, y parte de la hipótesis de que las partículas del sistema se encuentran *localizadas* en un grado considerable a lo largo del arreglo.

Las expresiones en (3.14) garantizan la simetría para bosones si satisfacen (3.9), lo cual requiere que los nuevos operadores  $\hat{a}_{n,j}^\dagger$  y  $\hat{a}_{n,j}$  se construyan tal que las expresiones (2.19) sean válidas para cada  $n$  fija. En lo posterior se supondrá que las fluctuaciones térmicas en el sistema son despreciables y por tanto el análisis de energía está reducido a la primera banda del espectro, consecuentemente las expresiones para los operadores de campo omitirán el índice  $n$ .

Sustituyendo las expresiones (3.14) en (3.8), el Hamiltoniano puede reescribirse de acuerdo a la naturaleza del potencial que contribuye a cada integral como  $\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{H}_p$ , donde la parte que describe la contribución del potencial  $V(\vec{r})$  que afecta a cada partícula de forma independiente es

$$\hat{H}_s = \sum_{j,k} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \int d^3\vec{r} w^*(\vec{r} - \vec{r}_j) \left[ \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] w(\vec{r} - \vec{r}_k), \quad (3.15)$$

mientras que la contribución del potencial de interacción a pares  $W(\vec{r}, \vec{r}')$  entre la población del sistema queda descrita de la siguiente manera.

$$\hat{H}_p = \sum_{j,k,l,m} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' w^*(\vec{r} - \vec{r}_j) w^*(\vec{r} - \vec{r}_k) W(\vec{r}, \vec{r}') w(\vec{r} - \vec{r}_l) w(\vec{r} - \vec{r}_m) \quad (3.16)$$

### 3.3. Clasificación de Procesos

El desarrollo de las expresiones (3.15) y (3.16) permite una construcción más intuitiva del Hamiltoniano como operador en el espacio de Fock compuesto como el agregado de distintos procesos que afectan a las partículas de forma individual, o bien por pares. Para el sistema de dos sitios con dos bosones, sobre el cual se desarrolla el presente estudio, se tiene que las contribuciones asociadas a los procesos de una sola partícula, denotados por  $\hat{H}_s$  pueden expandirse como

$$\begin{aligned} \hat{H}_s = & \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \int d^3\vec{r} w_0^*(\vec{r}) P(\vec{r}) w_0(\vec{r}) + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1 \int d^3\vec{r} w_0^*(\vec{r}) P(\vec{r}) w_1(\vec{r}) \\ & + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 \int d^3\vec{r} w_1^*(\vec{r}) P(\vec{r}) w_0(\vec{r}) + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \int d^3\vec{r} w_1^*(\vec{r}) P(\vec{r}) w_1(\vec{r}), \end{aligned} \quad (3.17)$$

con  $P(\vec{r}) = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r})$  la parte del Hamiltoniano usual asociado a una partícula y  $w_i(\vec{r}) = w(\vec{r} - \vec{r}_i)$  denota la función de Wannier asociada al sitio con índice  $i$ , basta con recordar la definición del operador de población para reducir los elementos a

$$\hat{H}_s = \varepsilon_0 \hat{n}_0 + \varepsilon_1 \hat{n}_1 - J(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1), \quad (3.18)$$

donde los coeficientes corresponden a las integrales

$$\varepsilon_i = \int d^3\vec{r} w_i^*(\vec{r}) P(\vec{r}) w_i(\vec{r}), \quad (3.19a)$$

$$-J = \int d^3\vec{r} w_1^*(\vec{r}) P(\vec{r}) w_0(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} w_0^*(\vec{r}) P(\vec{r}) w_1(\vec{r}), \quad (3.19b)$$

y pueden ser interpretados como la energía base del  $i$ -ésimo sitio y la amplitud de tunelamiento individual de los bosones, respectivamente. Hay que señalar que el signo negativo de (3.19b) emerge de la aproximación del operador de campo propuesta en (3.14) pero aplicada al sistema de dos sitios y refleja que la interacción que describe este proceso es de tipo repulsivo. Por otra parte,  $\hat{H}_p$  con los elementos asociados al potencial de interacción a pares tiene cuatro grados de libertad según la expresión (3.16), y con sólo dos sitios la expansión en integrales análoga a (3.17) está compuesta por dieciséis integrales [36] de la forma

$$A_{ijkl} = \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' w_i^*(\vec{r}) w_j^*(\vec{r}') W(\vec{r}, \vec{r}') w_k(\vec{r}) w_l(\vec{r}'), \quad (3.20)$$

agrupadas en sus posibles combinaciones de índices tal que la expansión queda compuesta por los elementos que resultan de los siguientes tres casos:

1.  $i = j = k = l$ . Este caso presenta sólo dos posibles combinaciones, y su contribución al Hamiltoniano es

$$\hat{H}_{p,1} = \frac{1}{2} [\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 A_{0000} + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 A_{1111}], \quad (3.21)$$

que puede ser reescrita de forma más conveniente al considerar los conmutadores  $[\hat{n}_i, \hat{a}_i] = \hat{n}_i \hat{a}_i - \hat{a}_i \hat{n}_i = -\hat{a}_i$  y  $[\hat{n}_i, \hat{a}_i^\dagger] = \hat{n}_i \hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger$ , como

$$\hat{H}_{p,1} = U_0 \hat{n}_0 (\hat{n}_0 - 1) + U_1 \hat{n}_1 (\hat{n}_1 - 1), \quad (3.22)$$

cuyos coeficientes corresponden según (3.20) a la integral

$$U_i = \frac{1}{2} A_{iiii}, \quad (3.23)$$

y pueden ser interpretados como contribuciones de la interacción a pares que tienden a localizar partículas en el sitio con cuyo subíndice se asocian.

2.  $i = j$  y  $k = l$ , pero  $k \neq j$ . En este caso, el Hamiltoniano se descompone en una suma de los seis elementos integrales formados por las posibles combinaciones de dos pares de índices idénticos,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{p,2} = \frac{1}{2} [ & \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_1 A_{1001} + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_0 A_{0110} + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 A_{1100} \\ & + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_1 A_{0101} + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_0 A_{1010} + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 A_{0011}], \end{aligned} \quad (3.24)$$

ya que el sistema de dos sitios es simétrico, es decir, cada sitio es físicamente idéntico al otro y sólo difiere por el índice con el cual se identifica, las combinaciones para este caso satisfacen las siguientes igualdades

$$A_{1001} + A_{1010} = A_{0110} + A_{0101}, \quad (3.25a)$$

$$A_{0011} = A_{1100}, \quad (3.25b)$$

agregando el hecho de que  $[\hat{n}_1, \hat{n}_0] = \hat{n}_1\hat{n}_0 - \hat{n}_0\hat{n}_1 = 0$ , la expresión (3.24) puede escribirse como sigue

$$\hat{H}_{p,2} = \varepsilon_{01}\hat{n}_0\hat{n}_1 - K \left( \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_0\hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_1 \right), \quad (3.26)$$

donde los coeficientes son

$$\varepsilon_{01} = A_{1001} + A_{1010}, \quad (3.27a)$$

$$-K = \frac{1}{2}A_{0011}. \quad (3.27b)$$

Para este caso  $\varepsilon_{01}$  resulta una contribución energética que deriva de la cantidad de partículas que ocupan simultáneamente ambos sitios, es decir, está asociado a la interacción entre los bosones de cada sitio donde el producto de sus densidades incrementa la energía base del sistema. En el sistema con  $N = 2$  esta contribución sólo es relevante cuando el estado de Fock considerado es  $|1, 1\rangle$ . Por otro lado,  $K$  es la amplitud de tunelaje a pares entre sitios, esto es, corresponde al proceso en el cual un par de bosones son aniquilados en un sitio y otro par es creado en el sitio complementario. Como en el caso de  $J$ , esta interacción también es localmente repulsiva.

3.  $i = j = k \neq l$ . El último caso considera las ocho integrales restantes,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{p,3} = \frac{1}{2} [ & \hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0\hat{a}_1 A_{0001} + \hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_0 A_{0010} + \hat{a}_0^\dagger\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_0\hat{a}_0 A_{0100} \\ & + \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0\hat{a}_0 A_{1000} + \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_0\hat{a}_1 A_{1101} + \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_0 A_{1110} \\ & + \hat{a}_0^\dagger\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_1 A_{0111} + \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_1 A_{1011} ], \end{aligned} \quad (3.28)$$

de forma análoga al caso anterior, la simetría entre los dos sitios conduce a las relaciones siguientes

$$A_{0001} + A_{0010} = A_{0100} + A_{1000}, \quad (3.29a)$$

$$A_{0111} + A_{1011} = A_{1101} + A_{1110}, \quad (3.29b)$$

y (3.28) puede reescribirse como

$$\hat{H}_{p,3} = J_0[\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_1\hat{n}_0 + \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_0(\hat{n}_0 - 1)] + J_1[\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_1(\hat{n}_1 - 1) + \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_0\hat{n}_1], \quad (3.30)$$

donde se definen

$$-J_0 = A_{0001} + A_{0010}, \quad (3.31a)$$

$$-J_1 = A_{0111} + A_{1011}. \quad (3.31b)$$

De manera similar al caso de  $J$ , estos términos corresponden a procesos de tunelaje individual entre sitios, pero su contribución energética depende de su número de ocupación, por lo que pueden ser interpretados como una especie de potencial de cada sitio para ceder o recibir un bosón.

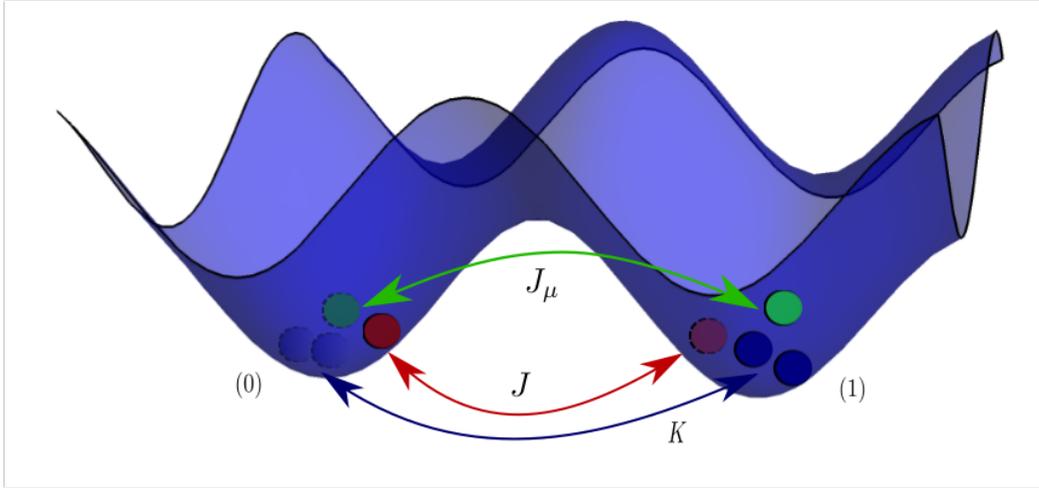


Figura 3.1: Diagrama del sistema de dos sitios como una trampa formada por un potencial de dos pozos. El Hamiltoniano del sistema (ec. (3.32)) incluye procesos de tunelaje entre sitios de un bosón ( $J$  y  $J_\mu$ ) y tunelaje a pares ( $K$ ), además de contribuciones energéticas que promueven la localización de las partículas.

Como consecuencia de las expresiones (3.18), (3.22), (3.26) y (3.30), el Hamiltoniano para el sistema de dos sitios queda escrito como

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mu=0,1} [\varepsilon_\mu \hat{n}_\mu + U_\mu \hat{n}_\mu (\hat{n}_\mu - 1)] + \varepsilon_{01} \hat{n}_0 \hat{n}_1 - J (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1) \\ & - \sum_{\mu=0,1} [J_\mu (\hat{a}_1^\dagger \hat{n}_\mu \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{n}_\mu \hat{a}_1)] - K (\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0). \end{aligned} \quad (3.32)$$

En la siguiente sección se abordará la representación matricial de (3.32) sobre la base de Fock como un problema de valores propios o eigenvalores, para ejemplificar que en el caso de un sistema de baja dimensionalidad es aún posible resolver el espectro de energías de forma analítica, así como obtener expresiones para sus vectores propios como funciones de los parámetros del Hamiltoniano.

### 3.4. Problema de Eigenvalores

La matriz asociada al Hamiltoniano (3.32) puede obtenerse a partir del cálculo de las entradas  $H_{ij} = \langle \lambda_i | \hat{H} | \lambda_j \rangle$ , donde  $\{|\lambda_k\rangle\}$  es el conjunto de elementos que conforman la base de estados de Fock planteada en la Sección 2.2. La solución del problema de eigenvalores para la matriz Hamiltoniana provee una descripción analítica del espectro de energías del sistema como función de los distintos parámetros que acompañan a los procesos descritos en la Sección 3.3, así como un conjunto de estados propios que serán la base para describir la propagación en el tiempo de estados puros generales

en el Capítulo 4. Consecuentemente, es necesario resolver el problema

$$\hat{H}|E_i\rangle = E_i|E_i\rangle. \quad (3.33)$$

Aunque hallar una solución general de (3.33) para sistemas de mayor dimensionalidad es un problema complejo que suele tratarse de forma numérica [37], para el sistema de dos sitios con dos bosones las soluciones analíticas son aún accesibles. En general, el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  para un sistema de  $N$  bosones y  $M$  sitios tiene una dimensión dada por

$$\dim(\mathcal{H}) = \frac{(N + M - 1)!}{N!(M - 1)!}, \quad (3.34)$$

por lo que, para un sistema con  $M = N = 2$ , la dimensión es simplemente 3 y los estados en el espacio de Fock que conforman su base son  $|2, 0\rangle$ ,  $|1, 1\rangle$  y  $|0, 2\rangle$  (ver Sección 2.2). Al operar (3.32) sobre cada uno de estos elementos según las expresiones (2.17) y (2.15), los elementos de matriz  $H_{ij}$  resultan ser números reales que conforman una matriz simétrica en  $M_{3 \times 3}(\mathbb{R})$ , con lo cual para el espacio de Fock 3-dimensional, el Hamiltoniano (3.32) en su forma matricial tiene la estructura

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} H_{00} & H_{01} & H_{02} \\ H_{01} & H_{11} & H_{12} \\ H_{02} & H_{12} & H_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.35)$$

con lo cual el primer paso para resolver (3.33) es hallar las raíces del polinomio característico  $p(E) = \det(\hat{H} - E\hat{I}) = 0$ , que puede reducirse a la ecuación cúbica

$$E^3 + \alpha E^2 + \beta E + \gamma = 0, \quad (3.36)$$

donde los coeficientes corresponden a los invariantes algebraicos <sup>2</sup> de la matriz (3.35) dados por

$$\alpha = -H_{00} - H_{11} - H_{22}, \quad (3.37a)$$

$$\beta = H_{00}H_{11} + H_{11}H_{22} + H_{00}H_{22} - H_{01}^2 - H_{02}^2 - H_{12}^2, \quad (3.37b)$$

$$\gamma = H_{00}H_{12}^2 + H_{11}H_{02}^2 + H_{22}H_{01}^2 - 2H_{01}H_{12}H_{02} - H_{00}H_{11}H_{22}. \quad (3.37c)$$

Aunque existen varias formas de resolver (3.36), aquí se procederá de forma similar a [38], reduciendo la ecuación a una forma más simple para llevarla posteriormente a una ecuación cuadrática cuyas raíces sean conocidas. Para ello se requieren algunos cambios de variable, el primero es tomar  $x = E + \frac{\alpha}{3}$ , de manera que el polinomio característico en forma reducida resulta ser

$$x^3 + 3px - 2q = 0, \quad (3.38)$$

con  $p$  y  $q$  los *parámetros reducidos* dados por

$$p = \frac{3\beta - \alpha^2}{9}, \quad (3.39a)$$

$$q = \frac{9\alpha\beta - 27\gamma - 2\alpha^3}{54}, \quad (3.39b)$$

---

<sup>2</sup>Un invariante algebraico es una magnitud que caracteriza una operación lineal independientemente de la base en la cual se representa su matriz.

a partir de los cuales se expresa el discriminante del polinomio como  $D = p^3 + q^2$ , algebraicamente este parámetro es relevante porque distingue los valores de  $E_i$  tal que si  $D > 0$ , dos valores propios son complejos y uno es real; mientras que si  $D = 0$  todos los valores son reales y al menos uno presenta degeneración, es decir, todos los valores son reales pero por lo menos dos son iguales; por último, si  $D < 0$ , todos los valores propios serán reales y diferentes. Un segundo cambio de variable,  $x = u + w$ , junto con la restricción  $p = -uw$ , permiten llevar la ecuación (3.38) a la forma equivalente

$$w^6 - 2qw^3 - p^3 = 0, \quad (3.40)$$

que es cuadrática para  $w^3$  y cuyas raíces son  $w^3 = q \pm \sqrt{D}$ , de manera que  $u^3 = q \mp \sqrt{D}$ . Por lo tanto las raíces cúbicas de  $w$  y  $u$  son

$$w = \begin{cases} (q + \sqrt{D})^{1/3} \\ (-\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2})(q + \sqrt{D})^{1/3} \\ (-\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2})(q + \sqrt{D})^{1/3} \end{cases}, \quad (3.41)$$

$$u = \begin{cases} (q - \sqrt{D})^{1/3} \\ (-\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2})(q - \sqrt{D})^{1/3} \\ (-\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2})(q - \sqrt{D})^{1/3} \end{cases}. \quad (3.42)$$

Ya que las raíces están restringidas por  $p = -uw$ , las únicas tres combinaciones viables nos permiten escribir de forma general los valores propios  $E = u + w - \alpha/3$  como

$$E_1 = \kappa_+ + \kappa_- - \frac{\alpha}{3}, \quad (3.43a)$$

$$E_2 = -\frac{1}{2}[\kappa_+ + \kappa_-] + i\frac{\sqrt{3}}{2}[\kappa_+ - \kappa_-] - \frac{\alpha}{3}, \quad (3.43b)$$

$$E_3 = -\frac{1}{2}[\kappa_+ + \kappa_-] - i\frac{\sqrt{3}}{2}[\kappa_+ - \kappa_-] - \frac{\alpha}{3}, \quad (3.43c)$$

en donde

$$\kappa_+ = (q + \sqrt{D})^{1/3}, \quad \kappa_- = (q - \sqrt{D})^{1/3}. \quad (3.44)$$

Mientras que las ecuaciones (3.43) proveen expresiones generales para cualquiera de los casos que distingue el discriminante, los casos de interés son aquellos para los cuales  $D < 0$  o  $D = 0$ , ya que garantizan que el sistema tiene un espectro real y, por lo menos en el primer caso, este no presenta degeneración en ninguno de los niveles de energía. Para estos casos las raíces de (3.40) pueden escribirse como  $w^3 = q + i\sqrt{-D}$  y  $u^3 = q - i\sqrt{-D}$ , y pueden ser reescritas en forma polar como

$$w_k = r^{1/3} \left[ \cos\left(\frac{\phi + 2\pi(k-1)}{3}\right) + i \sin\left(\frac{\phi + 2\pi(k-1)}{3}\right) \right], \quad (3.45a)$$

$$u_k = r^{1/3} \left[ \cos\left(\frac{\phi + 2\pi(k-1)}{3}\right) - i \sin\left(\frac{\phi + 2\pi(k-1)}{3}\right) \right], \quad (3.45b)$$

con  $k = 1, 2, 3$ ; para ambas expresiones el módulo es simplemente  $r = \sqrt{-p^3}$ , y la variable de fase  $\phi$  cumple que

$$\cos \phi = q/(-p)^{3/2}. \quad (3.46)$$

Finalmente los valores propios para este caso pueden expresarse como

$$E_k = w_k + u_k - \frac{\alpha}{3} = 2\sqrt{-p} \cos \left( \frac{\phi + 2\pi(k-1)}{3} \right) - \frac{\alpha}{3}. \quad (3.47)$$

La ecuación (3.47) describe el espectro formado por los tres diferentes niveles de energía del sistema y para cada valor propio  $E_i$  puede obtenerse el vector propio asociado al resolver  $(\hat{H} - E_i \hat{\mathbb{I}})|E_i\rangle = 0$ . Ya  $|E_i\rangle$  es un vector representado a partir de la base de Fock para el espacio de Hilbert 3-dimensional con la forma  $|E_i\rangle = \langle E_i|\lambda_0\rangle|\lambda_0\rangle + \langle E_i|\lambda_1\rangle|\lambda_1\rangle + \langle E_i|\lambda_2\rangle|\lambda_2\rangle$ , las proyecciones del vector propio satisfacen las ecuaciones siguientes ecuaciones:

$$(H_{00} - E_i)\langle E_i|\lambda_0\rangle + H_{01}\langle E_i|\lambda_1\rangle + H_{02}\langle E_i|\lambda_2\rangle = 0, \quad (3.48a)$$

$$H_{01}\langle E_i|\lambda_0\rangle + (H_{11} - E_i)\langle E_i|\lambda_1\rangle + H_{12}\langle E_i|\lambda_2\rangle = 0, \quad (3.48b)$$

$$H_{02}\langle E_i|\lambda_0\rangle + H_{12}\langle E_i|\lambda_1\rangle + (H_{22} - E_i)\langle E_i|\lambda_2\rangle = 0, \quad (3.48c)$$

y agregando la condición de normalización del vector  $|E_i\rangle$ , se tiene que

$$|\langle E_i|\lambda_0\rangle|^2 + |\langle E_i|\lambda_1\rangle|^2 + |\langle E_i|\lambda_2\rangle|^2 = 1. \quad (3.49)$$

Hay muchas formas de expresar las soluciones al sistema que forman las ecuaciones (3.48) y (3.49) que dependen de las entradas de la matriz (3.35). Si las entradas cumplen, por ejemplo, que  $H_{01} \neq 0$  y  $H_{01}H_{02} - H_{12}(H_{00} - E_i) \neq 0$ ;  $|E_i\rangle$  puede ser escrito como

$$\langle E_i|n_1\rangle = - \left[ \frac{H_{11} - E_k}{H_{01}} A_i + \frac{H_{12}}{H_{01}} \right] \langle E_i|n_3\rangle, \quad (3.50a)$$

$$\langle E_i|n_2\rangle = A_i \langle E_i|n_3\rangle, \quad (3.50b)$$

$$\langle E_i|n_3\rangle = \left[ \frac{H_{01}^2 + (H_{11} - E_i)^2}{H_{01}^2} A_i^2 + \frac{2H_{12}(H_{11} - E_k)}{H_{01}^2} A_i + \frac{H_{01}^2 + H_{12}^2}{H_{01}^2} \right]^{-1/2}. \quad (3.50c)$$

donde  $A_i$  está dado por

$$A_i = \frac{(H_{00} - E_i)(H_{22} - E_i) - H_{02}^2}{H_{01}H_{02} - H_{12}(H_{00} - E_i)}. \quad (3.51)$$

Las ecuaciones (3.47) y (3.50) serán la base para discutir más adelante la dependencia de los diferentes estados iniciales del sistema bajo distintas configuraciones de los parámetros del Hamiltoniano de muchas partículas, especialmente para los casos límite donde algunos procesos se imponen cuantitativamente sobre el resto.

# Capítulo 4

## Dinámica del Sistema

Hasta ahora sólo se ha considerado que el sistema de estudio no depende del tiempo, sin embargo en los sistemas cuánticos reales el tiempo no es una variable que pueda despreciarse y el interés por la evolución temporal de un sistema cobra importancia tanto en el ámbito experimental como en la teoría; un ejemplo de esto es el área de la información cuántica, donde conocer cómo cambian los estados del sistema bajo ciertas transformaciones permite definir intervalos de tiempo en los cuales pueden realizarse operaciones cuánticas [39]. Con el fin de abordar la evolución temporal de los estados cuánticos del sistema aislado de dos sitios con dos bosones, se introducirá el operador de propagación  $\hat{U}(t)$ , que con ayuda de la solución del problema de eigenvalores presentado en la Sección 3.4 facilita una descripción general para estados arbitrarios del sistema que se propagan en función del tiempo. Posteriormente, se presentan los conceptos de distinguibilidad entre estados propagados y una clasificación de sus tiempos de vida, así como el concepto de *límite de rapidez cuántica*.

### 4.1. Propagación Unitaria

Es posible acceder a la información de la dinámica de un sistema aislado no estacionario si puede describirse cómo varían sus estados en el tiempo, o bien, si se conoce cómo lo hacen los operadores asociados a sus observables. Si  $|\psi(t_0)\rangle$  describe el estado del sistema a un tiempo  $t_0$ , y para un tiempo posterior  $t$  el sistema se encuentra en el estado  $|\psi(t)\rangle$ , la información entre un estado y otro es propagada en el tiempo bajo la acción del operador  $\hat{U}(t, t_0)$  de manera que

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle. \quad (4.1)$$

Si se escribe la ecuación de Schrödinger (2.1) para el estado (4.1), se obtiene la igualdad

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad (4.2)$$

y ya que el estado inicial es arbitrario, la ecuación dinámica del sistema se reduce a la siguiente ecuación para el operador  $\hat{U}(t, t_0)$ ,

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0). \quad (4.3)$$

Esta ecuación puede ser resuelta como una ecuación diferencial de primer orden si se considera que los potenciales de confinamiento y de interacción a pares en el sistema son independientes del tiempo, agregando además la condición inicial  $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{\mathbb{I}}$ , donde  $\hat{\mathbb{I}}$  es el operador identidad. Con estas consideraciones la solución de (4.3) resulta ser

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}, \quad (4.4)$$

y corresponde a la forma explícita del *operador de propagación*. Es inmediato estimar el operador adjunto correspondiente como  $\hat{U}^\dagger(t, t_0) = \exp(i\hat{H}(t-t_0)/\hbar)$ ; en consecuencia, se dice que el operador de propagación es *unitario* ya que  $\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathbb{I}}$ . Esta característica del operador es importante pues establece que en un sistema aislado la evolución en el tiempo es reversible. Por otra parte, hallar la estructura analítica de (4.4) para cada sistema equivale a poder describir sus estados para cada tiempo dado, y aunque existe una gran variedad de métodos para construir y aproximar dichos propagadores [40], esto no resulta sencillo en general. Sin embargo, si se conoce el conjunto de estados propios  $\{|E_i\rangle\}$  del Hamiltoniano, tal como se discute en la Sección 3.4, se tiene que para cualquiera de estos estados propagados en el tiempo  $\hat{H}|E_i(t)\rangle = -iE_i|E_i(t)\rangle/\hbar$ , y sustituyendo a la derecha de la igualdad en (4.3) se obtiene una solución equivalente a (4.4),

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_i(t-t_0)}. \quad (4.5)$$

Dado que  $\{|E_i\rangle\}$  es por sí mismo una base para el espacio de Hilbert del sistema, cualquier estado inicial arbitrario  $|\psi(0)\rangle$  puede ser descrito como una combinación lineal de estos elementos. Así, con  $\sqrt{r_n} = \langle E_n|\psi(0)\rangle$ , el estado propagado puede expresarse como

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \sqrt{r_n} e^{-\frac{iE_n}{\hbar}t} |E_n\rangle. \quad (4.6)$$

Para el espacio de Hilbert 3-dimensional, el espectro de valores propios puede ordenarse según la relación  $E_1 < E_2 < E_3$ , para luego definir las frecuencias de transición  $\omega_{ij} = E_i - E_j/\hbar$  entre los niveles del espectro con  $i > j$ . Esto permite reescribir (4.6) como

$$|\psi(t)\rangle = \sqrt{r_1}|E_1\rangle + \sqrt{r_2}e^{-i\omega_{21}t}|E_2\rangle + \sqrt{r_3}e^{-i\omega_{31}t}|E_3\rangle. \quad (4.7)$$

Geoméricamente, la propagación unitaria puede interpretarse como una rotación en el plano complejo por un ángulo  $\omega_{ij}t$  de cada elemento  $\sqrt{r_i}$  de la expansión (4.7). Ya que el estado  $|\psi(t)\rangle$  representado como el vector  $(\sqrt{r_1}, \sqrt{r_2}e^{-i\omega_{21}t}, \sqrt{r_3}e^{-i\omega_{31}t})$  en el espacio generado por  $\{|E_i\rangle\}$  es en realidad un elemento en  $\mathbb{C}^3$ , el efecto de la rotación puede visualizarse a través del comportamiento de las componentes de  $|\psi(t)\rangle = \text{Re}(|\psi(t)\rangle) - i\text{Im}(|\psi(t)\rangle)$ , tal como se muestra en la Figura 4.1.

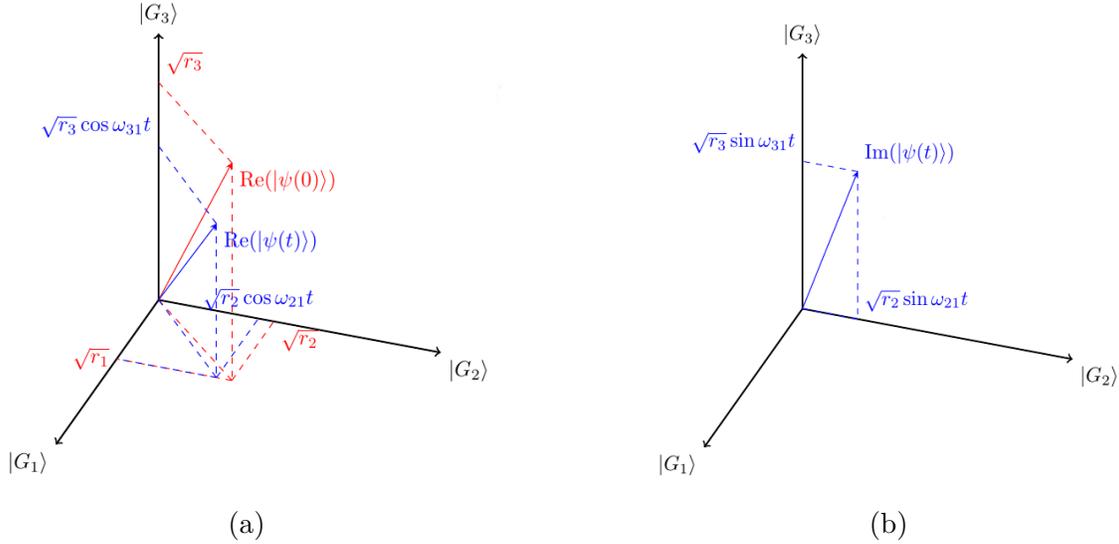


Figura 4.1: Es posible descomponer el estado (4.7) como una función compleja en  $\mathbb{C}^3$ , donde cada componente puede ser representada en  $\mathbb{R}^2$ . En (4.1a) se compara la parte real de un estado inicial  $|\psi(0)\rangle$ ,  $\text{Re}(|\psi(0)\rangle)$ , con la parte correspondiente del mismo estado después de ser propagado durante un tiempo  $t$ , mientras que en (4.1b) se compara su parte imaginaria,  $\text{Im}(|\psi(0)\rangle)$ . Puede observarse para este caso que el estado inicial tiene una parte compleja nula, y después de ser propagado dicha componente adquiere una magnitud definida dentro del plano formado por los estados  $|G_2\rangle$  y  $|G_3\rangle$ .

A pesar de que el propagador unitario  $\hat{U}(t)$  modifica la fase de las componentes del estado en el espacio de vectores propios, cada una conserva su magnitud de forma individual y  $|\psi(t)\rangle$  se mantiene normalizado para cualquier valor de  $t$ . Se tiene además que si  $|\psi(0)\rangle$  es un estado puro,  $|\psi(t)\rangle$  corresponde a otro estado puro. Estas propiedades del operador  $\hat{U}(t)$  son un ejemplo de las características que poseen los operadores que definen las llamadas *puertas cuánticas* [39], haciendo del efecto del propagador sobre un estado del sistema un ejemplo básico de una operación cuántica, que transforma la información de entrada (estado inicial) en información de salida (estado final) en un tiempo determinado, a saber, el tiempo que le toma al sistema alcanzar un estado distinguible.

## 4.2. Tiempo entre Estados Distinguibles

Como se ha discutido en la Sección 2.1, la información de un sistema cuántico está contenida dentro de su función de onda y sólo es accesible para un observador a través de la acción de distintos operadores sobre la misma. Estas operaciones manipulan el estado original del sistema, colapsando la función de onda para obtener un valor

numérico del observable que se desea. En este sentido, realizar una *medida* sobre el sistema cuántico está intrínsecamente ligado a alterarlo, y realizar medidas sucesivas se refiere a preparar el sistema en un mismo estado varias veces y medir el observable para cada una. Si  $|\psi(0)\rangle$  es el estado inicial en el cual se prepara el sistema para realizar una primera medida del observable  $q$  asociado al operador  $\hat{Q}$ , y  $|\phi(0)\rangle$  es el estado inicial en el cual se preparó para una segunda medición, la diferencia entre los resultados de medir el observable  $q$  en ambas operaciones dependerá de qué tan *distintos* son los estados  $|\psi(0)\rangle$  y  $|\phi(0)\rangle$  entre sí. Ya que la diferencia en la medida de un mismo observable conlleva inherentemente a la existencia de un error asociado, el estimar la *distinguibilidad* entre dos estados es de vital importancia en sistemas donde la prioridad es obtener medidas precisas.

La manera en que puede cuantificarse la *distinguibilidad* entre dos estados cuánticos ha sido discutida ampliamente bajo perspectivas variadas y existen distintas propuestas de *medidas* para realizarlo [41-45]. Una de las medidas más comunes en la literatura es la *fidelidad* [46], definida como

$$F(\rho_1, \rho_2) = \text{Tr}^2 \left( \sqrt{\rho_1^{1/2} \rho_2 \rho_1^{1/2}} \right), \quad (4.8)$$

que es una función de las matrices de densidad asociadas al par de estados, es simétrica en sus entradas y está acotada, tal que  $F(\rho_1, \rho_2) = 1$  cuando la distinguibilidad entre los estados  $\rho_1$  y  $\rho_2$  es mínima, y  $F(\rho_1, \rho_2) = 0$  cuando los estados son completamente distinguibles. Cuando  $\rho_1$  y  $\rho_2$  corresponden a los estados puros  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  respectivamente, (4.8) coincide con la proyección de un estado sobre otro:

$$F(\rho_1, \rho_2) = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2. \quad (4.9)$$

En consecuencia, la condición para maximizar la distinguibilidad entre estados puros coincide con la ortogonalidad entre vectores estado [47]. Usando este criterio y la forma del estado propagado (4.7), es posible identificar para el sistema con espacio de Hilbert 3-dimensional las formas ortogonales que alcanza un estado inicial en su evolución temporal si se satisface

$$\langle \psi(0) | \psi(\tau) \rangle = r_1 + r_2 e^{-i\omega_{21}\tau} + r_3 e^{-i\omega_{31}\tau} = 0, \quad (4.10)$$

donde  $\tau$  es el tiempo en el cual el vector estado inicial  $|\psi(0)\rangle$  alcanza su primera forma ortogonal propagado unitariamente.  $\tau$  también define el conjunto de estados mutuamente ortogonales,  $\{|\psi(\tau)\rangle, |\psi(2\tau)\rangle, |\psi(3\tau)\rangle, \dots\}$ , que caracterizan la evolución temporal de  $|\psi(0)\rangle$  [48]. La condición de ortogonalidad (4.10) como función compleja puede ser separada en sus partes real e imaginaria, y al considerar que los factores  $r_i$  provienen de una distribución de probabilidad, la ecuación (4.10) puede escribirse como el sistema de tres ecuaciones siguiente

$$r_1 + r_2 \cos \omega_{21}\tau + r_3 \cos \omega_{31}\tau = 0, \quad (4.11a)$$

$$r_2 \sin \omega_{21}\tau + r_3 \sin \omega_{31}\tau = 0, \quad (4.11b)$$

$$r_1 + r_2 + r_3 = 1. \quad (4.11c)$$

Con cuatro variables para cada configuración del Hamiltoniano dada, el sistema tiene una infinidad de soluciones posibles. Un conjunto de estas se muestra en la Figura 4.2, donde las distribuciones que resuelven (4.11) son representadas por los puntos que componen las franjas con tonos claros en el plano adimensional  $(\omega_{21}\tau, \omega_{32}/\omega_{21})$ , mientras que las zonas de color morado corresponden a *zonas prohibidas* que deben ser entendidas como conjuntos de puntos que señalan la ausencia de distribuciones  $\{r_i\}$  para una configuración de  $\omega_{32}/\omega_{21}$  que puedan alcanzar una forma ortogonal en un tiempo  $\tau$ . Una revisión de las condiciones bajo las cuales el sistema (4.11) admite solución permite establecer una relación más clara entre los valores de  $\tau$  y las frecuencias de transición  $\omega_{ji}$ , así como clasificar las distribuciones asociadas a los estados que evolucionan a formas ortogonales de la siguiente manera [49]:

- *Familia I*:  $\omega_{ji}\tau = n\pi$  con  $n$  entero positivo, por lo menos para una de las frecuencias de transición de (4.10).

El tiempo de ortogonalidad para este caso está determinado por

$$\tau = \frac{n\pi}{\omega_{ji}}, \quad (4.12)$$

Como consecuencia, el tiempo en que los estados que conforman esta familia alcanzan una forma ortogonal es inversamente proporcional al espaciamiento entre niveles de energía en el espectro de  $\hat{H}$ , es decir, configuraciones del Hamiltoniano en el sistema con un grandes diferencias de energía entre niveles subsecuentes,  $\omega_{ji} \gg n\pi$ , generan propagaciones con tiempos de vida más cortos para los estados de la familia. Estos estados quedan determinados por la distribución de probabilidad  $\{r_i\}$  que es solución a (4.11) para  $\tau$  dada en (4.12). Al sustituir en el sistema (4.11)  $r_i = 1 - r_j - r_k$ , con  $i = 1, 2, 3$ , las expresiones se reducen al par de ecuaciones

$$1 + r_j[(-1)^n - 1] + r_k(\cos \omega_{ki}\tau - 1) = 0, \quad (4.13a)$$

$$r_k \sin \omega_{ki}\tau = 0, \quad (4.13b)$$

donde las soluciones a la segunda ecuación separan el conjunto de soluciones de esta familia en las siguientes dos subfamilias.

- *Subfamilia Ia*:  $r_k = 0$ , la contribución de uno de los estados propios del Hamiltoniano al estado inicial es nula.

Esta solución restringe los valores posibles que pueden adquirir los elementos de la distribución de probabilidad a  $r_i = r_j = 1/2$  y sólo admite valores de  $n$  impares, de manera que las distribuciones corresponden a los posibles *qubits* que pueden formarse con el conjunto de eigenestados del Hamiltoniano. Estas distribuciones se encuentran representadas en el espacio adimensional de la Figura 4.2 con distintos valores de  $n$ , de acuerdo a la forma que toma la ecuación (4.13) para cada caso:

- Para  $r_1 = r_2 = 1/2, r_3 = 0$ , el conjunto de distribuciones conforman las líneas rectas punteadas de color negro para  $n = 1, 3, \dots$  según la ecuación

$$\omega_{21}\tau = n\pi. \quad (4.14)$$

- Para  $r_3 = r_2 = 1/2$ ,  $r_1 = 0$ , las soluciones componen las curvas de color magenta en las fronteras de las franjas y están dadas para cada valor de  $n$  por la expresión

$$\omega_{21}\tau = \frac{n\pi}{\omega_{32}/\omega_{21}}. \quad (4.15)$$

- Para  $r_1 = r_3 = 1/2$ ,  $r_2 = 0$ , estas distribuciones forman las curvas complementarias del caso anterior como frontera para cada franja con líneas sólidas de azul oscuro y rojo, siendo esta última el conjunto de soluciones con el mínimo global para el tiempo de ortogonalidad del sistema, el cuál satisface la expresión

$$\omega_{21}\tau = \frac{n\pi}{1 + \omega_{32}/\omega_{21}}. \quad (4.16)$$

Los elementos que componen esta familia serán los estados a partir de los cuales se estudiará la evolución del *entrelazamiento entre modos* en el sistema para distintas configuraciones del Hamiltoniano a lo largo del Capítulo 5. La forma general de los estados iniciales en esta subfamilia es

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|E_i\rangle + |E_j\rangle). \quad (4.17)$$

- *Subfamilia Ib*:  $r_k \neq 0$  y  $\sin \omega_{ki}\tau = 0$ , lo cual implica que  $\omega_{ki}\tau = m\pi$  con  $m$  entero.

En este caso las distribuciones que son solución para las ecuaciones (4.13) dependen de la paridad de los enteros  $n$  y  $m$ , así como de las posibles combinaciones que se pueden obtener de ellas. Estas distribuciones se muestran en el Cuadro 4.1 con los marcadores que los identifican como puntos sobre las rectas horizontales  $\omega_{21}\tau = n\pi$  en la Figura 4.2.

$(n,m)$	Distribución	Marcador
(Par, Par)	No hay soluciones para este caso	
(Par, Impar)	$r_k = 1/2, r_i + r_j = 1/2$	■
(Impar, Par)	$r_i = 1/2, r_j + r_k = 1/2$	★
(Impar, Impar)	$r_j = 1/2, r_i + r_k = 1/2$	◆

Cuadro 4.1: Distribuciones para los estados que conforman la subfamilia Ib.

Los estados iniciales asociados a las distribuciones de esta subfamilia pueden expresarse a partir de un elemento  $0 < r < 1/2$  que determina los coeficientes de la expansión sobre la base de estados propios de  $\hat{H}$  de la siguiente forma:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|E_i\rangle + \sqrt{r}|E_j\rangle + \left(\sqrt{\frac{1}{2} - r}\right)|E_k\rangle. \quad (4.18)$$

Si bien el tiempo de ortogonalidad para estos estados está dado por la ecuación (4.12), para esta subfamilia sucede también que

$$\tau = \frac{m\pi}{\omega_{ki}}, \quad (4.19)$$

Por lo que las distribuciones correspondientes a este caso en la Figura 4.2 corresponden a los puntos para los cuales el cociente entre las frecuencias de transición es racional y los valores enteros de  $n$  y  $m$  que determinan soluciones según el Cuadro 4.1 satisfacen la relación

$$n = \frac{1}{1 + \omega_{32}/\omega_{21}} m, \quad (4.20)$$

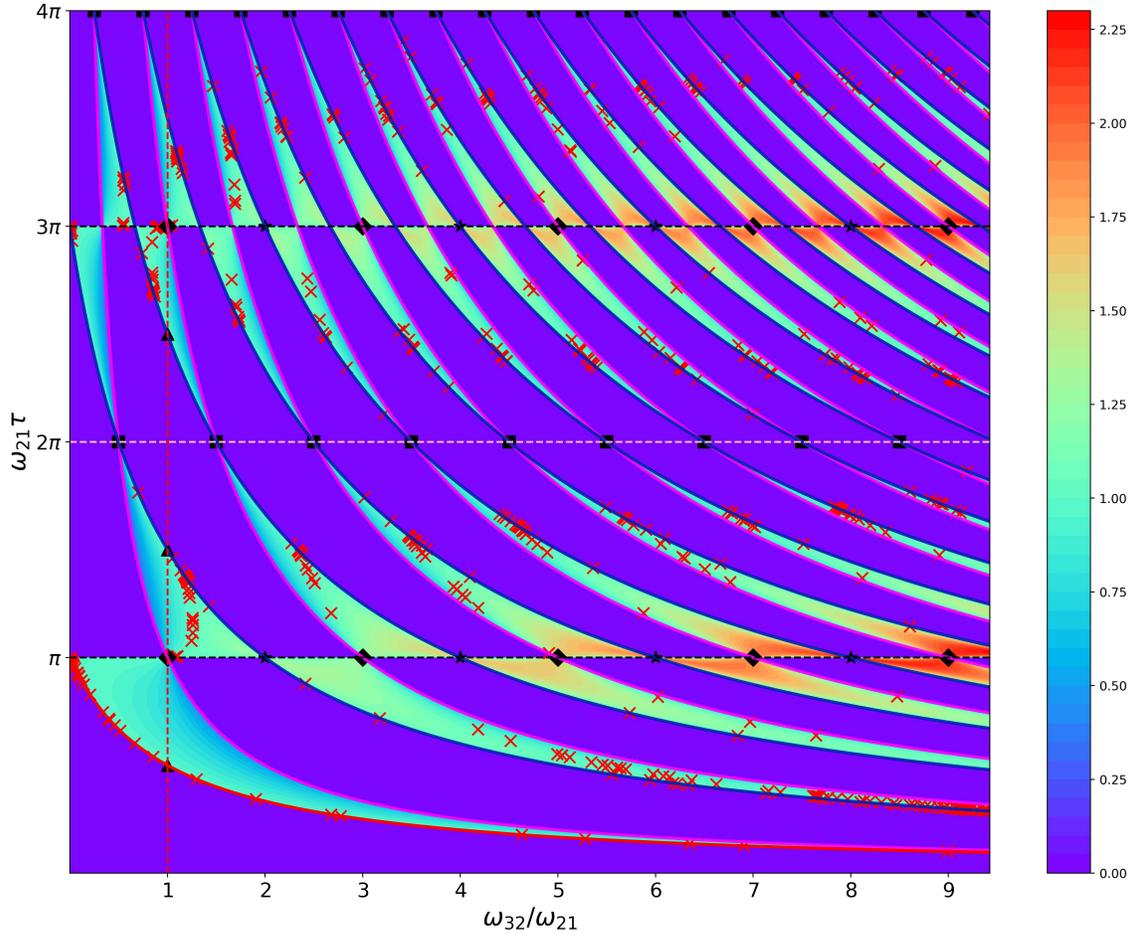


Figura 4.2: Distribuciones posibles para estados del sistema de dos sitio con dos bosones en el plano adimensional formado  $(\omega_{21}\tau, \omega_{32}/\omega_{21})$ . El gradiente de colores en las franjas señala los valores de  $\alpha$  para cada punto del plano según la ecuación (4.27), mientras que los las «x» en rojo indican las distribuciones para las cuales  $\alpha = 1$ . Marcadores adicionales señalan algunas de las distribuciones  $\{r_i\}$  indicadas en el cuadro 4.1.

- *Familia II*:  $\omega_{j_i}\tau \neq n\pi$  para ambas frecuencias de transición en (4.10). Los elementos de esta familia componen el conjunto más extenso de distribuciones posibles del sistema y corresponden a los puntos en el interior de las franjas de color claro en la Figura 4.2. Si se considera la relación entre las frecuencias de transición  $\omega_{31} = \omega_{21} + \omega_{32}$ , el sistema de ecuaciones (4.11) puede llevarse a las siguientes expresiones para los elementos de la distribución:

$$r_1 = \frac{\sin \omega_{32}\tau}{\sin \omega_{21}\tau + \sin \omega_{32}\tau - \sin \omega_{31}\tau}, \quad (4.21a)$$

$$r_2 = \frac{-\sin \omega_{31}\tau}{\sin \omega_{21}\tau + \sin \omega_{32}\tau - \sin \omega_{31}\tau}, \quad (4.21b)$$

$$r_3 = \frac{\sin \omega_{21}\tau}{\sin \omega_{21}\tau + \sin \omega_{32}\tau - \sin \omega_{31}\tau}. \quad (4.21c)$$

A diferencia de la familia anterior, para los estados de este caso no hay una restricción extra que permita establecer una relación entre el tiempo de evolución a una forma ortogonal y las frecuencias de transición, por lo que única manera de determinar el valor de  $\tau$  para un estado es conocer previamente los valores  $r_i$ ,  $r_j$  y  $r_k$  que corresponden a su representación sobre la base de estados propios de  $\hat{H}$ , así como las frecuencias de transición para esa misma configuración del sistema.

Aunque el muestreo representado en el Figura 4.2 contiene valores de  $\omega_{21}\tau$  en el intervalo  $[0, 4\pi]$ , la periodicidad en la condición de ortogonalidad (4.10) es de  $2\pi$  ya que el operador de propagación satisface  $\hat{U}(\tau) = \hat{U}(\tau + 2\pi)$ , por lo que basta con analizar el comportamiento de una distribución particular en el intervalo  $[0, 2\pi]$  para caracterizar el resto su evolución en el tiempo. Esto es, dentro de este intervalo es posible determinar todas las distribuciones asociadas a las formas ortogonales de un estado inicial si se conoce el valor de  $\tau$ . Como un ejemplo, la distribución dada por  $r_1 = r_3 = 1/2$  con  $r_2 = 0$ , que corresponde a elementos en la Subfamilia Ia, tiene un tiempo de ortogonalidad dado por la ecuación (4.16), que para el caso de un espectro de energías igualmente espaciado,  $\omega_{32} = \omega_{21} = \omega$ , se reduce a  $\tau = \pi/2\omega$ . Para este tiempo de ortogonalidad, un estado inicial alcanzará diferentes estructuras, entre ellas las que conforman el conjunto  $\{|\psi(0)\rangle, |\psi(\tau)\rangle, |\psi(2\tau)\rangle, |\psi(3\tau)\rangle\}$ . Dado un qubit en particular para esta distribución, el conjunto de formas ortogonales que alcanza en su evolución temporal resulta ser un subconjunto de este grupo. Este resultado se ilustra al considerar el siguiente par de qubits asociados a esta distribución:

$$|\psi_1(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|E_1\rangle - e^{i\frac{\pi}{2}}|E_3\rangle), \quad (4.22a)$$

$$|\psi_F(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|E_1\rangle + |E_3\rangle), \quad (4.22b)$$

cuyas matrices de densidad se denotan como  $\rho_1(0)$  y  $\rho_F(0)$ , respectivamente; de manera que es fácil verificar para el primer qubit que  $F(\rho_1(0), \rho_1(\tau)) = F(\rho_1(0), \rho_1(3\tau)) = 0$

y  $F(\rho_1(0), \rho_1(2\tau)) \neq 0$ , mientras que para el segundo qubit  $F(\rho_F(0), \rho_F(2\tau)) = 0$  y  $F(\rho_F(0), \rho_F(\tau)) = F(\rho_F(0), \rho_F(3\tau)) \neq 0$ . Esto es, el primer qubit alcanza dos formas ortogonales distintas formando así el conjunto  $\{|\psi(0)\rangle, |\psi(\tau)\rangle, |\psi(3\tau)\rangle\}$ , donde los últimos dos estados son denotados por ( $\blacktriangle$ ) en los puntos  $(1, \pi/2\omega)$  y  $(1, 3\pi/2\omega)$  de la Figura 4.2; mientras que el segundo qubit sólo accede a una forma ortogonal denotada por ( $\blacklozenge$ ) en el punto  $(1, \pi)$ , y su conjunto de estados ortogonales es  $\{|\psi(0)\rangle, |\psi(2\tau)\rangle\}$ . La información dada por la condición de ortogonalidad (4.10) no es suficiente para determinar en principio la dimensión y los elementos del conjunto de formas ortogonales para un estado inicial arbitrario y sólo permite inferir valores de  $\tau$  para los cuales una misma distribución puede corresponder a una de dichas formas.

### 4.3. El Límite de Rapidez Cuántica

La caracterización del tiempo en el que un estado del sistema llega a una forma ortogonal es esencial en el contexto del procesamiento de información cuántica, si se piensa en una *computadora cuántica* como un sistema que, según una configuración preestablecida, evoluciona a través de una serie de operaciones o *puertas* que inducen transiciones de su estado inicial a estados que son por lo general distinguibles. En este sentido, una condición deseable para que un procesador de información cuántica sea óptimo es que la rapidez con la que cambia de un estado inicial a uno distinguible sea la máxima posible; esto es, que el tiempo  $\tau$  entre formas ortogonales de un estado sea mínima. Este valor mínimo del tiempo es conocido como el *límite de rapidez cuántica*, QSL por sus siglas en inglés, y será denotado en adelante por  $\tau_{QSL}$ . La relación entre las restricciones de un sistema y su  $\tau_{QSL}$ , y cómo estas afectan el control experimental sobre sistemas cuánticos ha sido un tema de amplio interés en las últimas décadas [50-59].

En la Sección 4.2 los estados posibles para el espacio de Hilbert 3-dimensional fueron clasificados de acuerdo a la relación entre las frecuencias de transición propias del sistema aislado y la periodicidad de la condición de ortogonalidad (4.11), sugiriendo que el tiempo de ortogonalidad  $\tau$  está íntimamente ligado a la estadística de las energías propias del sistema. En la literatura se han usado argumentos fundamentales de la teoría cuántica para estimar  $\tau_{QSL}$ , y se reconocen dos cotas principales para el tiempo de ortogonalidad de un estado del sistema. La primera es la cota de Mandelstamm-Tamm [22, 60, 61], que proviene de una reinterpretación del principio de incertidumbre de Heisenberg y está dada por

$$\tau_{QSL} \geq \tau_{MT} = \frac{h}{4\sigma_E}, \quad (4.23)$$

donde  $h$  es la constante de Planck y  $\sigma_E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - E^2}$  es la dispersión de la energía para el sistema, con  $E = \langle \hat{H} \rangle - E_1$  el valor esperado de la energía respecto al nivel  $E_1$  del espectro. La segunda es la cota de Margolus-Levitin, que puede deducirse a

partir de la condición de ortogonalidad entre estados distinguibles [23], y se expresa como

$$\tau_{QSL} \geq \tau_{ML} = \frac{\hbar}{4E}. \quad (4.24)$$

Aunque (4.23) y (4.24) se refieren al mismo valor de  $\tau_{QSL}$ , sus estructuras son distintas y la forma en que se aproximan al tiempo mínimo dependerá de si el espectro del sistema en cuestión cumple que  $E > \sigma_E$  o en su defecto,  $E < \sigma_E$ . De forma general definimos el límite de rapidez cuántica como

$$\tau_{QSL} = \max\{\tau_{MT}, \tau_{ML}\}. \quad (4.25)$$

Se ha demostrado que aunque la diferencia entre ambas aproximaciones es pequeña, esta no resulta despreciable [62]; por ello se ha propuesto un nuevo parámetro  $\alpha = \sigma_E/E$  como el radio entre ambas cotas para discriminar cuando una cota es más oportuna que otra. Así, para  $\alpha < 1$  la cota de Mandelstamm-Tamm resulta ser menor que la de Margolus-Levitin, e inversamente si  $\alpha > 1$ . Ambas cotas coinciden sólo cuando  $\alpha = 1$ . Para el sistema de dos sitios con dos bosones,  $E$  y  $\sigma_E$  están dados de la siguiente manera

$$E = \langle \hat{H} \rangle - E_1 = \hbar\omega_{21}r_2 + \hbar\omega_{31}r_3, \quad (4.26a)$$

$$\sigma_E = \sqrt{\hbar^2\omega_{21}^2r_1r_2 + \hbar^2\omega_{32}^2r_2r_3 + \hbar^2\omega_{31}^2r_3r_1}, \quad (4.26b)$$

de manera que el radio entre las cotas puede expresarse como una función de las frecuencias de transición  $\omega_{ij}$  y de los elementos  $r_i$  de cada distribución de probabilidad,

$$\alpha = \frac{\sigma_E}{\langle \hat{H} \rangle - E_1} = \left[ \frac{r_2 + r_3 \left(1 + \frac{\omega_{32}}{\omega_{21}}\right)^2}{\left[r_2 + r_3 \left(1 + \frac{\omega_{32}}{\omega_{21}}\right)\right]^2} - 1 \right]^{1/2}. \quad (4.27)$$

El gradiente de colores de la Figura 4.2 corresponde a la magnitud del parámetro  $\alpha$  para las distintas distribuciones discutidas en la Sección 4.2. Los puntos marcados con «×» de color rojo en la Figura 4.2 señalan algunas de las distribuciones sobre las cuales  $\alpha \approx 1$ . Estos puntos se encuentran tanto dentro de las franjas como sobre las curvas de color azul oscuro que están asociadas a la distribución  $r_1 = r_3 = 1/2$  con  $r_2 = 0$  de la *Subfamilia Ia*, para la cual (4.27) es simplemente  $\alpha = 1$ . De la misma manera, aunque no se muestra en la Figura 4.2, para la distribución  $r_1 = r_2 = 1/2$  con  $r_3 = 0$  de la misma subfamilia, representada por las rectas negras punteadas, el radio entre las cotas tiene un valor constante  $\alpha = 1$ . Como puede observarse, los valores de  $\alpha$  para los distintos elementos de las Familias I y II se mantienen dentro de un intervalo cercano a la unidad para cada valor de  $\omega_{32}/\omega_{21}$ , pero se distribuyen de manera no uniforme para los distintos valores de  $\omega_{21}\tau$ , por lo que dada una configuración del Hamiltoniano, es decir un valor fijo de  $\omega_{32}/\omega_{21}$ , no resulta sencillo discernir si el uso de una cota sobre la otra permite una mejor aproximación de  $\tau_{QSL}$  para todos los estados posibles. Esto puede observarse en la irregularidad del perfil de los histogramas en la Figura 4.3 que corresponden a un conteo de los valores de  $\alpha$  para algunas de las distribuciones que resuelven la condición de ortogonalidad dados los valores  $\omega_{32}/\omega_{21} = 1, 2, 5$  y  $6.5$ . En

estos histogramas se aprecia además que el intervalo en el cual el conteo se vuelve relevante se desplaza desde valores con  $1 < \alpha$  hasta valores  $\alpha > 1$  conforme  $\omega_{32}/\omega_{21}$  incrementa. Un indicador de esta tendencia es el cambio en la mediana del conjunto formado por los distintos valores de  $\alpha$  para cada  $\omega_{32}/\omega_{21}$ , que puede interpretarse como una tendencia del sistema a presentar una mayor dispersión  $\sigma_E$  con respecto a la energía esperada  $\langle \hat{H} \rangle - E_1$  para un mayor número de distribuciones como consecuencia del aumento en el espaciamiento entre niveles subsecuentes del espectro de energías.

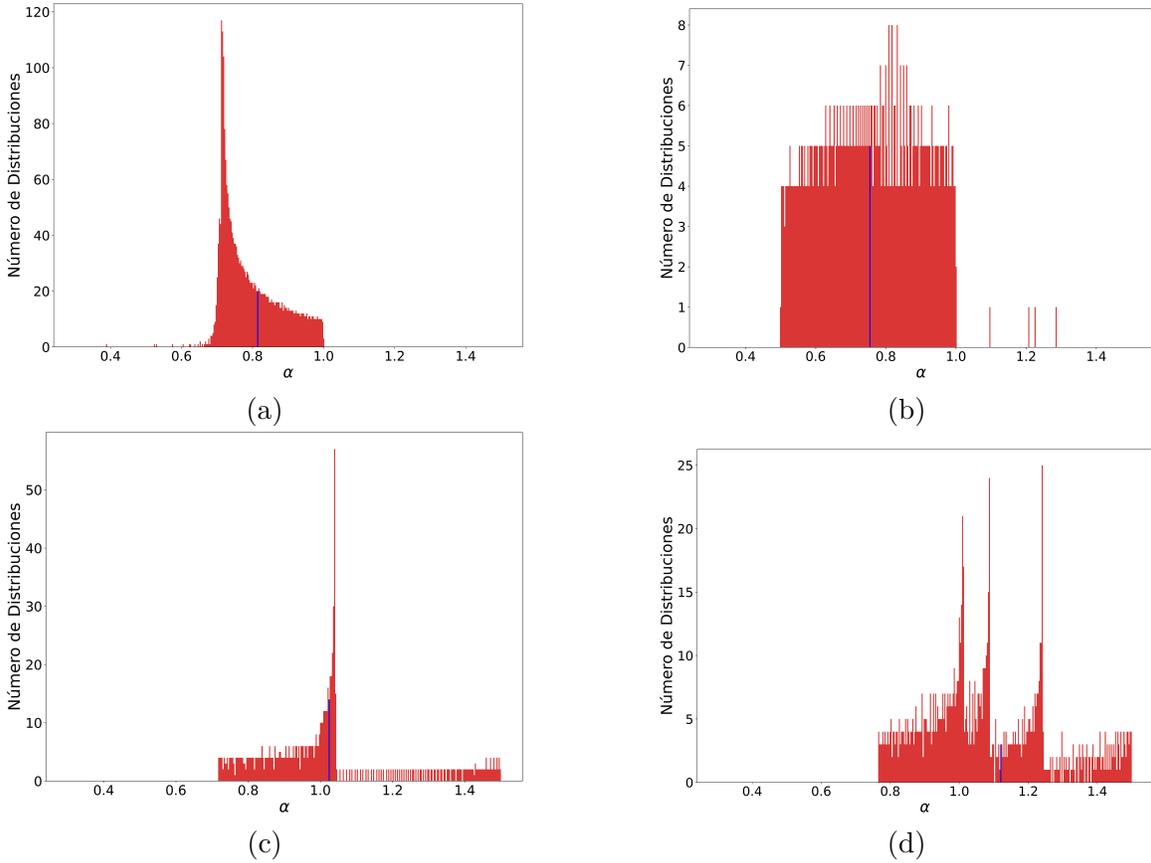


Figura 4.3: Histogramas para los conteos de las incidencias de los distintos valores de  $\alpha$  en el espacio de muestreo  $[0, 10] \times [0, 2\pi]$  sobre mallado de  $5 \times 10^3$  puntos con: **(a)**  $\omega_{32}/\omega_{21} \approx 1$ , **(b)**  $\omega_{32}/\omega_{21} \approx 2$ , **(c)**  $\omega_{32}/\omega_{21} \approx 5$  y **(d)**  $\omega_{32}/\omega_{21} \approx 6.5$ . La columna de color azul denota el intervalo de  $\alpha$  en el cual se encuentra la mediana de cada caso.

En la Figura 4.4 se muestra el comportamiento de la mediana para el perfil de valores de  $\alpha$  en el segmento de plano  $[0, 10] \times [0, 2\pi]$  de la Figura 4.2. Si bien la mediana no brinda información sobre cuáles distribuciones corresponden a cada valor de  $\alpha$ , sí ofrece mayor intuición acerca de cómo la cantidad de distribuciones posibles con  $\alpha > 1$  aumenta conforme  $\omega_{32}/\omega_{21}$  es mayor. Una mediana mayor que 1 indican que existe un mayor número de distribuciones para las cuales  $\tau_{MT}$  es menor que  $\tau_{ML}$ , mientras que una mediana menor que 1 sugiere que las distribuciones para las cuales  $\tau_{MT}$  es mayor que  $\tau_{ML}$  predominan. Aunque la Figura 4.4 muestra que los valores de

la mediana, y por tanto la cantidad de distribuciones con  $\tau_{ML} > \tau_{MT}$ , tiende a crecer conforme el espaciamiento entre niveles de energía se hace mayor, puede notarse que valores pares de  $\omega_{32}/\omega_{21}$  están asociados a mínimos locales. Esta particularidad deriva de que las distribuciones asociadas a estos valores presentan una menor dispersión  $\sigma_E$  con respecto a su energía esperada  $E$  en comparación con las distribuciones en una vecindad pequeña a su alrededor (ver Fig. 4.2).

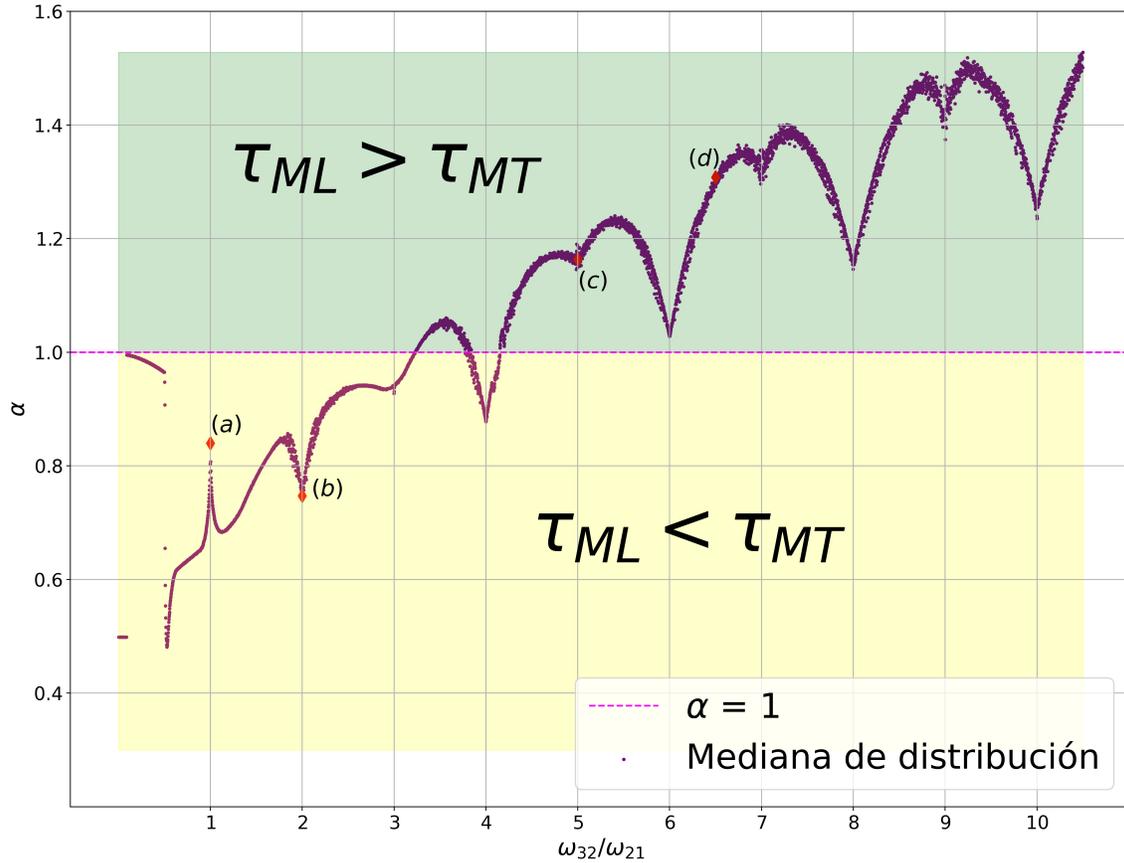


Figura 4.4: Comportamiento de la mediana para el conjunto de distribuciones asociado a un valor de  $\omega_{32}/\omega_{21}$ . El aumento en el valor de  $\alpha$  para la mediana refleja que la cantidad de distribuciones posibles con  $\alpha > 0$  incrementa conforme  $\omega_{32}/\omega_{21}$  es mayor. Las distribuciones asociadas a  $\omega_{32}/\omega_{21}$  par componen conjuntos con una cantidad mayor de elementos donde  $\alpha < 1$  respecto a valores de  $\omega_{32}/\omega_{21}$  cercanos, por lo que la mediana correspondiente se presenta en mínimos locales. Las medianas del conjunto de distribuciones mostrados en la Figura 4.3 se encuentran marcados por (♦) de color rojo.

# Capítulo 5

## Entrelazamiento entre Sitios

En este capítulo se estudia la evolución del sistema de dos sitios con dos bosones a través del cambio en el tiempo de la medida de *correlación* entre los sitios. Vale la pena aclarar previamente a qué nos referimos cuando se habla de *correlación* en este contexto. Para ello puede considerarse nuevamente un sistema bipartito  $\mathbb{A}\mathbb{B}$  compuesto por un subsistema  $\mathbb{A}$  y otro  $\mathbb{B}$ , cuya información global se encuentra cifrada dentro de una función  $\phi_{\mathbb{A}\mathbb{B}}$ . Es posible acceder a la información contenida en  $\phi_{\mathbb{A}\mathbb{B}}$  mediante mediciones en el sistema; y es posible también, mediante una serie de operaciones más específicas, obtener información que corresponde únicamente a alguno de los subsistemas; sin embargo, ya que el sistema está aislado y la cantidad de información en  $\phi_{\mathbb{A}\mathbb{B}}$  es finita, la información sobre el subsistema  $\mathbb{A}$  que pueda obtenerse después de una medición también dependerá de cuanta información pueda obtenerse bajo esa misma medición pero para el subsistema  $\mathbb{B}$ . Cuando realizamos una medida sobre  $\mathbb{A}$  y esta refleja dependencia<sup>1</sup> con lo sucede en  $\mathbb{B}$  decimos que estos subsistemas están *correlacionados*.

En la Sección 2.5 se mencionó cómo la posibilidad de expresar estados cuánticos puros de un sistema bipartito como estados producto se traduce en que el estado puede o no denominarse *separable*. Cuando un estado cuántico es no separable, el sistema presenta correlaciones peculiares que no pueden ser comparadas con ningún tipo de resultado clásico. Las primeras discusiones sobre esta característica de los sistemas cuánticos fueron presentadas por Einstein, Podolsky y Rosen en [63]; por lo que es común referirse a estas correlaciones como del tipo EPR, y ya que el análisis aquí expuesto se limitará en lo siguiente a la presencia de esta única clase de correlaciones, cuando se mencione que un estado está correlacionado se entenderá que presenta correlaciones de tipo EPR. La capacidad de los estados cuánticos para exhibir correlaciones de naturaleza no clásica es denominada *entrelazamiento*. Cuando un estado cuántico del sistema bipartito es no separable, este muestra cierto grado de correlación entre los subsistemas que lo componen y es denominado como un *estado*

---

<sup>1</sup>Hay que notar que esta dependencia en general no implica causalidad.

*entrelazado.*

La existencia de entrelazamiento en un estado cuántico tiene consecuencias importantes que son fundamentales para áreas como el computo cuántico [64, 65], que han motivado el interés que existe por encontrar nuevas formas de manipularlo y cuantificarlo, tal como sucede con otros recursos del sistema como la energía o la información misma. En este capítulo se presenta un análisis del entrelazamiento producido por la propagación unitaria discutida en la Sección 4.1 para estados asociados a las distribuciones de la Subfamilia Ia mediante el cálculo de su *conurrencia*, para posteriormente abordar las relaciones existentes entre el límite de rapidez cuántica y esta medida de entrelazamiento para cada caso planteado. Uno de los objetivos principales de este capítulo es comparar el entrelazamiento producido bajo configuraciones del Hamiltoniano (3.32) que consideran la interacción a pares entre partículas y las que no la consideran.

## 5.1. Concurrencia como Medida de Entrelazamiento

Existen hasta el momento varias propuestas para medir el entrelazamiento en un sistema cuántico [66, 67], donde la versatilidad de cada una depende de las condiciones bajo las cuales fueron planteadas, reflejando que ante la ausencia de un convenio para una medida única, la descripción matemática del entrelazamiento aún no está completa. Una de las propuestas con mayor aceptación es el *entrelazamiento de formación* [68]. Si  $\rho_{01}$  es la matriz de densidad asociada a un estado puro del sistema bipartito cuyos subsistemas componentes tienen matrices de densidad reducidas  $\rho_0$  y  $\rho_1$ , el entrelazamiento de formación  $E_f(\rho)$  está dado como la entropía de von Neumann asociada a cualquiera de los subsistemas,

$$E_f(\rho) = -\text{Tr}(\rho_1 \log \rho_1) = -\text{Tr}(\rho_0 \log \rho_0). \quad (5.1)$$

Wootters *et. al.* [69, 70] mostraron para un sistema de dos niveles que  $E_f(\rho)$  varía de forma monótona en función de un parámetro  $C$  que es en sí mismo una medida adecuada de entrelazamiento y cuya estimación es más sencilla de calcular que  $E_f(\rho)$  misma, esta medida es conocida como *conurrencia*. El resultado para dos niveles puede generalizarse para sistemas N-dimensionales [71, 72], en particular para un estado puro del sistema bipartito la concurrencia puede expresarse de forma compacta como

$$C(\rho_{01}) = \sqrt{2[1 - \text{Tr}(\rho_0^2)]} = \sqrt{2[1 - \text{Tr}(\rho_1^2)]}. \quad (5.2)$$

Los valores posibles de  $C(\rho_{01})$  están acotados inferiormente por 0 para estados puros separables y por  $\sqrt{2(m-1)/m}$  para estados puros con entrelazamiento máximo, donde  $m$  es el mínimo entre las dimensiones de los espacios de Hilbert asociados a los subsistemas [73]. La expresión (5.2) para un estado del sistema de dos sitios con

dos bosones que es propagado unitariamente en el tiempo puede reescribirse como una función de la distribución de probabilidad  $\{r_n\}$  y de las frecuencias de transición  $\omega_n \in \{0, \omega_{21}, \omega_{31}\}$ , si se escribe la matriz de densidad total como

$$\rho_{01} = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|. \quad (5.3)$$

La matriz de densidad reducida puede calcularse a partir de esta expresión, al denotar por  $|\lambda_i\rangle$  a los elementos de  $\{|2, 0\rangle, |1, 1\rangle, |0, 2\rangle\}$ , que corresponden a la base ordenada de Fock, ya que las entradas de dicha matriz están dadas por

$$(\rho_0)_{jj} = \langle\lambda_j|\rho_{01}|\lambda_j\rangle, \quad (5.4)$$

y componen una matriz diagonal. Sustituyendo (5.3) en (5.4), la traza sobre el cuadrado de la matriz de densidad reducida está dada por la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho_0^2) &= \sum_{j=1}^3 (\langle\lambda_j|\rho_{01}|\lambda_j\rangle)^2 \\ &= \sum_{j=1}^3 (\langle\lambda_j|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\lambda_j\rangle)^2 \\ &= \sum_{j=1}^3 |\langle\lambda_j|\psi(t)\rangle|^4, \end{aligned} \quad (5.5)$$

esta magnitud corresponde a la *pureza* discutida en la sección 2.4 para el estado asociado a la matriz de densidad  $\rho_0$  de uno de los sitios, de manera que la concurrencia resulta una medida del entrelazamiento en el sistema como función de la pureza del estado de uno de sus subsistemas. Con la forma explícita del estado propagado para el sistema de dos sitios con dos bosones (4.7), la pureza (5.5) es igual a

$$\text{Tr}(\rho_0^2) = \sum_{j=1}^3 \left| \sum_{n=1}^3 c_{j,n} \sqrt{r_j} e^{-i\omega_n t} \right|^4, \quad (5.6)$$

donde los coeficientes  $c_{j,n} = \langle\lambda_j|E_n\rangle$  son las proyecciones de los vectores propios del Hamiltoniano sobre los elementos de la base computable. Sustituyendo (5.6) en (5.2), la concurrencia puede estimarse como

$$C_{01}(t) = \left[ 2 \left( 1 - \sum_{j=1}^3 \left| \sum_{n=1}^3 c_{j,n} \sqrt{r_n} e^{-i\omega_n t} \right|^4 \right) \right]^{1/2}, \quad (5.7)$$

y con  $m = \dim(\mathcal{H}_1) = \dim(\mathcal{H}_0) = 3$  la dimensión del espacio de Hilbert para uno de los subsistemas, la concurrencia para este sistema está acotada según la desigualdad

$$0 \leq C_{01}(t) \leq \frac{2}{\sqrt{3}}. \quad (5.8)$$

Con este resultado es posible estudiar la evolución temporal del entrelazamiento generado en distintos estados bajo distintas configuraciones del Hamiltoniano si se provee

la distribución de probabilidad  $\{r_i\}$  correspondiente y se conocen las frecuencias de transición  $\omega_n$  asociadas a su espectro de energías. En esta sección se revisa el comportamiento del entrelazamiento en el sistema bajo la propagación unitaria producida por cuatro configuraciones diferentes de  $\hat{H}$  dado según la ec. (3.32) para tres estados asociados a las distribuciones de la familia Ia, estos serán denotados por

$$|\psi_1(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|E_1\rangle + |E_3\rangle), \quad (5.9a)$$

$$|\psi_2(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|E_1\rangle + |E_2\rangle), \quad (5.9b)$$

$$|\psi_3(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|E_2\rangle + |E_3\rangle). \quad (5.9c)$$

### Configuración Diagonal de $\hat{H}$

Como se mostró en la Sección 3.4, el operador  $\hat{H}$  para el sistema de dos sitios con dos bosones puede ser representado en la base computable como una matriz simétrica de  $3 \times 3$ , cuyas entradas  $H_{ij}$  son funciones de los distintos parámetros asociados a los procesos clasificados en la Sección 3.3, donde la magnitud de  $U_0$ ,  $U_1$ ,  $\varepsilon_0$ ,  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_{01}$  modifica únicamente las entradas  $H_{ii}$  sobre la diagonal de la matriz, mientras que el resto de los parámetros lo hace en las entradas fuera de la diagonal. En consecuencia, es posible obtener una matriz diagonal para  $\hat{H}$  bajo la siguiente configuración:

$$\hat{H}_D = \sum_{\mu=0,1} [\varepsilon_\mu \hat{n}_\mu + U_\mu \hat{n}_\mu (\hat{n}_\mu - 1)] + \varepsilon_{01} \hat{n}_0 \hat{n}_1, \quad (5.10)$$

en este caso, el problema de eigenvalores resulta bastante asequible pues los niveles del espectro de energías están dados por las entradas de la diagonal y pueden expresarse simplemente como  $\{2(\varepsilon_0 + U_0), \varepsilon_0 + \varepsilon_1 + \varepsilon_{01}, 2(\varepsilon_1 + U_1)\}$ , mientras que los estados propios son los elementos que conforman la base de Fock más una fase, con lo cual los coeficientes en (5.7) se reducen a  $c_{j,n} = \langle \lambda_j | \lambda_n \rangle = \delta_{j,n}$ , y la concurrencia resulta una constante en el tiempo que depende sólo de la distribución de probabilidad asociada al estado inicial,

$$\begin{aligned} C_{01}(t) &= \left[ 2 \left( 1 - \sum_{n=1}^3 |\sqrt{r_n} e^{-i\omega_n t}|^4 \right) \right]^{1/2} \\ &= \left[ 2 \left( 1 - \sum_{n=1}^3 r_n^2 \right) \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

A pesar de que el entrelazamiento no cambia durante la propagación, los estados propagados sí evolucionan. Para este Hamiltoniano, puede observarse que los valores de  $\tau$  dados por las ecuaciones (4.16), (4.14) y (4.15) para los estados  $|\psi_1(0)\rangle$ ,  $|\psi_2(0)\rangle$

y  $|\psi_3(0)\rangle$ , respectivamente, son en general diferentes y se encuentran bien definidos,

$$\tau \in \left\{ \frac{\pi}{|2U_0 + \varepsilon_0 - \varepsilon_1 - \varepsilon_{01}|}, \frac{\pi}{|2U_1 + \varepsilon_1 - \varepsilon_0 - \varepsilon_{01}|}, \frac{\pi}{|2(\varepsilon_0 - \varepsilon_1) + 2(U_0 - U_1)|} \right\}, \quad (5.12)$$

mientras que la concurrencia para todos ellos es la misma,  $C_{01} = 1$ . Los valores propios para (5.10) muestran que los coeficientes de los procesos que componen esta configuración contribuyen de forma lineal a la magnitud de cada nivel del espectro para el sistema de dos sitio con dos bosones. Es de esperar que en sistemas con una mayor población de partículas,  $N \gg 2$ , los procesos asociados a  $U_\mu$  y  $\varepsilon_{01}$  cobren más importancia dado que su orden varía según  $n_\mu^2$  mientras que el de  $\varepsilon_\mu$  lo hace en  $n_\mu$ .

### Configuración de $\hat{H}$ con Tunelaje de una Partícula

Aunque en el Hamiltoniano (3.32) los coeficientes  $J_\mu$  y  $J$  son resultado de considerar la existencia de un potencial de interacción a pares y de un potencial externo de confinamiento, respectivamente, ambos están asociados a procesos de tunelamiento de un solo bosón entre sitios. La contribución de ambos términos a la dinámica del sistema y a la evolución del entrelazamiento se revisará en dos configuraciones simples, de las cuales la primera,

$$\hat{H}_{S1} = \varepsilon_1 \hat{n}_1 - J(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1), \quad (5.13)$$

considera únicamente la contribución de la energía en uno de los sitios y la amplitud de tunelaje o salto entre sitios  $J$ . La representación de  $\hat{H}_{S1}$  en la base de Fock corresponde a la matriz simétrica

$$H_{S1} = \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{2}J & 0 \\ -\sqrt{2}J & \varepsilon_1 & -\sqrt{2}J \\ 0 & -\sqrt{2}J & 2\varepsilon_1 \end{bmatrix}, \quad (5.14)$$

cuyo discriminante satisface  $D_{S1} < 0$  que, como se ha discutido en la Sección 3.4, garantiza que los valores propios para esta configuración son todos reales y diferentes. Estos pueden ser estimados a partir de la ecuación (3.47) si se considera que el parámetro de fase (ec. (3.46)) para este caso es  $\theta = \arccos(q/\sqrt{-p^3}) = \arccos(0) = \pi/2$ , con lo cual las energías del espectro, ya ordenadas, están dadas por

$$E_1 = \varepsilon_1 - \sqrt{\varepsilon_1^2 + 4J^2}, \quad (5.15a)$$

$$E_2 = \varepsilon_1, \quad (5.15b)$$

$$E_3 = \varepsilon_1 + \sqrt{\varepsilon_1^2 + 4J^2}; \quad (5.15c)$$

y ya que  $E_2 - E_1 = E_3 - E_2 = \sqrt{\varepsilon_1^2 + 4J^2}$ , el espectro de energías para este caso se encuentra igualmente espaciado, consecuentemente las frecuencias de transición

entre niveles son iguales, esto es  $\omega_{21} = \omega_{32} = \sqrt{\varepsilon_1^2 + 4J^2}/\hbar$ . Por otro lado, los vectores propios respectivos se obtienen a partir de las expresiones (3.50) y (3.51),

$$|E_1\rangle = \frac{1}{\Gamma(\tilde{\varepsilon}_1)\sqrt{1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_1^2}{2} + \frac{\tilde{\varepsilon}_1}{2}\Gamma(\tilde{\varepsilon}_1)}} \left( 1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_1^2}{2} + \frac{\tilde{\varepsilon}_1}{2}\Gamma(\tilde{\varepsilon}_1), \frac{\tilde{\varepsilon}_1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}}\Gamma(\tilde{\varepsilon}_1), 1 \right), \quad (5.16a)$$

$$|E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 + \frac{\tilde{\varepsilon}_1^2}{2}}} \left( -1, -\frac{\tilde{\varepsilon}_1}{\sqrt{2}}, 1 \right), \quad (5.16b)$$

$$|E_3\rangle = \frac{1}{\Gamma(\tilde{\varepsilon}_1)\sqrt{1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_1^2}{2} - \frac{\tilde{\varepsilon}_1}{2}\Gamma(\tilde{\varepsilon}_1)}} \left( 1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_1^2}{2} - \frac{\tilde{\varepsilon}_1}{2}\Gamma(\tilde{\varepsilon}_1), \frac{\tilde{\varepsilon}_1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}}\Gamma(\tilde{\varepsilon}_1), 1 \right), \quad (5.16c)$$

donde  $\tilde{\varepsilon}_1 = \varepsilon_1/J$  y  $\Gamma(\tilde{\varepsilon}_1) = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_1^2 + 4}$ . Con estas ecuaciones es posible calcular la concurrencia (5.7) para los estados (5.9) como función del tiempo  $t$  y del parámetro adimensional  $\tilde{\varepsilon}_1$ . En la Figura 5.1a se muestra la evolución numérica de la concurrencia para el estado  $|\psi_1(0)\rangle$  como una superficie sólida en el espacio  $(J/\varepsilon_1, t/\tau, C_{01})$ , mientras que la Figura 5.1b corresponde a las curvas de nivel para esta misma superficie sobre el plano  $(J/\varepsilon_1, t/\tau)$  en el segmento  $[0.1, 1000] \times [0, 2]$ . Se observa, para  $t/\tau = 0$ , que la concurrencia se mantiene sobre el plano  $C_{01} = 1$  independientemente del valor de  $J/\varepsilon_1$ , este hecho puede ser verificado al expandir la ecuación (5.7) con los elementos  $c_{j,n}$  dados por las entradas de los vectores propios (5.16a) y (5.16c) e implica que, para este caso, el entrelazamiento inicial del estado no cambia a pesar del incremento en la amplitud de tunelamiento entre sitios. Por otra parte, la representación del estado en la base de Fock,

$$|\psi_1(0)\rangle \xrightarrow{J \gg \varepsilon_1} \frac{1}{\sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon}_1^4}{2} + 3\tilde{\varepsilon}_1^2 + 4}} \left[ (2 + \tilde{\varepsilon}_1^2) |2, 0\rangle + (\sqrt{2}\tilde{\varepsilon}_1) |1, 1\rangle + 2|0, 2\rangle \right], \quad (5.17)$$

se satura para valores grandes de  $J/\varepsilon_1$ , donde  $\tilde{\varepsilon}_1 \rightarrow 0$ , convergiendo al *qubit* efectivo  $|\psi_1(0)\rangle = (1/\sqrt{2})(|2, 0\rangle + |0, 2\rangle)$  en la base computable, este estado alcanza una forma ortogonal separable después de propagarse por un tiempo  $\tau$ ,  $|\psi_1(\tau)\rangle = -|1, 1\rangle$ , el cual corresponde a la región alrededor de  $t/\tau = 1$  de la Figura 5.1a. Este comportamiento puede verificarse a partir de la forma del estado propagado (4.7), que en este caso está dado por

$$|\psi_1(t)\rangle \xrightarrow{J \gg \varepsilon_1} \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[ (1 + e^{-i\pi t/\tau}) |2, 0\rangle + \sqrt{2}(1 - e^{-i\pi t/\tau}) |1, 1\rangle + (1 + e^{-i\pi t/\tau}) |0, 2\rangle \right], \quad (5.18)$$

para el cual la concurrencia como función del tiempo evoluciona según la expresión

$$C_{01}(t) \xrightarrow{J \gg \varepsilon_1} \left[ 2 - \frac{1}{8} \left( 9 - 4 \cos \frac{\pi t}{\tau} + 3 \cos \frac{2\pi t}{\tau} \right) \right]^{1/2}, \quad (5.19)$$

alcanzando su mínimo global en  $C = 0$  siempre que  $t = (2n + 1)\tau$  con  $n$  entero, mientras que toma un valor máximo en  $t = (n \pm 1/2)\tau$ .  $C_{01}$  regresa a su valor inicial

en intervalos pares del tiempo de ortogonalidad, es decir, cuando  $t = 2n\tau$ . De esta manera  $|\psi_1(t)\rangle$  sólo alcanza una forma ortogonal diferente en todo su periodo, esto reduce el número de estados distinguibles a los que puede acceder el sistema preparado en esta configuración, como resultado el conjunto de estados ortogonales se reduce a  $\{|\psi_1(0), |\psi_1(\tau)\rangle\}$ .

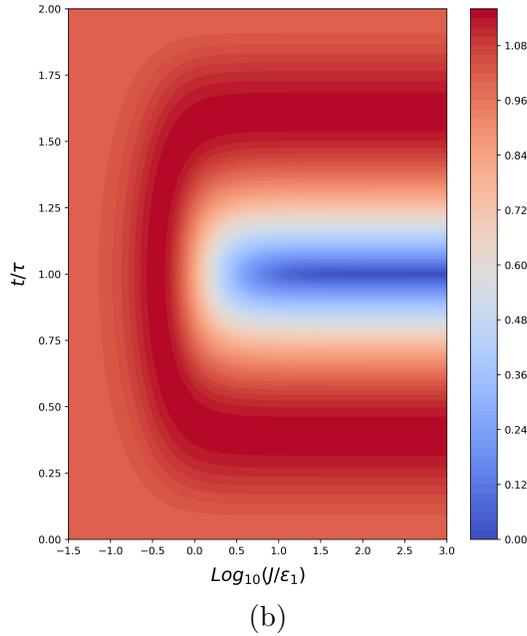
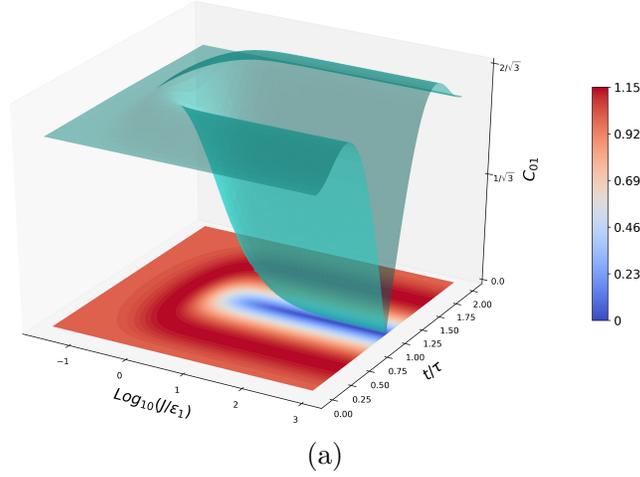


Figura 5.1: Evolución de la concurrencia para el estado  $|\psi_1(0)\rangle$ . En (a) la superficie verde corresponde al cálculo de  $C_{01}$  bajo la propagación producida con distintos valores de  $J/\epsilon$  en el Hamiltoniano. En (b) el comportamiento de la concurrencia se representa por curvas de nivel donde las regiones con un tono rojo oscuro corresponden a zonas donde el entrelazamiento es mayor, mientras que la franja de color azul oscuro alrededor de  $t/\tau = 1$  denota la región donde el estado propagado alcanza una forma ortogonal separable  $|\psi_1(\tau)\rangle$ .

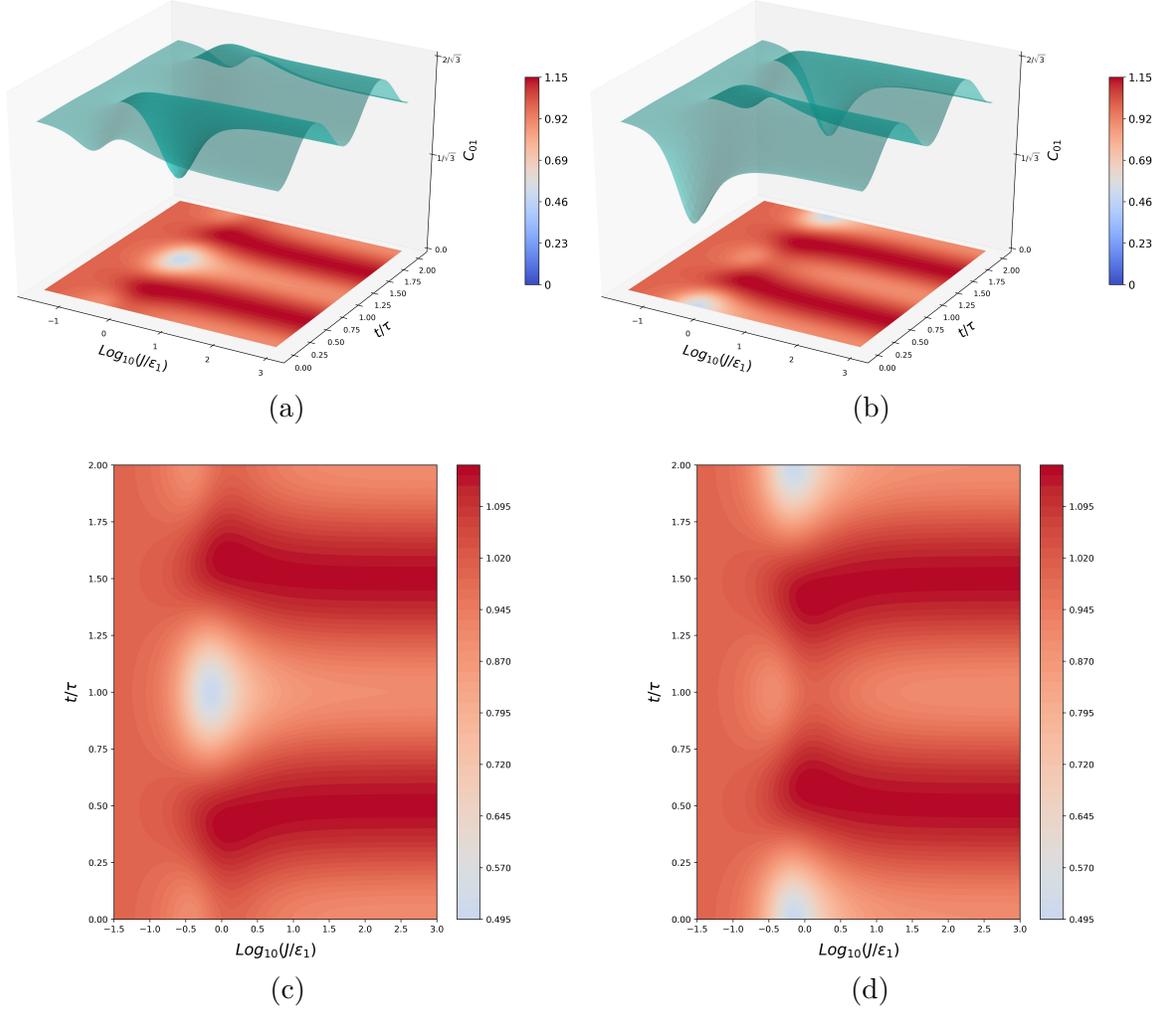


Figura 5.2: Evolución temporal de la concurrencia como función del parámetro adimensional  $J/\varepsilon_1$ . En (a) y (c) el estado inicial es  $|\psi_2(0)\rangle$ , mientras que (b) y (d) muestran la información equivalente para el estado inicial  $|\psi_3(0)\rangle$ . En ambos casos el límite  $\tilde{\varepsilon}_1 \rightarrow \infty$  produce valores de  $C_{01}$  tales que  $\sqrt{13}/4 \leq C_{01} \leq \sqrt{21}/4$ , donde el mínimo corresponde a  $t = \pi/\omega_{32}$ , mientras que el máximo a  $t = \pi/2\omega_{32}$ .

Por otra parte, la concurrencia para los estados  $|\psi_2(0)\rangle$  y  $|\psi_3(0)\rangle$  mostrada en las Figuras 5.2a, 5.2c, 5.2b y 5.2d, exhibe una evolución temporal similar donde los valores de  $C_{01}$  adquieren valores tanto por arriba como por abajo del plano inicial  $C_{01} = 1$  sin alcanzar una forma separable, y donde valores  $J/\varepsilon_1 \rightarrow 0$  producen concurrencias con una diferencia de fase entre sí de aproximadamente de una unidad en el eje  $t/\tau$ , ya que ambos estados tienen el mismo valor numérico de  $\tau$  (ver Sección 5.2), esto se traduce en que para valores pequeños de la amplitud de salto  $J$  el entrelazamiento producido en el mismo intervalo de tiempo será muy parecido para ambos estados, al obedecer  $C_{01}(|\psi_3(t + \tau)\rangle) \approx C_{01}(|\psi_2(t)\rangle)$ . En el extremo opuesto, para valores  $J/\varepsilon_1 \rightarrow \infty$ , es decir, cuando  $\tilde{\varepsilon}_1 \rightarrow 0$ , esta diferencia de fase deja de tener relevancia en la producción de entrelazamiento entre los sitios a medida que las representaciones de ambos estados

en la base Fock se saturan. Esto puede comprobarse al notar que las formas de ambos estados en este límite,

$$|\psi_2(t)\rangle \xrightarrow{J \gg \varepsilon_1} \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{1}{\sqrt{2}} - e^{-i\pi t/\tau} \right) |2, 0\rangle + |1, 1\rangle + \left( \frac{1}{\sqrt{2}} + e^{-i\pi t/\tau} \right) |0, 2\rangle \right], \quad (5.20a)$$

$$|\psi_3(t)\rangle \xrightarrow{J \gg \varepsilon_1} \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{e^{-2i\pi t/\tau}}{\sqrt{2}} - e^{-i\pi t/\tau} \right) |2, 0\rangle - e^{-2i\pi t/\tau} |1, 1\rangle + \left( \frac{e^{-2i\pi t/\tau}}{\sqrt{2}} + e^{-i\pi t/\tau} \right) |0, 2\rangle \right], \quad (5.20b)$$

están compuestas por distribuciones de probabilidad que difieren en una fase no trivial pero producen valores de  $C_{01}$  idénticos para ambos casos, tal como puede apreciarse si se calcula la expresión (5.7) para cualquiera de ambos estados,

$$C_{01}(t) \xrightarrow{J \gg \varepsilon_1} \left[ 2 - \frac{1}{4} \left( \frac{15}{4} - \cos \frac{2\pi t}{\tau} \right) \right]^{1/2}, \quad (5.21)$$

que alcanza su mínimo en  $t = n\tau$  y su máximo tanto en  $t = (n \pm 1/2)\tau$ , acotando la concurrencia a la que puede acceder cualquiera de este par de estados en este límite como  $\sqrt{13}/4 \leq C_{01}(t) \leq \sqrt{21}/4$ .

La segunda configuración corresponde a la adición de la amplitud de salto  $J_\mu$  y los respectivos elementos que la acompañan a los ya considerados en  $\hat{H}_{S_1}$ , conformando el Hamiltoniano  $\hat{H}_{S_2}$  como

$$\hat{H}_{S_2} = \varepsilon_1 \hat{n}_1 - J(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1) - J_1[\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1(\hat{n}_1 - 1) + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 \hat{n}_1] - J_0[\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1 \hat{n}_0 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0(\hat{n}_0 - 1)], \quad (5.22)$$

cuya representación matricial sobre la base computable es de la siguiente manera

$$H_{S_2} = \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{2}(J + J_0) & 0 \\ -\sqrt{2}(J + J_0) & \varepsilon_1 & -\sqrt{2}(J + J_1) \\ 0 & -\sqrt{2}(J + J_1) & 2\varepsilon_1 \end{bmatrix}. \quad (5.23)$$

Como se menciona en la Sección 3.3, las amplitudes de salto  $J_\mu$  están asociadas a procesos de tunelamiento cuya contribución es proporcional al número de ocupación de cada sitio y bajo el supuesto de un sistema de dos sitios idénticos resulta natural suponer que  $J_0 = J_1$ . Así, para el sistema de dos sitios con dos bosones, la representación matricial de  $\hat{H}_{S_2}$  es idéntica a la de  $\hat{H}_{S_1}$  bajo el cambio de variable  $J \rightarrow (J + J_1)$ , generando expresiones equivalentes a las ecuaciones (5.15) para su espectro de energías así como vectores propios que pueden ser descritos por las ecuaciones (5.16). En última instancia, dada la reducida población del sistema, la configuración  $\hat{H}_{S_2}$  puede reducirse a  $\hat{H}_{S_1}$  sin alterar significativamente la estructura de los elementos mencionados ni la dinámica que estos producen para este sistema en particular.

### Configuración de $\hat{H}$ con Tunelaje de dos Partículas

La última configuración consiste en incluir el elemento asociado al tunelamiento por pares presentado en la ecuación (3.27b) junto con los elementos del Hamiltoniano

$\hat{H}_{S_2}$ . En conjunto, estos procesos conforman el Hamiltoniano  $\hat{H}_P$  que está dado por

$$\begin{aligned} \hat{H}_P = & \varepsilon_1 \hat{n}_1 - J(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1) - J_1[\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1(\hat{n}_1 - 1) + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 \hat{n}_1] - \\ & J_0[\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1 \hat{n}_0 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0(\hat{n}_0 - 1)] - K(\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Si bien las amplitudes para el salto individual  $J$  y  $J_\mu$  modifican solamente las entradas inmediatas fuera de la diagonal para las matrices  $H_{S_1}$  y  $H_{S_2}$ , la amplitud de tunelaje a pares  $K$  hace lo mismo pero en las entradas de los extremos opuestos fuera de la diagonal. La representación matricial de  $\hat{H}_P$  sobre la base computable con la consideración  $J_0 = J_1$  es

$$H_P = \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{2}(J + J_0) & -2K \\ -\sqrt{2}(J + J_0) & \varepsilon_1 & -\sqrt{2}(J + J_0) \\ -2K & -\sqrt{2}(J + J_0) & 2\varepsilon_1 \end{bmatrix}, \quad (5.25)$$

y su discriminante  $D_P$  corresponde a una suma negativa de potencias pares de números reales y sus raíces son todas complejas, garantizando para cualesquiera valores de  $\varepsilon_1$ ,  $J$ ,  $J_0$  y  $K$  la siguiente desigualdad se cumple de forma estricta

$$D_P = -\frac{4\varepsilon_1^6}{27} \left[ 4(4\tilde{J}^2 + \tilde{K}^2)(\tilde{J}^2 - 2\tilde{K}^2)^2 + 3(2\tilde{J}^2 + 2\tilde{K}^2 + \frac{1}{4})^2 + \frac{1}{16} \right] < 0, \quad (5.26)$$

con  $\tilde{J} = (J + J_0)/\varepsilon_1$  y  $\tilde{K} = K/\varepsilon_1$ , esto resulta importante pues (5.26) es la condición necesaria para que el espectro de energías producido por  $\hat{H}_P$  no presente degeneración en ninguno de sus niveles y las frecuencias de transición del espectro sean no nulas. Así, las expresiones para las energías de cada nivel del espectro, se obtienen según la ecuación (3.47) como

$$E_1 = \frac{4\varepsilon_1}{\sqrt{3}} \left( \tilde{K}^2 + \tilde{J}^2 + \frac{1}{4} \right)^{1/2} \cos\left(\frac{\phi}{3} + \frac{2\pi}{3}\right) + \varepsilon_1, \quad (5.27a)$$

$$E_2 = \frac{4\varepsilon_1}{\sqrt{3}} \left( \tilde{K}^2 + \tilde{J}^2 + \frac{1}{4} \right)^{1/2} \cos\left(\frac{\phi}{3} + \frac{4\pi}{3}\right) + \varepsilon_1, \quad (5.27b)$$

$$E_3 = \frac{4\varepsilon_1}{\sqrt{3}} \left( \tilde{K}^2 + \tilde{J}^2 + \frac{1}{4} \right)^{1/2} \cos\left(\frac{\phi}{3}\right) + \varepsilon_1, \quad (5.27c)$$

donde el orden entre las energías proviene de considerar el comportamiento del parámetro de fase  $\phi$ , dado por la ecuación (3.46), como función de  $\tilde{J}$  y  $\tilde{K}$  de forma independiente, ya que el cálculo de los parámetros reducidos  $p$  y  $q$  según (3.39) como funciones de las entradas de  $H_P$ , permite obtener la expresión

$$\phi(\tilde{J}, \tilde{K}) = \arccos \left[ -\frac{3\sqrt{3}\tilde{K}\tilde{J}^2}{2(\tilde{J}^2 + \tilde{K}^2 + \frac{1}{4})^{3/2}} \right], \quad (5.28)$$

que tiene por imagen al intervalo  $[\pi/2, \pi]$  si  $\tilde{K} > 0$  y  $\tilde{J} > 0$ , de manera que todos los posibles valores de  $\phi$  obtenidos por (5.28) garantizan la relación  $E_1 < E_2 < E_3$  de manera estricta. Además de esto, y como se comentará en la siguiente sección,

este parámetro resulta sumamente relevante al brindar información sobre que tipo de espaciamiento presenta el espectro de energías, puede verse, por ejemplo, que una configuración igualmente espaciada del espectro como la producida por  $\hat{H}_{S1}$  y  $\hat{H}_{S2}$  es posible únicamente cuando  $\phi = \pi/2$ , lo cuál sucede en el caso  $\tilde{K} = 0$ , que recupera  $\hat{H}_{S2}$ , y en los límites  $\tilde{J} \rightarrow \infty$ ,  $\tilde{K} \rightarrow \infty$ , que saturan la expresión (5.28). Esto puede corroborarse a partir de las ecuaciones para las frecuencias de transición entre niveles:

$$\omega_{21}(\tilde{J}, \tilde{K}) = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{4\varepsilon_1}{\hbar} \left( \tilde{K}^2 + \tilde{J}^2 + \frac{1}{4} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{\phi}{3}\right), \quad (5.29a)$$

$$\omega_{32}(\tilde{J}, \tilde{K}) = \frac{E_3 - E_2}{\hbar} = \frac{2\varepsilon_1}{\hbar} \left( \tilde{K}^2 + \tilde{J}^2 + \frac{1}{4} \right)^{1/2} \left[ \sqrt{3} \cos\left(\frac{\phi}{3}\right) - \sin\left(\frac{\phi}{3}\right) \right], \quad (5.29b)$$

$$\omega_{31}(\tilde{J}, \tilde{K}) = \frac{E_3 - E_1}{\hbar} = \frac{2\varepsilon_1}{\hbar} \left( \tilde{K}^2 + \tilde{J}^2 + \frac{1}{4} \right)^{1/2} \left[ \sqrt{3} \cos\left(\frac{\phi}{3}\right) + \sin\left(\frac{\phi}{3}\right) \right], \quad (5.29c)$$

para las cuales  $\phi = \pi/2$  produce una configuración con  $\omega_{31} = 2\omega_{21} = 2\omega_{32}$ . Expresiones analíticas para los estados propios de  $H_P$  también pueden obtenerse a partir de las ecuaciones 3.50 y 3.51, sin embargo dada su extensión y complejidad como funciones de  $\tilde{J}$  y  $\tilde{K}$ , han sido omitidas del análisis que se presenta a continuación.

A diferencia de los casos anteriores donde la configuración del Hamiltoniano podía, en última instancia, expresarse a partir de un sólo parámetro asociado a un proceso de tunelamiento individual, la medida de la concurrencia para la configuración  $H_P$  tiene un grado de libertad extra asociado a la amplitud de tunelaje a pares  $K$ , por lo que resulta adecuado revisar la evolución de  $C_{01}$  como función de las amplitudes adimensionales de tunelamiento  $\tilde{J}$  y  $\tilde{K}$  de forma independiente. De manera análoga al caso  $\hat{H}_{S1}$ , la evolución numérica de  $C_{01}(|\psi_1(t)\rangle)$ ,  $C_{01}(|\psi_2(t)\rangle)$  y  $C_{01}(|\psi_3(t)\rangle)$  se revisa la información de cada una en el espacio  $(\tilde{J}, t/\tau)$  o bien sobre  $(\tilde{K}, t/\tau)$ , restringidos al segmento de plano  $[0.1, 1000] \times [0, 2]$ , pero distinguiendo la configuración de los parámetros en dos maneras distintas: la primera consiste en fijar un valor de  $\tilde{K}$  y variar  $\tilde{J}$  en el intervalo  $[0.1, 1000]$ , mientras que la segunda mantiene  $\tilde{J}$  fijo y toma  $\tilde{K}$  como variable en el mismo intervalo. Con la intención de reducir la complejidad del álgebra, se fija  $J_0 = 0$  en ambos casos. Los resultados se muestran en las Figuras 5.3, 5.4 y 5.5.

Para el primer estado,  $|\psi_1(t)\rangle$ , la concurrencia inicial como función de  $\tilde{J}$  tiene un comportamiento significativamente distinto en comparación con el mostrado por la configuración  $\hat{H}_{S1}$ , siendo la única diferencia entre esta última y  $\hat{H}_P$  un valor constante de  $\tilde{K} = 0.8$ . Mientras que para  $\hat{H}_{S1}$ ,  $C_{01}(|\psi_1(0)\rangle)$  era constante para todo  $\tilde{J}$ , para  $\hat{H}_P$  la magnitud para valores de  $\tilde{J}$  cercanos a 0 es menor que la estimada para valores más grandes. Además, puede apreciarse en las Figuras 5.3a y 5.3c que  $C_{01}$  oscila durante la propagación en el tiempo, si  $\tilde{J} \rightarrow 0$ , entre valores máximos y mínimos que aumentan en magnitud conforme  $\tilde{J}$  se acerca a un valor particular; a saber,  $\tilde{J}_M = (2\tilde{K}^2 + 1/2)^{1/2}$ , que corresponde al valor de la amplitud de tunelaje individual para la cual el parámetro de fase  $\phi$  de los eigenvalores (5.27c) alcanza su único máximo si se fija  $\tilde{K}$  constante en (5.28). Dado que para valores  $\tilde{J} > \tilde{J}_M$ , la

conurrencia se satura en  $C_{01}(0) = 1$  recuperando la dinámica generada por  $\hat{H}_{S1}$ ,  $\tilde{J}_M$  puede ser entendido como un valor singular que distingue el orden de importancia entre  $\tilde{J}$  y  $\tilde{K}$  constante. Por otro lado,  $\hat{H}_P$  con  $\tilde{J} = 0.8$  constante invierte la tendencia del caso anterior, generando magnitudes cada vez menores de  $C_{01}(0)$  conforme  $\tilde{K}$  aumenta, hasta tener un valor nulo en el límite  $\tilde{K} \rightarrow \infty$  (ver Figura 5.3b). En este límite, la estructura de  $|\psi_1(t)\rangle$  corresponde a un *qubit* efectivo sobre la base de Fock con la siguiente estructura

$$|\psi_1(t)\rangle \xrightarrow{\tilde{K} \gg \tilde{J}} \frac{1}{2} \left[ (1 - e^{-i\pi t/\tau}) |2, 0\rangle + (1 + e^{-i\pi t/\tau}) |0, 2\rangle \right], \quad (5.30)$$

donde la configuración del espectro igualmente espaciada nos permite escribir nuevamente el tiempo de ortogonalidad como  $\tau = \pi/\omega_{31}$ . La superposición (5.30) sugiere que preparar al sistema en el estado inicial  $|\psi_1(0)\rangle$  es equivalente a configurarlo de manera que el par de bosones se encuentran bien localizados en el sitio con energía base  $\varepsilon_1$ , mientras que el propagarlo durante un intervalo  $t = \tau$  corresponde a desplazar el mismo par de bosones al sitio opuesto. Esta particularidad nos permite comparar el operador de propagación con el operador asociado a una *puerta cuántica* de tipo NOT, muy similar la *puerta-X* de Pauli. La forma funcional de la concurrencia en este límite también se simplifica significativamente,

$$C_{01}(t) \xrightarrow{\tilde{K} \gg \tilde{J}} \left[ 2 - \frac{1}{2} \left( 3 - \cos \frac{2\pi t}{\tau} \right) \right]^{1/2}, \quad (5.31)$$

de donde se puede apreciar que la dinámica del entrelazamiento entre los sitios tiene la mitad del periodo que tendría en su análogo del caso  $\tilde{J} \rightarrow \infty$ , oscilando entre  $C_{01}(t) = 0$  cuando  $t = n\tau$  y  $C_{01}(t) = 1$  cuando  $t = (n \pm 1/2)\tau$  para  $n$  entero. De la misma forma en que  $\tilde{J}_M$  constante puede distinguir entre dos ordenes de evolución;  $\phi$ , ahora como función de  $\tilde{K}$ , tendrá un máximo único en  $\tilde{K}_M = (\tilde{J}^2/2 + 1/8)^{1/2}$ , alrededor del cual las diferencias entre valores de  $C_{01}$  para  $\tilde{K}$  cercanas será menor que en cualquier otra región del intervalo  $[0.1, 1000]$ , este valor define la recta punteada en el plano gradiente de la Figura 5.3d.

Por su parte,  $\hat{H}_P$  con  $\tilde{K}$  constante preserva ligeramente el comportamiento de  $C_{01}(t)$  durante la propagación del estado  $|\psi_2(t)\rangle$ , reduciendo tanto la magnitud de la concurrencia en regiones donde  $\hat{H}_{S1}$  produce mínimos locales, como en el punto que corresponde a su mínimo global, el cual puede ser ubicado en el plano  $(\tilde{J}, t/\tau)$  de la Figura 5.4c como  $(\tilde{J}_M, 0)$ . Como sucede para  $|\psi_1(t)\rangle$ , los valores de  $\tilde{J}$  grandes, particularmente mayores a  $\tilde{J}_M$ , tienden rápidamente a replicar la dinámica que mostraba el sistema bajo  $\hat{H}_{S1}$ . Al fijar  $\tilde{J}$  constante y usar  $\tilde{K}$  como variable (Figuras 5.4b y 5.4d),  $C_{01}(|\psi_2(t)\rangle)$  pierde el comportamiento oscilatorio para valores  $\tilde{K} > \tilde{K}_M$ , que definen la región donde la concurrencia incrementa hasta saturarse. Se tiene que en el límite  $\tilde{K} \rightarrow \infty$ , la estructura de  $|\psi_2(t)\rangle$ , con  $\tau = \pi/\omega_{21}$ , tiende a la siguiente superposición

$$|\psi_2(t)\rangle \xrightarrow{\tilde{K} \gg \tilde{J}} \frac{1}{2} \left[ |2, 0\rangle + \sqrt{2} e^{-i\pi t/\tau} |1, 1\rangle + |0, 2\rangle \right], \quad (5.32)$$

que produce un valor de entrelazamiento entre modos constante en el tiempo,  $C_{01}(t) = \sqrt{5}/2 < 2/\sqrt{3}$ . Mientras en este caso  $\tilde{K} = \tilde{K}_M$  también distingue entre dos regímenes de evolución de la concurrencia para  $|\psi_2(t)\rangle$ ,  $\tilde{K}_M$  no determina la configuración bajo la cual el estado puede alcanzar su mínimo global, como sucede cuando  $\tilde{J}$  es el parámetro variable.

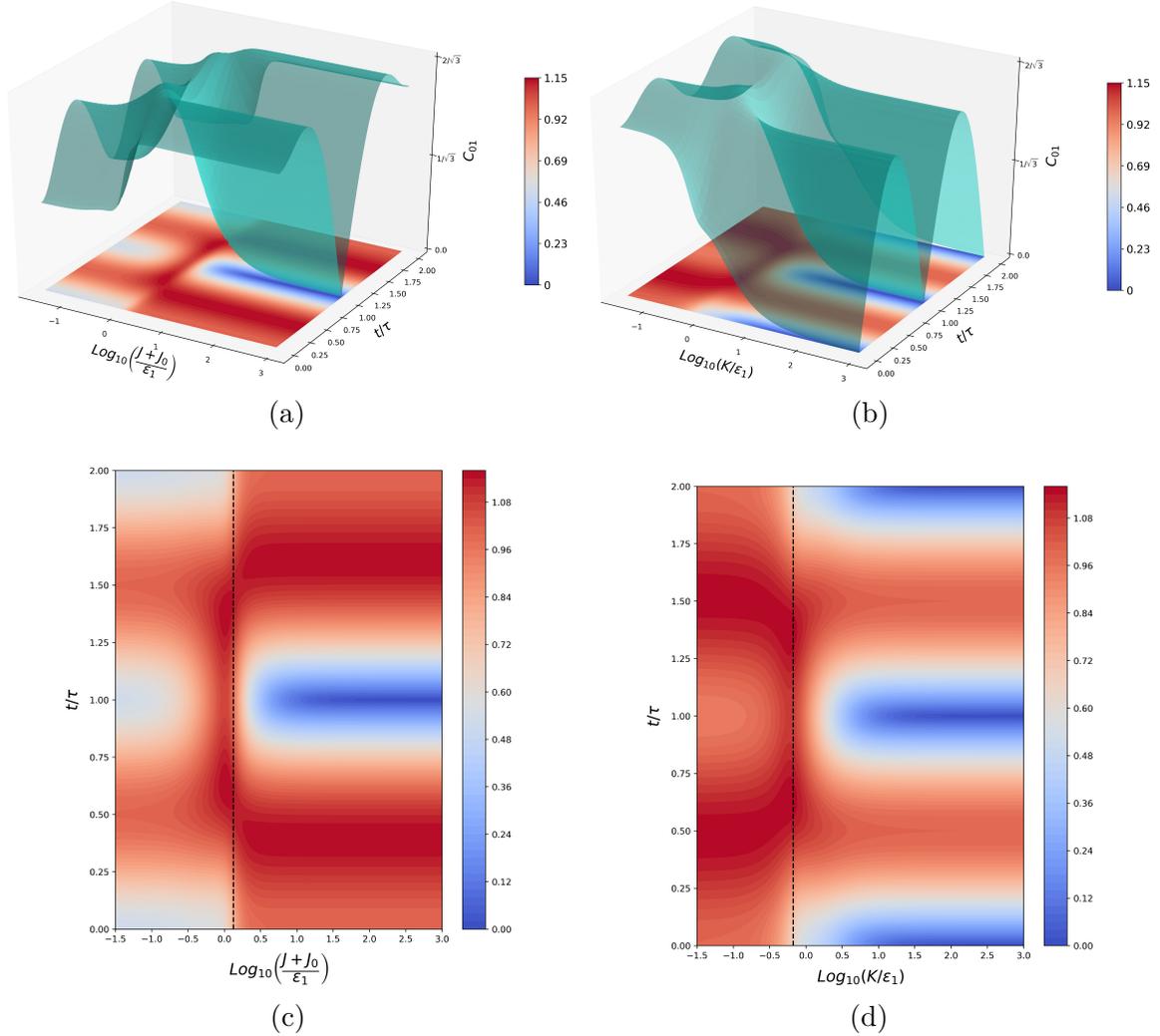


Figura 5.3: Evolución en el tiempo de  $C_{01}$  para el estado propagado  $|\psi_1(t)\rangle$  bajo la configuración de Hamiltoniano  $\hat{H}_P$ . (a) y (b) muestran las superficies producidas en los casos  $\tilde{K} = 0.8$  con  $\tilde{J}$  variable y  $\tilde{J} = 0.8$  con  $\tilde{K}$  como variable en el intervalo  $[0.1, 1000]$ , respectivamente. (c) y (d) son los planos gradiente para dichas superficies. La línea punteada vertical en (c) corresponde al valor  $\tilde{J}_M = (2\tilde{K}^2 + 1/2)^{1/2}$  donde  $\phi$  como función de  $\tilde{J}$  es máximo, mientras que en (d) corresponde a  $\tilde{K}_M = (\tilde{J}^2/2 + 1/8)^{1/2}$  donde  $\phi(\tilde{K})$  alcanza su mayor valor posible.

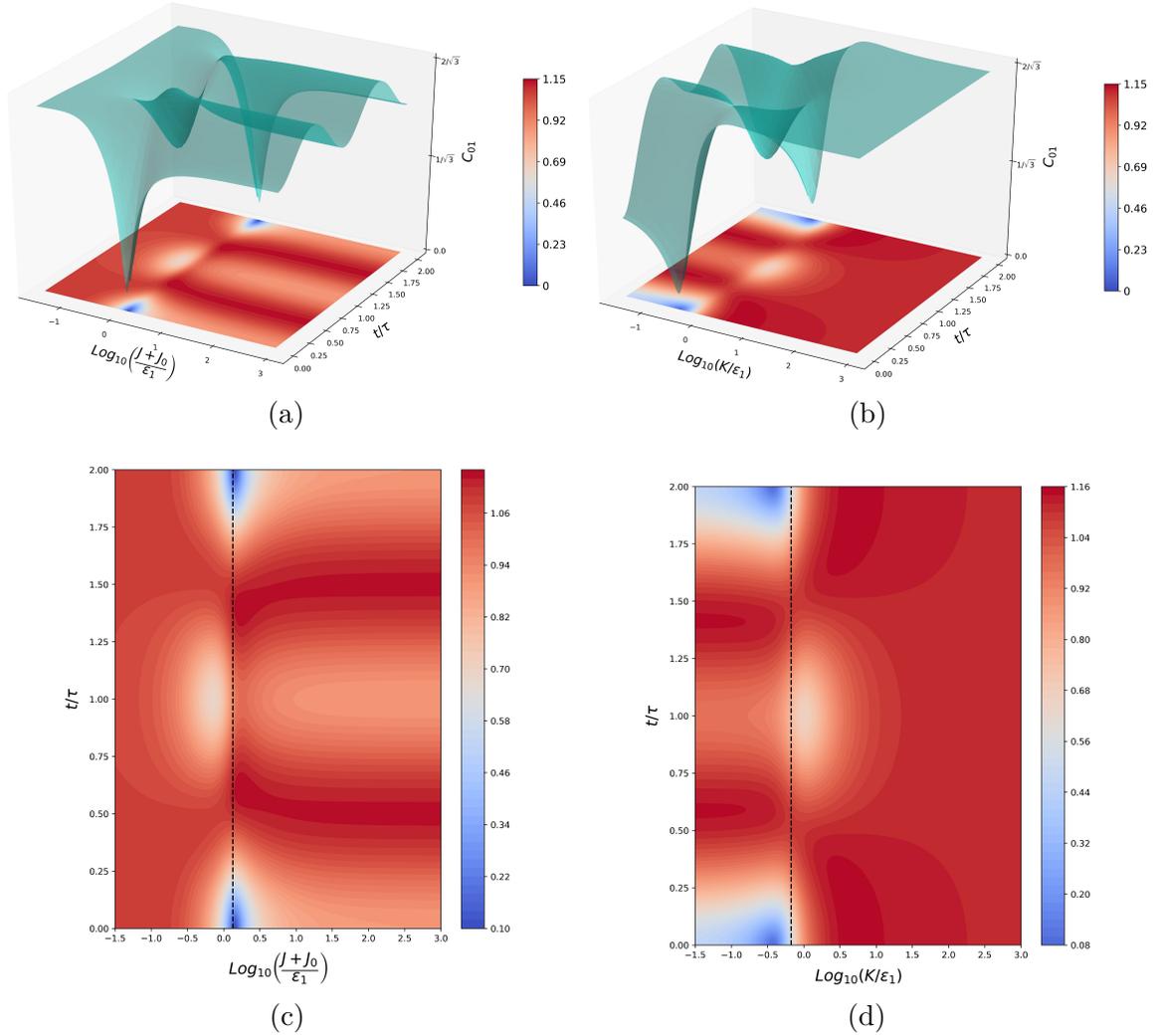


Figura 5.4: Evolución en el tiempo de  $C_{01}$  para el estado propagado  $|\psi_2(t)\rangle$  bajo la configuración  $\hat{H}_P$ . (a) corresponde a la superficie producida bajo  $\tilde{K} = 0.8$  con  $\tilde{J}$  variable, mientras que en (b) los parámetros son  $\tilde{J} = 0.8$  con  $\tilde{K}$  como variable. (c) y (d) son los planos gradiente producido por la magnitud de  $C_{01}$  para ambas superficies, respectivamente. La línea punteada vertical en (c) corresponde al valor  $\tilde{J}_M = (2\tilde{K}^2 + 1/2)^{1/2}$ , mientras que en (d) corresponde a  $\tilde{K}_M = (\tilde{J}^2/2 + 1/8)^{1/2}$ .

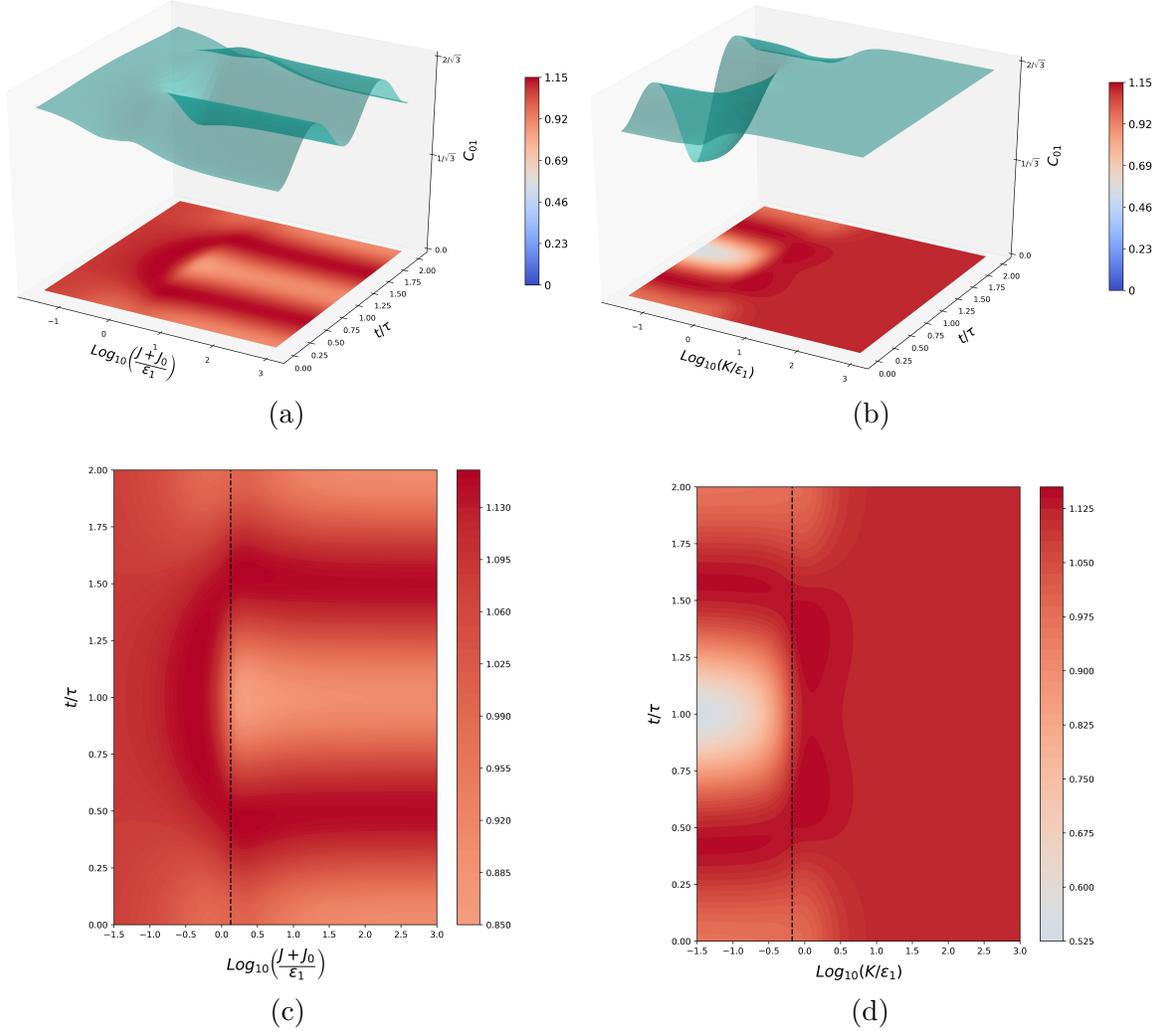


Figura 5.5: Evolución en el tiempo de  $C_{01}$  para el estado propagado  $|\psi_3(t)\rangle$  bajo la configuración de Hamiltoniano  $\hat{H}_P$ . (a) corresponde a la superficie producida bajo la configuración de parámetros  $\tilde{K} = 0.8$  con  $\tilde{J}$  variable, mientras que en (b) los parámetros son  $\tilde{J} = 0.8$  con  $\tilde{K}$  como variable en el intervalo  $[0.1, 1000]$ . (c) y (d) son los planos gradiente producido por la magnitud de  $C_{01}$  para ambas superficies, respectivamente. La línea punteada vertical en (c) corresponde al valor  $\tilde{J}_M = (2\tilde{K}^2 + 1/2)^{1/2}$  donde  $\phi$  como función de  $\tilde{J}$  es máximo, mientras que en (d) corresponde a  $\tilde{K}_M = (\tilde{J}^2/2 + 1/8)^{1/2}$  donde  $\phi$  alcanza su mayor valor posible como función de  $\tilde{K}$ .

Finalmente, la propagación del estado  $|\psi_3(t)\rangle$  bajo  $\hat{H}_P$  con  $\tilde{K}$  constante y  $\tilde{J}$  variable, produce una dinámica de entrelazamiento más robusta que cualquiera de las analizadas anteriormente, donde los valores de  $C_{01}(t)$  como función de  $\tilde{J}$  varían muy poco en la región  $\tilde{J} < \tilde{J}_M$ , mientras que en el límite  $\tilde{J} \rightarrow \infty$  el sistema replica la dinámica producida por  $\hat{H}_{S1}$ , así como la producida durante la propagación del estado  $|\psi_2(t)\rangle$  para esta misma configuración de Hamiltoniano. Por el contrario, la configuración  $\hat{H}_P$  con  $\tilde{J}$  constante y  $\tilde{K}$  variable, exhibe una evolución oscilatoria de  $C_{01}(t)$  con

periodo de  $2\tau$  para valores  $\widetilde{K} < \widetilde{K}_M$ , con un mínimo global de  $C_{01}(|\psi_3(\tau)\rangle) \approx 0.525$  en  $\widetilde{K} = 0$ . En el límite  $\widetilde{K} \rightarrow \infty$   $|\psi_3(t)\rangle$  tiene la forma

$$|\psi_3(t)\rangle \xrightarrow{\widetilde{K} \gg \widetilde{J}} \frac{e^{-2i\pi t/\tau}}{2} \left[ -|2, 0\rangle + e^{i\pi t/\tau} |1, 1\rangle + |0, 2\rangle \right], \quad (5.33)$$

que produce el valor de entrelazamiento constante  $C_{01}(t) = \sqrt{5}/2$  tal como sucede para  $|\psi_2(t)\rangle$  bajo el mismo régimen de parámetros en  $\hat{H}_P$ .

Como muestran las configuraciones anteriores de  $\hat{H}$ , la concurrencia como medida de entrelazamiento en el sistema bipartito puede ser estimada inicialmente si se prepara al sistema en un estado con una representación conocida sobre la base computable, y su dinámica como función del tiempo de propagación será determinada por el espaciamiento entre los niveles que conforman el espectro de energías. En consecuencia, los procesos que componen el Hamiltoniano afectan la producción de entrelazamiento en el sistema en la medida en que pueden alterar sus niveles de energía. Esta cualidad puede ser estudiada a través de la dependencia de  $\phi$  con los coeficientes respectivos a cada proceso. Un ejemplo de dicha dependencia es la existencia de los valores  $\widetilde{K}_M$  y  $\widetilde{J}_M$  para  $\hat{H}_P$ , que maximizan  $\phi$  de manera independiente y permiten distinguir entre regiones donde la producción de entrelazamiento es cualitativamente distinta.

## 5.2. Efectos en el Valor de $\tau$

En la Sección 4.2 fue establecida una relación directa entre el espaciamiento en los niveles del espectro de energías y el tiempo  $\tau$  a través de la condición de ortogonalidad  $\langle \psi(0) | \psi(\tau) \rangle = 0$ . Si bien la estimación de  $\tau$  puede resolverse al hallar la solución del sistema de ecuaciones que deriva de esta condición, está claro que dichas soluciones dependen directamente de la distribución de probabilidad  $\{r_i\}$  que corresponde al estado inicial en que se prepara el sistema, y como resultado estados asociados a distribuciones diferentes alcanzarán una forma ortogonal en tiempos de propagación distintos, aún con los mismos recursos energéticos, es decir, bajo la misma configuración del Hamiltoniano. Existe una relación importante entre el valor de  $\tau$  para un estado dado y la cantidad de entrelazamiento que presenta: se ha demostrado, para algunos casos, que estados puros con entrelazamiento no nulo evolucionan *más rápido* hacia formas ortogonales que cualquier otro estado separable [74-77]. Más aún, los estados formados por la superposición energéticamente simétrica de dos eigenestados de  $\hat{H}$ , tal como lo son los estados  $|\psi_1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle$  y  $|\psi_3\rangle$ , poseen los tiempos de ortogonalidad más cercanos al límite de rapidez cuántica [62],  $\tau_{QSL}$ , discutido en la Sección 4.3.

A pesar de que la relación explícita entre el entrelazamiento en el sistema y el tiempo que le toma evolucionar a una forma ortogonal es, por lo general, difícil de conseguir, la posibilidad de preparar el sistema en un estado del tipo  $|\psi\rangle = (|E_i\rangle + |E_j\rangle)/\sqrt{2}$

permite aproximarse tanto a la cota  $\tau_{QSL}$  como se desee, e implica *per se* que es posible vincular recursos del sistema que suelen ser independientes entre sí, tales como el entrelazamiento y la energía esperada del sistema, o bien, la dispersión de la energía y el entrelazamiento para un estado dado [48]. En la sección anterior la evolución de los estados  $|\psi_1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle$  y  $|\psi_3\rangle$  fue revisada a través del comportamiento de la concurrencia como medida de entrelazamiento a lo largo de diferentes periodos de propagación para distintas configuraciones de  $\hat{H}$ . Numéricamente, el valor de  $\tau$  para cada estado inicial puede calcularse al resolver el sistema de ecuaciones 4.11 si se conocen las frecuencias de transición  $\omega_{ij}$  del espectro correspondiente. En las Figuras 5.6a, 5.6b y 5.6c se presenta un muestreo aleatorio de valores de  $\tau$  calculados de esta manera para cada uno de los estados  $|\psi_i\rangle$  bajo los Hamiltonianos  $\hat{H}_{S1}$  y  $\hat{H}_P$ . Por otro lado, ya que estos estados saturan  $\tau_{QSL}$ , es posible estimar sus tiempos de ortogonalidad a partir de las expresiones (4.23) o (4.24). Para elegir la más adecuada basta con notar que el radio entre cotas para los dos primeros estados satisface  $\alpha(|\psi_1(0)\rangle) = \alpha(|\psi_2(0)\rangle) = 1$ , mientras que para el tercer estado  $\alpha(|\psi_3(0)\rangle) < 1$  en todas las configuraciones del Hamiltoniano presentadas en la sección 5.1, en consecuencia los tiempos de ortogonalidad para  $|\psi_1(0)\rangle$  y  $|\psi_2(0)\rangle$  pueden ser estimados usando la expresión para la cota de Margolus-Levitin o bien la de Mandelstam-Tamm, mientras que para  $|\psi_3(0)\rangle$  esta última resulta más adecuada. De esta manera, la estructura de los estados garantiza que el sistema alcanzará un estado distinguible en un tiempo dado por

$$\tau(\hat{H}, |\psi_i(0)\rangle) = \frac{\hbar\pi}{2\sigma_E(\hat{H}, |\psi_i(0)\rangle)}, \quad (5.34)$$

donde  $\sigma_E(\hat{H}, |\psi_i(0)\rangle)$  es la dispersión de la energía para el estado inicial  $|\psi_i(0)\rangle$  bajo el Hamiltoniano  $\hat{H}$ . Este valor puede calcularse para cada estado según la expresión (4.26b), obteniendo así que la dispersión de la energía es directamente proporcional a la magnitud de una frecuencia de transición efectiva, a saber,  $\sigma_E(\hat{H}, |\psi_1(0)\rangle) = \hbar\omega_{31}$ ,  $\sigma_E(\hat{H}, |\psi_2(0)\rangle) = \hbar\omega_{21}$  y  $\sigma_E(\hat{H}, |\psi_3(0)\rangle) = \hbar\omega_{32}$ ; sustituyendo estas expresiones en 5.34 los valores de  $\tau$  corresponden a las siguiente ecuaciones

$$\tau(\hat{H}, |\psi_1(0)\rangle) = \frac{\pi}{\omega_{31}}, \quad \tau(\hat{H}, |\psi_2(0)\rangle) = \frac{\pi}{\omega_{21}}, \quad \tau(\hat{H}, |\psi_3(0)\rangle) = \frac{\pi}{\omega_{32}}, \quad (5.35)$$

que son equivalentes a los tiempos característicos de la Subfamilia Ia, para  $n = 1$ , presentados en las igualdades (4.16), (4.14) y (4.15), respectivamente. Las ecuaciones (5.35) muestran que la estructura especial de los estados  $|\psi_1(0)\rangle$ ,  $|\psi_2(0)\rangle$  y  $|\psi_3(0)\rangle$  relaciona de forma directa el tiempo que le toma al sistema alcanzar un estado ortogonal con el inverso de la magnitud de una frecuencia de transición, en particular de la frecuencia entre los dos niveles del espectro correspondientes a los estados propios que conforman la superposición  $|\psi_i(t)\rangle$ . En el sentido geométrico, esta frecuencia puede interpretarse como aquella que caracteriza la rotación efectiva de  $|\psi_i(t)\rangle$  en el espacio de eigenestados de  $\hat{H}$  (ver Sección 4.1). Como resultado, los tiempos de ortogonalidad para estos estados pueden estimarse directamente si se conoce el espaciamiento entre niveles subsecuentes del espectro de energías. Se tiene, por ejemplo, para el Hamiltoniano  $\hat{H}_{S1}$  que

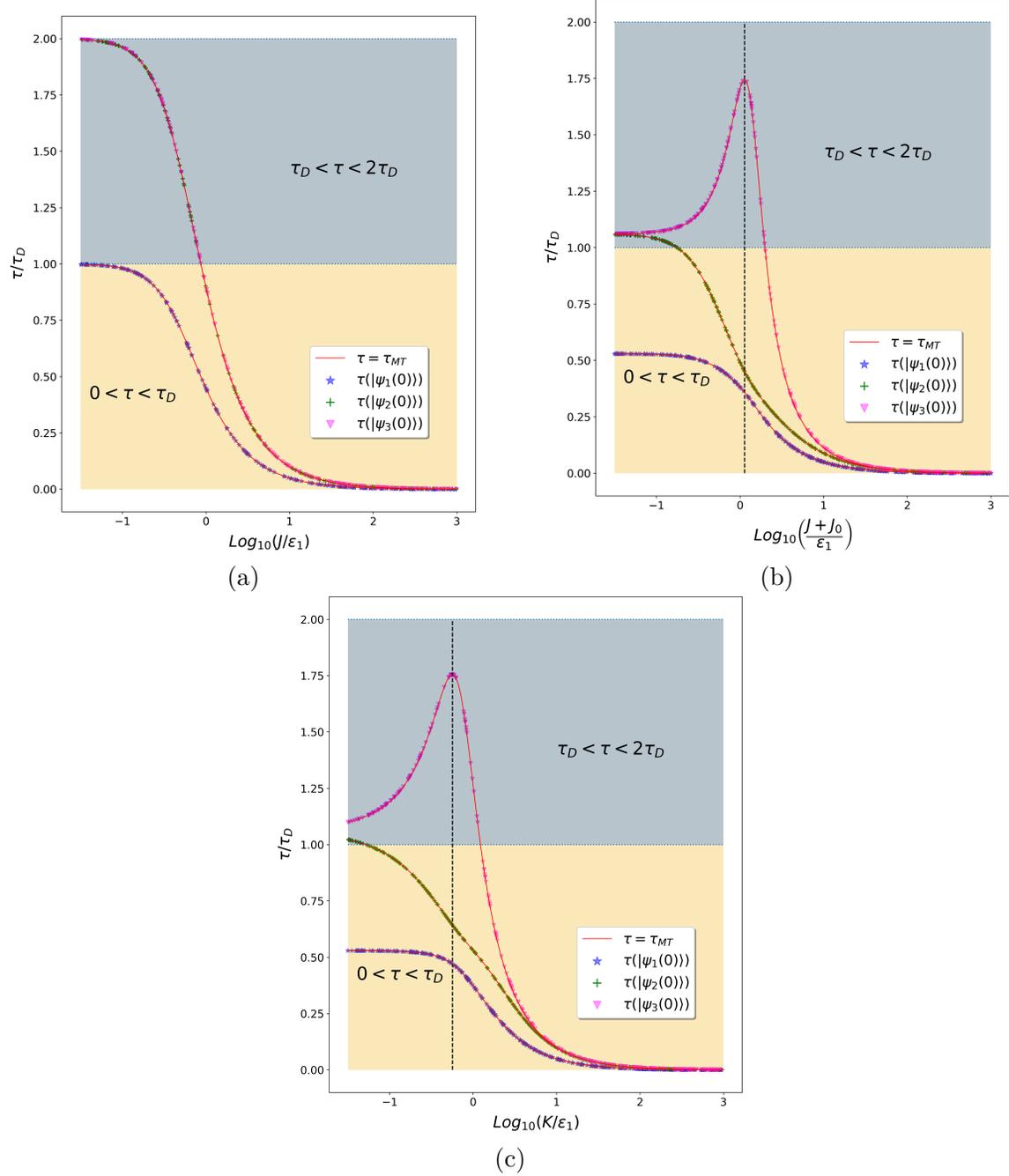


Figura 5.6: En (a) se grafican los tiempos de ortogonalidad obtenidos de forma numérica para los estados  $|\psi_1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle$  y  $|\psi_3\rangle$  bajo el Hamiltoniano  $\hat{H}_{S1}$  como función de  $\tilde{\epsilon}_1$ . En (b) se muestran los valores de  $\tau$  para los mismos estados pero bajo  $\hat{H}_P$  con  $\tilde{K} = 0.8$  y  $J_0 = 0$ , la recta roja punteada indica el valor mínimo de  $\omega_{32}$ . (c) contiene la información equivalente para  $\hat{H}_P$  con  $\tilde{J} = 0.8$  y  $J_0 = 0$ , la recta roja punteada indica mínimo de  $\omega_{32}$ , ahora como función de  $\tilde{K}$ . Los tiempos de ortogonalidad están adimensionalizados por el parámetro  $\tau_D = \pi\hbar/2\epsilon_1$  en todos los casos.

$$\tau(\hat{H}_{S_1}, |\psi_1(0)\rangle) = \frac{\pi\hbar}{2\sqrt{\varepsilon_1^2 + 4J^2}}, \quad (5.36a)$$

$$\tau(\hat{H}_{S_1}, |\psi_2(0)\rangle) = \tau(\hat{H}_{S_1}, |\psi_3(0)\rangle) = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{\varepsilon_1^2 + 4J^2}}. \quad (5.36b)$$

El comportamiento de estos tiempos de ortogonalidad como función del parámetro libre  $J/\varepsilon_1$  corresponde a las líneas sólidas rojas en la Figura 5.6a. Puede observarse que el estado  $|\psi_1(0)\rangle$  alcanzará su primera forma ortogonal *dos veces más rápido* que los estados  $|\psi_2(0)\rangle$  y  $|\psi_3(0)\rangle$  debido a que se satisface la relación  $\omega_{31} = 2\omega_{21} = 2\omega_{32}$ . Este resultado también puede esperarse bajo  $\hat{H}_{S_2}$  y bajo cualquier otra configuración del Hamiltoniano que produzca un espectro de energías igualmente espaciado. También es posible obtener expresiones para los tiempos de ortogonalidad correspondientes bajo el Hamiltoniano  $\hat{H}_P$  que considera el proceso de tunelaje a pares, sustituyendo las frecuencias de transición (5.29a), (5.29b) y (5.29c) en (5.35) se tienen

$$\tau(\hat{H}_P, |\psi_1(0)\rangle) = \frac{\pi\hbar}{2\left(\sqrt{3}\cos\frac{\phi}{3} + \sin\frac{\phi}{3}\right)\sqrt{K^2 + (J + J_0)^2 + \frac{\varepsilon_1^2}{4}}}, \quad (5.37a)$$

$$\tau(\hat{H}_P, |\psi_2(0)\rangle) = \frac{\pi\hbar}{4\left(\sin\frac{\phi}{3}\right)\sqrt{K^2 + (J + J_0)^2 + \frac{\varepsilon_1^2}{4}}}, \quad (5.37b)$$

$$\tau(\hat{H}_P, |\psi_3(0)\rangle) = \frac{\pi\hbar}{2\left(\sqrt{3}\cos\frac{\phi}{3} - \sin\frac{\phi}{3}\right)\sqrt{K^2 + (J + J_0)^2 + \frac{\varepsilon_1^2}{4}}}, \quad (5.37c)$$

cuya evolución como función de los parámetros adimensionales  $\tilde{J} = (J + J_0)/\varepsilon_1$  y  $\tilde{K} = K/\varepsilon_1$ , con  $J_0 = 0$ , conforma las líneas sólidas rojas de las Figuras 5.6b y 5.6c, respectivamente. En comparación con los tiempos (5.36a) y (5.36b), los valores de  $\tau$  bajo  $\hat{H}_P$  son todos distintos si  $\phi(\tilde{J}, \tilde{K}) \neq \pi/2$ , lo cual se satisface siempre que  $\tilde{K} \neq 0$  y  $\tilde{J} \neq 0$  simultáneamente y fuera de los límites  $\tilde{J} \ll \tilde{K}$  y  $\tilde{K} \ll \tilde{J}$ , donde  $\phi(\tilde{J}, \tilde{K})$  tiende asintóticamente a  $\pi/2$ , recuperando un espectro igualmente espaciado así como la relación entre estados  $\tau(\hat{H}_P, |\psi_1(0)\rangle) < \tau(\hat{H}_P, |\psi_2(0)\rangle) = \tau(\hat{H}_P, |\psi_3(0)\rangle)$ . La Figura 5.7 muestra la dependencia de  $\phi$  en los parámetros de  $\hat{H}_P$  dada por la ecuación (5.28) a manera de plano gradiente, en la cual la regiones más oscuras de color azul corresponden a valores de  $\phi(\tilde{J}, \tilde{K})$  más cercanos a  $\pi/2$ . En la misma Figura se muestran las configuraciones de valores  $(\tilde{K}, \tilde{J})$  para los cuales  $\partial\phi/\partial\tilde{J} = 0$  (curva azul) y  $\partial\phi/\partial\tilde{K} = 0$  (curva amarilla), descritas por las ecuaciones independientes

$$\tilde{J}_1(\tilde{K}) = (2\tilde{K}^2 + 1/2)^{1/2}, \quad (5.38a)$$

$$\tilde{J}_2(\tilde{K}) = (2\tilde{K}^2 - 1/4)^{1/2}. \quad (5.38b)$$

Dado que estas ecuaciones son en general diferentes,  $\phi(\tilde{J}, \tilde{K})$  resulta una función sin máximo global que crece monótonamente sobre estas curvas conforme  $\tilde{K}$  aumenta, aproximándose de forma asintótica a  $\pi$ ; el conjunto de valores  $(\tilde{J}, \tilde{K})$  para los

cuales este comportamiento es más notorio conforman la región roja de tono más oscuro. A medida que  $\phi$  se aproxima a este límite sucede que  $\omega_{32} \rightarrow 0$ , es decir, se produce una degeneración en el segundo y tercer nivel del espectro, de forma que  $\tau(\hat{H}_P, |\psi_1(0)\rangle) = \tau(\hat{H}_P, |\psi_2(0)\rangle)$ . Para el resto de las configuraciones posibles donde  $\pi/2 < \phi(\tilde{J}, \tilde{K}) < \pi$ , las frecuencias de transición obedecen la relación  $\omega_{32} < \omega_{21} < \omega_{31}$  y en consecuencia, se preserva el orden entre tiempos de ortogonalidad  $\tau(\hat{H}_P, |\psi_1(0)\rangle) < \tau(\hat{H}_P, |\psi_2(0)\rangle) < \tau(\hat{H}_P, |\psi_3(0)\rangle)$ . Las Figuras 5.6b y 5.6c muestran un ejemplo de este resultado. En el primer caso, al fijar  $\tilde{K} = 0.8$ , el sistema parte de una configuración igualmente espaciada para valores de  $\tilde{J}$  cercanos a 0, donde  $\phi = \pi/2$  con tiempos de ortogonalidad para  $|\psi_2(0)\rangle$  y  $|\psi_3(0)\rangle$  idénticos, que comienzan a diferenciarse a medida que  $\tilde{J}$  aumenta, incrementando la magnitud de  $\tau(\hat{H}_P, |\psi_3(0)\rangle)$  hasta su máximo en  $\tilde{J} \approx 1.132$ , donde la frecuencia de transición  $\omega_{32}$  es mínima; finalmente, cuando  $\tilde{K} \ll \tilde{J}$  el espectro del sistema vuelve a una configuración igualmente espaciada pero más energética. Este caso está representado en la Figura 5.7 por la recta vertical punteada. En el segundo caso, al fijar  $\tilde{J} = 0.8$ , los tiempos de ortogonalidad se comportan de manera similar, pero parten de una configuración con  $\tilde{K} \approx 0.03$  donde los valores de  $\tau(\hat{H}_P, |\psi_2(0)\rangle)$  y  $\tau(\hat{H}_P, |\psi_3(0)\rangle)$  ya pueden distinguirse, y donde este último alcanza su máximo en  $\tilde{K} \approx 0.565$ , valor para el cual  $\omega_{32}$ , esta vez como función de  $\tilde{K}$ , es mínimo. Este ejemplo corresponde a la recta horizontal punteada de la Figura 5.7.

Comparativamente, los tiempos de ortogonalidad (5.37) para los estados bajo  $\hat{H}_P$  muestran que la inclusión del proceso de tunelaje a pares contribuye a la evolución del sistema de dos maneras: la primera es que puede incrementar la amplitud efectiva en todos los niveles de energía respecto a los producidos por  $\hat{H}_{S1}$  y  $\hat{H}_{S2}$  (Hamiltonianos que no consideran este proceso), en tanto se satisfaga que  $[\varepsilon_1^2 + 4J^2] \leq [K^2 + (J + J_0)^2 + \frac{\varepsilon_1^2}{4}]$ ; la segunda es que propicia la condición  $\phi(\tilde{J}, \tilde{K}) \neq \pi/2$ , es decir, induce un factor que *modula* la energía asociada a cada nivel del espectro aumentando o reduciendo la magnitud de las frecuencias de transición  $\omega_{ij}$  para distintas configuraciones de los parámetros libres  $(\tilde{J}, \tilde{K})$ . En consecuencia,  $\hat{H}_P$  puede *acelerar* la evolución del sistema para los estados  $|\psi_i(0)\rangle$  respecto a  $\hat{H}_{S1}$ . En el mismo sentido,  $\hat{H}_P$  también puede *ralentizar* dicha evolución, como sucede en el caso de  $|\psi_3(0)\rangle$ , donde  $\omega_{32}$  puede alcanzar un mínimo global como función de  $\tilde{J}$  o de  $\tilde{K}$ , llevando a  $\tau(\hat{H}_P, |\psi_3(0)\rangle)$  a un máximo; particularmente, si el sistema tiene por parámetro libre a  $\tilde{J}$ , este valor resulta mayor del que correspondería a  $\tau(\hat{H}_{S2}, |\psi_3(0)\rangle)$  bajo la misma magnitud de  $\tilde{J}$ . Este resultado se aprecia al comparar las Figuras 5.6a y 5.6b, donde  $\tilde{K}$  es constante y  $\tau(\hat{H}_{S2}, |\psi_3(0)\rangle) < \tau(\hat{H}_P, |\psi_3(0)\rangle)$  en  $J/\varepsilon_1 \approx 1.132$ .

En suma, los valores de  $\tau(\hat{H}, |\psi_i(0)\rangle)$  dependen directamente de la magnitud en las amplitudes de los distintos procesos que componen  $\hat{H}$ , pero conservan de forma general una relación orden a partir de los estados iniciales  $|\psi_i(0)\rangle$ , a saber,

$$\tau(\hat{H}, |\psi_1(0)\rangle) < \tau(\hat{H}, |\psi_2(0)\rangle) \leq \tau(\hat{H}, |\psi_3(0)\rangle). \quad (5.39)$$

Esta propiedad puede ser inferida directamente, para este caso, de las ecuaciones (5.35) y del comportamiento de las frecuencias  $\omega_{ij}$  bajo los distintos Hamiltonianos

mostrados, pero puede ser extendida a sistemas de mayor dimensionalidad, pues si bien los estados con la forma  $|\psi(0)\rangle = (|E_i\rangle + |E_j\rangle)/\sqrt{2}$  saturan la cota  $\tau_{MT}$ , aquel formado por la superposición de los eigenestados asociados a los niveles con menor y mayor energía es el que lleva esta cota a un valor mínimo [48, 62], como resultado  $|\psi_1(0)\rangle$ , de todos los aquí expuestos, es el estado *más rápido* en evolucionar a una forma ortogonal.

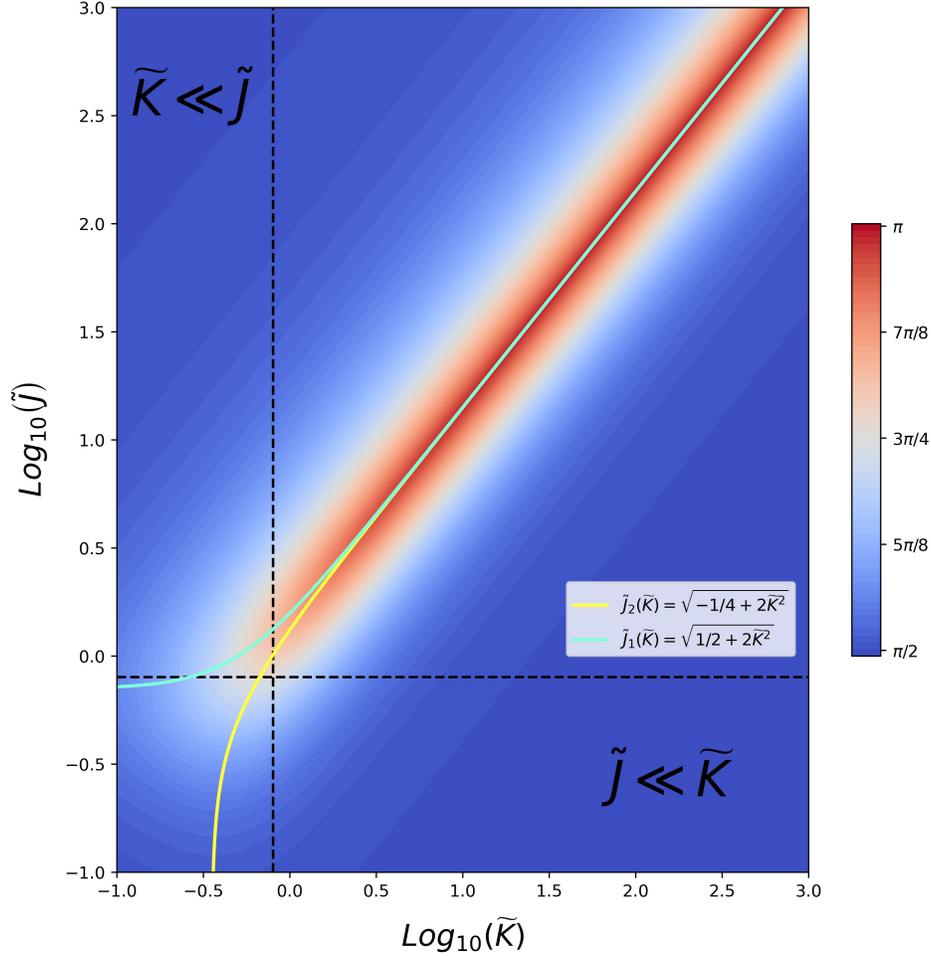


Figura 5.7: Proyección de valores de  $\phi(\tilde{J}, \tilde{K})$  sobre el plano  $[0.1, 1000] \times [0.1, 1000]$ . La recta punteada vertical corresponde a la configuración con de  $\hat{H}_P$  con  $\tilde{K} = 0.8$ , mientras que la horizontal denota los valores de  $\phi$  obtenidos con  $\tilde{J} = 0.8$ ; estas son las configuraciones bajo las cuales los tiempos de ortogonalidad de las Figuras 5.6b y 5.6c fueron calculados, respectivamente. La curva de color azul claro señala los valores de  $(\tilde{K}, \tilde{J})$  para los cuales  $\partial\phi/\partial\tilde{J} = 0$ , de la misma manera la curva amarilla indica los valores para los cuales  $\partial\phi/\partial\tilde{K} = 0$ . En regiones con  $\tilde{J} \ll \tilde{K}$  y  $\tilde{K} \ll \tilde{J}$ , así como cerca del origen,  $\phi(\tilde{J}, \tilde{K})$  tiende a  $\pi/2$ ; mientras que toma valores más cercanos a  $\pi$  conforme los parámetros crecen alrededor de las curvas  $\tilde{J}(\tilde{K}) = (2\tilde{K}^2 + 1/2)^{1/2}$  y  $\tilde{J}(\tilde{K}) = (2\tilde{K}^2 - 1/4)^{1/2}$ .

# Capítulo 6

## Conclusiones

Se ha revisado el comportamiento dinámico de un sistema de dos sitios con dos bosones como ejemplo de sistema cuántico cerrado que evoluciona mediante una propagación unitaria en el tiempo. Partiendo de la condición de ortogonalidad para estados propagados,  $\langle \psi(0) | \psi(\tau) \rangle = 0$ , se mostró una caracterización general de los estados del sistema en términos de sus tiempos de ortogonalidad  $\tau$  y de la distribución de probabilidad  $\{r_i\}$  que define su estructura sobre la base de estados propios del Hamiltoniano. En el mismo sentido, se halló que, bajo una misma configuración de  $\hat{H}$ , no todas las distribuciones permiten construir estados del sistema que alcancen una forma ortogonal y, después de introducir el parámetro  $\alpha = \tau_{MT}/\tau_{ML}$ , resulta que sólo algunos de estos permiten unificar las cotas de Mandelstam-Tamm y Margolus-Levitin, es decir, pocos satisfacen que  $\alpha = 1$ . Una revisión estadística sobre la estimación numérica del indicador  $\alpha$  para distintos valores del radio entre frecuencias de transición,  $\omega_{32}/\omega_{21}$ , sugiere una mayor incidencia de distribuciones que permiten la evolución a estados ortogonales cuyo valor de  $\tau$  halla una cota más adecuada en  $\tau_{MT}$  si  $\omega_{32}/\omega_{21}$  tiene valores pequeños; mientras que para valores grandes de  $\omega_{32}/\omega_{21}$ ,  $\tau_{ML}$  resulta una mejor cota para un mayor número de distribuciones.

Con la intención de comparar el desarrollo de las correlaciones entre los sitios del arreglo a lo largo de la propagación temporal, se calculó la concurrencia para sistemas bipartitos,  $C_{01}$ , como función del tiempo, tomando como ejemplo de estados iniciales a las tres superposiciones posibles formadas por pares de estados propios del Hamiltoniano, con la estructura  $|\psi_k(0)\rangle = (|E_i\rangle + |E_j\rangle)/\sqrt{2}$ . Diferentes configuraciones de  $\hat{H}$  fueron abordadas con el objeto de distinguir entre los efectos de los distintos procesos que componen el Hamiltoniano sobre el incremento o disminución de las correlaciones. Así, para  $\hat{H}_D$ , un Hamiltoniano del sistema que no considera ningún proceso de tunelaje,  $C_{01}$  para todo  $t$  resulta constante, esto es, la cantidad de entrelazamiento inicial se conserva a lo largo del tiempo implicando que las configuraciones diagonales de  $\hat{H}$  no afectan la magnitud de correlación entre los sitios del sistema. En contraste,  $\hat{H}_{S1}$  y  $\hat{H}_{S2}$  como Hamiltonianos que ya consideran un proceso de tunelaje individual modifican significativamente la magnitud de  $C_{01}$  para todos los estados aumentando

y reduciendo el entrelazamiento de los sitios a lo largo de la propagación; resalta el hecho de que para valores grandes de la amplitud de tunelaje individual, es decir, cuando  $J/\varepsilon_1 \rightarrow \infty$ , el estado inicial  $|\psi_1(0)\rangle$  tiene por primera forma ortogonal un estado separable a pesar de conservar la misma cantidad inicial de entrelazamiento para cualquier valor de  $J/\varepsilon_1$ . Una última configuración  $\hat{H}_P$  agrega un proceso de tunelamiento entre sitios a pares, con el cual la concurrencia como función de sus parámetros adquiere un grado de libertad extra, a saber,  $K/\varepsilon_1$ . La cantidad de entrelazamiento producida durante la propagación cambia considerablemente a partir de la relación entre las magnitudes de  $J/\varepsilon_1$  y  $K/\varepsilon_1$ ; se observa para el estado  $|\psi_1(0)\rangle$ , por ejemplo, un comportamiento equivalente al producido por  $\hat{H}_{S1}$  cuando  $K/\varepsilon_1 \ll J/\varepsilon_1$ , mientras que para  $J/\varepsilon_1 \ll K/\varepsilon_1$  la medida de  $C_{01}(0)$  tiende a 0 así como la correspondiente al tiempo  $t = \tau$ , esto implica que el estado tiene una representación inicial en la base de Fock que resulta separable y evoluciona en su primera forma ortogonal a un estado diferente pero también separable. Esta propiedad puede ser entendida a partir de la representación misma de los estados propios de  $\hat{H}$  en la base computable. De la misma forma en que la propagación de un estado inicial puede ser entendida como una rotación compleja sobre el espacio de estados  $|E_i\rangle$ , el aumento independiente de alguno de los parámetros puede representarse como una rotación real sobre el espacio de estados de Fock; y en este aspecto, la rotación que representa la forma funcional de  $\hat{H}_P$  con respecto a  $K/\varepsilon_1$  convierte al estado  $|\psi_1(0)\rangle$  en un estado paralelo a alguno de los vectores de la base computable cuando  $J/\varepsilon_1 \ll K/\varepsilon_1$ . Esta misma relación en los parámetros produce una saturación en  $C_{01}$  para los estados  $|\psi_2(0)\rangle$  y  $|\psi_3(0)\rangle$  que se mantiene constante en el tiempo, conservado así la cantidad de entrelazamiento entre los sitios para ambos estados.

Adicionalmente, se calcularon de forma numérica los valores de los tiempos de ortogonalidad para los estados  $\{|\psi_k(0)\rangle\}$  tanto bajo  $\hat{H}_{S1}$  como bajo  $\hat{H}_P$  y, aprovechando el hecho de que saturan el valor de  $\tau_{QSL}$ , se corroboró que son correctamente descritos por la cota de Mandelstam-Tamm en cada caso. También fue posible obtener información sobre la estructura del espectro de energías producido por cada Hamiltoniano. Se encontró que las configuraciones posibles de  $\hat{H}$  pueden ser discriminadas, para este caso, a partir de un parámetro de fase  $\phi$  que depende de las amplitudes de los procesos, en configuraciones que producen espectros irregularmente espaciados si  $\phi \neq \pi/2$  y en las que los producen igualmente espaciados, con  $\phi = \pi/2$ . En tanto este parámetro está acotado,  $\pi/2 \leq \phi \leq \pi$ , puede agregarse el caso límite  $\phi = \pi$ , que corresponde a un espectro con una degeneración en el segundo y tercer nivel de energía. Ya que para estos estados  $\tau_{MT}$  resulta inversamente proporcional a la magnitud de una frecuencia de transición característica  $\omega_{ij}$ , la magnitud del espaciamiento entre niveles subsecuentes del espectro tiene consecuencias inmediatas en el tiempo de ortogonalidad del sistema. Se tiene que  $\hat{H}_P$  produce frecuencias  $\omega_{ij}$  irregulares que pueden ser mayores o menores que las generadas con  $\hat{H}_{S1}$  si ambos Hamiltonianos varían como función del mismo parámetro; consecuentemente, los tiempos  $\tau$  asociados a  $\hat{H}_P$  pueden ser menores que sus análogos correspondientes a  $\hat{H}_{S1}$ . Particularmente, para  $|\psi_3(0)\rangle$ , es posible incrementar estos tiempos si los parámetros del sistema minimizan  $\omega_{32}$ , ralentizando la evolución del sistema en comparación a la dinámica de

este mismo estado pero bajo  $\hat{H}_{S1}$ .

Finalmente, se obtuvieron expresiones analíticas para las frecuencias de transición producidas por los diferentes Hamiltonianos, cuyo comportamiento como función de los parámetros libres garantiza la relación de orden  $\omega_{32} \leq \omega_{21} \leq \omega_{31}$  y, como resultado, los tiempos de ortogonalidad para los estados  $|\psi_i(0)\rangle$  obedecen la desigualdad  $\tau(|\psi_1(0)\rangle) < \tau(|\psi_2(0)\rangle) \leq \tau(|\psi_3(0)\rangle)$ , indicando que el estado  $|\psi_1(0)\rangle$ , compuesto por la superposición simétrica de los estados propios asociados a los niveles de mayor y menor energía, es el estado del conjunto que garantiza los menores tiempos de ortogonalidad para las configuraciones del Hamiltoniano mostradas.

# Apéndice A

## Desarrollo Numérico

En este apéndice se muestra el procedimiento computacional utilizado para las partes más significativas del trabajo. Ya que la estimación numérica de los distintos parámetros del sistema gira en torno a la magnitud de las energías asociadas a los niveles del espectro así como al valor de las proyecciones de los estados propios de  $H$  sobre la base de Fock, la primera sección explica cómo obtener dichos valores mediante la diagonalización exacta de la matriz asociada al Hamiltoniano (ver Sección 3.33). Aunque este problema se aborda aquí para un sistema con  $\dim(\mathcal{H}) = 3$ , el procedimiento resulta general y puede ser generalizado, en tanto el poder de computo lo permita, a un sistema de  $M$  sitios con  $N$  bosones [37]. La segunda sección muestra cómo se obtuvieron los valores numéricos para  $\tau$  en la Sección 5.2 como la raíz del sistema de ecuaciones (4.21). Finalmente una última sección muestra las funciones para evaluar la concurrencia en su forma computable. El código aquí expuesto fue escrito en Python y sus librerías más recientes a la versión 3.5

### A.1. Diagonalización del Hamiltoniano

La diagonalización del Hamiltoniano se realiza aprovechando la representación de números de ocupación de los estados cuánticos. El primer paso para diagonalizar la matriz asociada a  $H$  es identificar cada estado  $|\lambda\rangle = |n_1 \dots n_N\rangle$  de la base de Fock como un vector de  $N$  entradas,  $[n_1, \dots, n_N]$ . Ya que la dimensión del espacio de Hilbert para el sistema de dos sitios con dos bosones es 3, la base computable para el espacio de Fock está formada por los vectores  $[2,0]$ ,  $[1,1]$  y  $[0,2]$ . Antes de calcular las entradas de matriz  $\langle \lambda | H | \lambda \rangle$ , es necesario dar una estructura de *objeto* a cada vector de la base; para ello se construye un *diccionario* con los elementos de la base de manera que cada vector pueda ser identificado mediante una *llave* única. Es posible generar llaves únicas de formas distintas, para nuestro caso se usa la función  $f(V) = \sum_j (\sqrt{(100)j + 3})V_j$ , donde  $V_j$  es la  $j$ -ésima entrada del vector para el cual se

genera la llave y  $j = 0, 1, 2$ ; con ello el diccionario para elementos de la base de Fock puede construirse mediante la siguiente función:

---

```
def Make_Dict(basis):
    #La variable 'basis' corresponde a la lista ordenada que conforman los
    #elementos [2,0], [1,1] y [0,2]
    T = []
    res = {}
    out_dict = {}

    #Funcion auxiliar para generar keys del diccionario
    def taggin(item):
        hash_key = 0
        for i in range(len(item)):
            hash_key += np.sqrt(100 * i + 3) * item[i]
        return hash_key

    for item in basis:

        hash_key = taggin(item)
        T = np.append(T, hash_key)

    out_dict = dict(zip(T, basis)) #unimos las keys con sus respectivos
    vectores

    return out_dict
```

---

El siguiente paso es calcular el valor de las entradas de la matriz asociada a  $\hat{H}$ . Para lograrlo basta con notar que el Hamiltoniano escrito según la ecuación (3.32) opera sobre un estado de Fock arbitrario  $|n_1, n_2\rangle$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \hat{H}|n_1, n_2\rangle = & g_1|n_1 + 1, n_2 - 1\rangle + g_2|n_1 - 1, n_2 + 1\rangle + g_3|n_1, n_2\rangle + \\ & g_4|n_1 + 2, n_2 - 2\rangle + g_5|n_1 - 2, n_2 + 2\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

donde los coeficientes  $g_i$  son funciones de los parámetros  $\{\varepsilon_\mu, U_\mu, \varepsilon_{01}, J, J_\mu, K\}$ , así como de los números de ocupación del vector original según la relación dada por los operadores bosónicos de creación y aniquilación (ecuaciones (2.15) y (2.17)) que componen  $\hat{H}$ . En tanto la estructura de (A.1) es general, basta con calcular los vectores resultantes correspondientes a cada vector de la base para poder calcular sus respectivas funciones  $g_i$ , que corresponden a las entradas de la matriz  $H$ . Este proceso puede realizarse en dos partes: la primera consiste en calcular los vectores que forman la descomposición (A.1) e identificar si estos se encuentran en la base de Fock, de ser así dicho estado puede ser etiquetado con un índice  $i$ , el cual en un segundo proceso identificará también la estructura de  $g_i$  que debe calcularse para ese elemento resultante. Este proceso está representado por el diagrama de la Figura A.1 y corresponde

a la siguiente función donde el conjunto de parámetros  $\{\varepsilon_0, \varepsilon_1, U_0, U_1, \varepsilon_{01}, J, J_0, J_1, K\}$  esta definido respectivamente como el conjunto  $\{A, B, C, D, F, J, E, L, G\}$ :

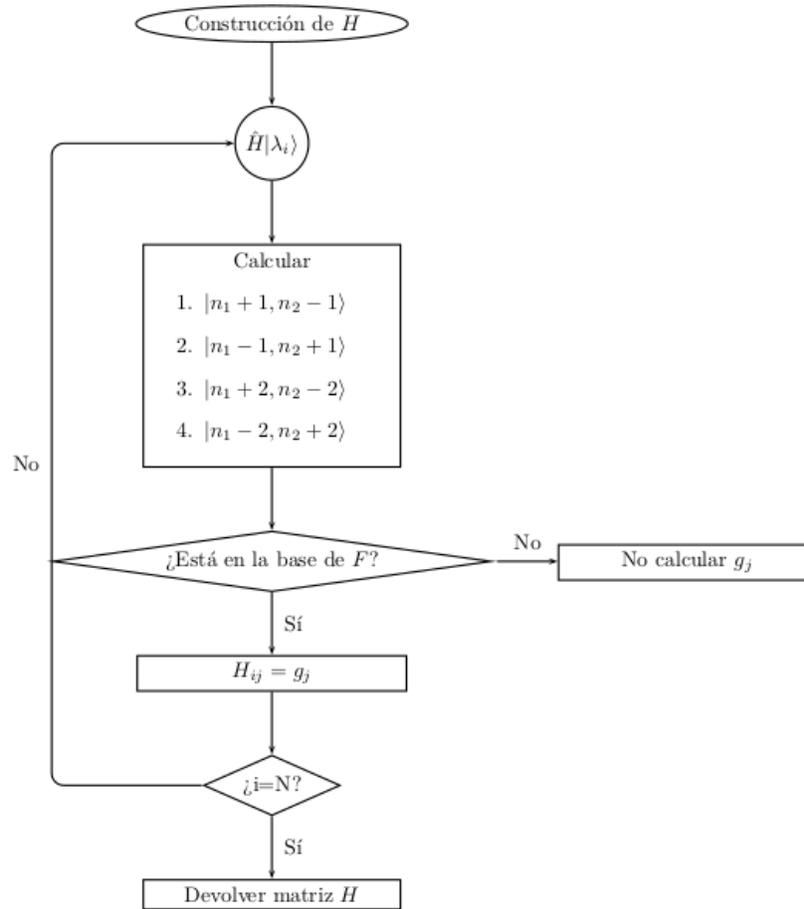


Figura A.1: Diagrama de flujo para la construcción numérica de la matriz asociada al Hamiltoniano  $\hat{H}$ .

---

```

def diagonalize_H(A,B,C,D,E,F,G,J,L):
    #en esta funcion la libreria numpy esta declarada como np
    #asi como la libreria math denotada por mt
    row = []
    column = []
    entries = []

    keys_list = Make_Dict(basis)
    reference_list = list(keys_list.keys())

    #usamos una funcion auxiliar para etiquetar vectores resultantes
    def vector_label(item, k):

        n_1 = item[0]
        n_2 = item[1]
  
```

```

item_ = []

if 0 <= n_1 <= population and 0 <= n_2 <= population:

    if k == 1: #salto individual primer elemento
        item_ = np.add(item, [1,-1])
    elif k == 2: #salto individual segundo elemento
        item_ = np.add(item, [-1,1])
    elif k == 3: #salto a pares primer elemento
        item_ = np.add(item, [2,-2])
    elif k == 4: #salto a pares segundo elemento
        item_ = np.add(item, [-2,2])
    elif k == 5: #elemento diagonal
        item_ = item

    return taggin(item_)
#comenzamos el ciclo principal sobre los elementos de la base
for i in range(dim):

    n_1 = basis[i][0] #extraemos los numeros de ocupacion del vector
    n_2 = basis[i][1]
    #Revisamos cada vector resultante etiquetado de 1 a 4 mas uno
    #extra que corresponde a la entrada diagonal de la matriz:
    for j in range(1,6):

        entry = 0
        #obtenemos las etiquetas y verificamos que esten en la base
        label = keys_list.get(vector_label(basis[i],j))

        if label is not None: #si estan en la base

            ind = reference_list.index(vector_label(basis[i],j))
            #Extraemos los indices i,j de la entrada de matriz
            row.append(ind)
            column.append(i)
            #Calculamos la magnitud de la entrada correspondiente
            if j == 1:
                entry = -(L*n_1 + E*(n_2 - 1))*mt.sqrt(n_2*(n_1 + 1)) -
                    J*mt.sqrt((n_2)*(n_1 + 1))
                entries.append(entry)

            if j == 2:
                entry = -(L*(n_1 - 1) + E*n_2)*mt.sqrt(n_1*(n_2 + 1)) -
                    J*mt.sqrt((n_1)*(n_2 + 1))
                entries.append(entry)

            if j == 3:

```

```

        entry = -G*np.sqrt((n_2)*(n_2 - 1)*(n_1 + 1)*(n_1 + 2))
        entries.append(entry)

    if j == 4:
        entry = -G*np.sqrt((n_1)*(n_1 - 1)*(n_2 + 1)*(n_2 + 2))
        entries.append(entry)

    if j == 5:
        entry = (A*n_2 + B*n_1) + C*(n_1)*(n_1 - 1) +
            D*(n_2)*(n_2 - 1)
        entries.append(entry)

#Al conocer los indices de renglon-columna de cada entrada valida,
#los convertimos en vectores, lo mismo con la magnitud de las entradas
row_ = np.array(row)
column_ = np.array(column)
entries_ = np.array(entries, dtype=float)
#Esta informacion se usa para construir una matriz de esparcimiento
H_sparse = sp.coo_matrix((entries_, (row_,column_)))
#convertimos la matriz de esparcimiento en una matriz convencional
H = H_sparse.toarray ( )

w, v = np.linalg.eig(H) #funcion para diagonalizar, w es un vector de
    eigenvectores y v de eigenvectores

w_, v_ = fixed_sort(w,v)#Usamos una funcion extra para el ordenamiento
    ascendente de vectores y valores

return w_,v_

```

---

Esta última función usa dos funciones auxiliares, la primera es `linalg.eig()` de la librería `numpy` que esta basada en las rutinas `geev` de LAPACK y usa versiones optimizadas de algoritmos de tipo QR, DC, etc. para diagonalizar su matriz argumento obteniendo así los eigenvalores y eigenvectores debidamente normalizados. Ya que la salida de esta función no presenta un orden de magnitud ascendente en los valores propios y sus eigenvalores pueden variar entre iteraciones por una constante de  $-1$ . definimos otra función auxiliar usando un algoritmo *Bubble Sort* para imponer el ordenamiento y homogeneizar las fases de los vectores para todas las salidas:

---

```

def fixed_sort(eigenvalues,eigenvectors):

    arr = eigenvalues
    matri = eigenvectors

    new_matri = np.zeros((len(eigenvectors),len(eigenvectors)))

```

```

for i in range(len(eigenvalues)):
    new_matri[i] = eigenvectors[:,i]
#Usamos una funcion de intercambio de lugares para mover los vectores
#proprios en orden
def swap(i, j):
    mude_array = np.zeros((len(eigenvalues)))
    eigenvalues[i], eigenvalues[j] = eigenvalues[j], eigenvalues[i]
    for k in range(len(eigenvalues)):
        mude_array[k] = new_matri[i][k]
    new_matri[i] = new_matri[j]
    new_matri[j] = mude_array

n = len(eigenvalues)
swapped = True

#un indice mudo comparar la magnitud de eigenvalores a pares e
#intercambiar los vectores correspondientes
x = -1
while swapped:
    swapped = False
    x = x + 1
    for i in range(1, n-x):
        if eigenvalues[i - 1] > eigenvalues[i]:
            swap(i - 1, i)
            swapped = True

#Comparamos el signo de las entradas, para este paso es conveniente
#revisar la convergencia de las expresiones analiticas de los
#vectores propios de manera que el signo impuesto sea adecuado
if new_matri[2][1] >= 0.0:
    new_matri[2] = -1*new_matri[2]
if new_matri[0][1] <= 0.0:
    new_matri[0] = -1*new_matri[0]
if new_matri[1][1] <= 0.0:
    new_matri[1] = -1*new_matri[1]

return eigenvalues, new_matri

```

---

El uso de estas funciones sobre una base adecuada provee un sistema de valores y vectores propios ortonormales y debidamente ordenados a partir de las cuales es posible calcular la mayoría de las ecuaciones de este escrito.

## A.2. Cálculo de $\tau$

Para la estimación numérica de los tiempo de ortogonalidad se usó la función `optimize.fsolve` de la librería `scipy` que implementa una versión optimizada del algoritmo híbrido de Powell para hallar las  $N$  raíces numéricas de un sistema de  $N$  ecuaciones no lineales. El cálculo se realizó sobre la condición de ortogonalidad para los estados del sistema presentada como el sistema de ecuaciones (4.11), las cuales pueden ser fácilmente construidas una vez que se conoce la distribución de probabilidad asociada al estado así como los eigenvalores del Hamiltoniano. Ya que el algoritmo requiere un valor inicial cercano a la raíz de las ecuaciones, se usó la cota de Mandelstam-Tamm (4.23) para estimar una primera aproximación a la raíz efectiva. La siguiente función de código corresponde a la implementación arriba descrita.

---

```
def solving_tau(w,r):
    #los argumentos w y r corresponden al vector con
    #los valores propios de H y al vector con las r's del estado
    w_21 = w[1]- w[0] #calculamos las frecuencias de transicion
    w_32 = w[2]- w[1]
    w_31 = w_32 + w_21
    #Usamos una funcion auxiliar para calcular la cota de MT
    def tau_mand_tamm(r,w_21,w_32,w_31):
        sigma_tau = pow(w_21,2)*r[0]*r[1] + pow(w_32,2)*r[2]*r[1] +
            pow(w_31,2)*r[0]*r[2]
        sigma_tau = mt.sqrt(sigma_tau)
        return mt.pi/(2*sigma_tau)

    initial_root = tau_mand_tamm(r,w_21,w_32,w_31)
    #hacemos una primera aproximacion de la tau efectiva
    x0 = w_21*initial_root
    y0 = w_32*initial_root

    def system_tau(p):
        #Esta funcion auxiliar construye las expresiones para el sistema
        #de ecuaciones
        x,y = p

        f1 = r[0] + r[1]*mt.cos(x) + r[2]*mt.cos(x)*mt.cos(y) -
            r[2]*mt.sin(x)*mt.sin(y)
        f2 = r[1]*mt.sin(x) + r[2]*mt.sin(x)*mt.cos(y) +
            r[2]*mt.cos(x)*mt.sin(y)

        return (f1,f2)

    #La libreria usa el algoritmo hibrido de Powell para encontrar la raiz
    numerical_freq1,numerical_freq2 = optimize.fsolve(system_tau,[x0,y0])
```

```

tau1 = numerical_freq1/w_21
tau2 = numerical_freq2/w_32
#Ya que la raiz fue separada en dos variables
#w_21*t y w_31*t, solo se puede afirmar que la
#raiz es valida cuando t para ambas es identica:
if abs(tau1 - tau2) > 1e-9:
    print('El estado no llega a su forma ortogonal bajo esta
          configuracion de H')
    return 0
else:
    return (tau2 + tau1)/2

```

---

### A.3. Cálculo de la Concurrencia

Con el conocimiento de los valores de energía asociados al espectro de  $\hat{H}$ , así como de las componentes  $\langle E_i | \lambda_j \rangle$  de los eigenestados  $|E_i\rangle$  sobre los elementos de la base de Fock  $\{|\lambda_j\rangle\}$  para cada configuración de los parámetros libres  $J/\varepsilon_1$  o  $K/\varepsilon_1$ , la evolución temporal de la concurrencia puede ser calculada directamente de la expresión (5.7) al descomponerla en la siguiente rutina:

---

```

def get_concurrence(eigenvalor,x,y,t,T):
    """Esta funcion toma como argumentos el vector 'eigenvalor' con los
       valores propios de H, x una lista con los vectores propios
       correspondientes, y el vector con las r's de la distribucion de
       probabilidad, el parametro de tiempo t y la cota T como el tiempo
       numerico de ortogonalidad que adimensiona la evolucion"""
    purity = 0.0
    max_conc = 2./mt.sqrt(3)
    a = (eigenvalor[1]-eigenvalor[0])*T
    b = (eigenvalor[2]-eigenvalor[0])*T
    for m in range(len(x)):
        #Separamos en parte real
        sum_complex_real = x[0][m]*mt.sqrt(y[0])+
            x[1][m]*mt.sqrt(y[1])*mt.cos(t*a)
            +x[2][m]*mt.sqrt(y[2])*mt.cos(t*b)
        #Parte imaginaria
        sum_complex_imag = x[1][m]*mt.sqrt(y[1])*mt.sin(t*a)
            +x[2][m]*mt.sqrt(y[2])*mt.sin(t*b)
        #calculamos el modulo del elemento complejo
        #y sumamos para cada eigenestado
        sqrt_module = pow(sum_complex_real,2) + pow(sum_complex_imag,2)

```

```
purity = purity + pow(sqrt_module,2)

return (1/max_conc)*mt.sqrt(2*(1-purity)) #Regresa el valor de C
normalizado
```

---

# Referencias

- [1] P. Benioff, «The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing machines», *Journal of Statistical Physics* **22**, 563-591 (1980) [10.1007/BF01011339](https://doi.org/10.1007/BF01011339).
- [2] P. Benioff, «Quantum Mechanical Models of Turing Machines That Dissipate No Energy», *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1581-1585 (1982) [10.1103/PhysRevLett.48.1581](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.48.1581).
- [3] Y. Manin, «Computable and uncomputable», Sovetskoye Radio, Moscow **128** (1980).
- [4] R. P. Feynman, «Simulating physics with computers», *International journal of theoretical physics* **21**, 467-488 (1982) <https://doi.org/10.1007/BF02650179>.
- [5] D. Deutsch, «Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer», *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* **400**, 97-117 (1985).
- [6] E. Bernstein y U. Vazirani, «Quantum Complexity Theory», en *Proceedings of the Twenty-Fifth Annual ACM Symposium on Theory of Computing, STOC '93* (1993), págs. 11-20, [10.1145/167088.167097](https://doi.org/10.1145/167088.167097).
- [7] D. Simon, «On the power of quantum computation», en *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* (1994), págs. 116-123, [10.1109/SFCS.1994.365701](https://doi.org/10.1109/SFCS.1994.365701).
- [8] P. W. Shor, «Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer», *SIAM review* **41**, 303-332 (1994) <https://doi.org/10.1137/S0036144598347011>.
- [9] L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. S. Yannoni, M. H. Sherwood e I. L. Chuang, «Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance», *Nature* **414**, 883-887 (2001) [10.1038/414883a](https://doi.org/10.1038/414883a).
- [10] I. H. Deutsch, G. K. Brennen y P. S. Jessen, «Quantum Computing with Neutral Atoms in an Optical Lattice», *Fortschritte der Physik* **48**, 925-943 (2000) [10.1002/1521-3978\(200009\)48:9/11<925::aid-prop925>3.0.co;2-a](https://doi.org/10.1002/1521-3978(200009)48:9/11<925::aid-prop925>3.0.co;2-a).
- [11] M. Saffman, «Quantum computing with neutral atoms», *National Science Review* **6**, 24-25 (2018) [10.1093/nsr/nwy088](https://doi.org/10.1093/nsr/nwy088).

- [12] L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. S. Yannoni, R. Cleve e I. L. Chuang, «Experimental Realization of an Order-Finding Algorithm with an NMR Quantum Computer», *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5452-5455 (2000) 10.1103/PhysRevLett.85.5452.
- [13] A. Blais y A. M. Zagoskin, «Operation of universal gates in a solid-state quantum computer based on clean Josephson junctions between d-wave superconductors», *Phys. Rev. A* **61**, 042308 (2000) 10.1103/PhysRevA.61.042308.
- [14] C. M. Chandrashekar, «Implementing the one-dimensional quantum (Hadamard) walk using a Bose-Einstein condensate», *Phys. Rev. A* **74**, 032307 (2006) 10.1103/PhysRevA.74.032307.
- [15] P. B. Blakie y C. W. Clark, «Wannier states and Bose-Hubbard parameters for 2D optical lattices», *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **37**, 1391-1404 (2004) 10.1088/0953-4075/37/7/002.
- [16] C. J. Foot y M. D. Shotter, «Double well potentials and quantum gates», *American Journal of Physics* **79**, 762-768 (2011) 10.1119/1.3583478.
- [17] M. Anderlini, P. J. Lee, B. L. Brown, J. Sebby-Strabley, W. D. Phillips y J. V. Porto, «Controlled exchange interaction between pairs of neutral atoms in an optical lattice», *Nature* **448**, 452-456 (2007) 10.1038/nature06011.
- [18] A. Zenesini, H. Lignier, C. Sias, O. Morsch, D. Ciampini y E. Arimondo, «Tunneling control and localization for Bose-Einstein condensates in a frequency modulated optical lattice», *Laser Physics* **20**, 1182-1189 (2010) 10.1134/S1054660X10090410.
- [19] J. K. Pachos y P. L. Knight, «Quantum Computation with a One-Dimensional Optical Lattice», *Phys. Rev. Lett.* **91**, 107902 (2003) 10.1103/PhysRevLett.91.107902.
- [20] N. B. Jørgensen, M. G. Bason y J. F. Sherson, «One- and two-qubit quantum gates using superimposed optical-lattice potentials», *Phys. Rev. A* **89**, 032306 (2014) 10.1103/PhysRevA.89.032306.
- [21] P. L. Knight, E. A. Hinds, M. B. Plenio, J. José García-Ripoll y J. Ignacio Cirac, «Quantum computation with cold bosonic atoms in an optical lattice», *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **361**, 1537-1548 (2003) 10.1098/rsta.2003.1220.
- [22] L. Mandelstam e I. Tamm, «The Uncertainty Relation Between Energy and Time in Non-relativistic Quantum Mechanics», en *Selected Papers*, ed. por B. M. Bolotovskii, V. Y. Frenkel y R. Peierls (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1991), págs. 115-123, [https://doi.org/10.1007/978-3-642-74626-0\\_8](https://doi.org/10.1007/978-3-642-74626-0_8).
- [23] N. Margolus y L. B. Levitin, «The maximum speed of dynamical evolution», *Physica D: Nonlinear Phenomena* **120**, Proceedings of the Fourth Workshop on Physics and Consumption, 188-195 (1998) [https://doi.org/10.1016/S0167-2789\(98\)00054-2](https://doi.org/10.1016/S0167-2789(98)00054-2).

- [24] L. E. Ballentine, «States, Pure and Mixed, and Their Representations», en *Compendium of Quantum Physics*, ed. por D. Greenberger, K. Hentschel y F. Weinert (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2009), págs. 744-746, [https://doi.org/10.1007/978-3-540-70626-7\\_211](https://doi.org/10.1007/978-3-540-70626-7_211).
- [25] L. P. Hughston, R. Jozsa y W. K. Wootters, «A complete classification of quantum ensembles having a given density matrix», *Physics Letters A* **183**, 14-18 (1993) [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(93\)90880-9](https://doi.org/10.1016/0375-9601(93)90880-9).
- [26] J.-L. Li y C.-F. Qiao, «Separable decompositions of bipartite mixed states», *Quantum Information Processing* **17**, 1-17 (2018) <https://doi.org/10.1007/s11128-018-1862-5>.
- [27] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein y D. S. Fisher, «Boson localization and the superfluid-insulator transition», *Phys. Rev. B* **40**, 546-570 (1989) <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.546>.
- [28] H. A. Gersch y G. C. Knollman, «Quantum Cell Model for Bosons», *Phys. Rev.* **129**, 959-967 (1963) <https://doi.org/10.1103/PhysRev.129.959>.
- [29] C. Bruder, R. Fazio y G. Schön, «The Bose-Hubbard model: from Josephson junction arrays to optical lattices», *Annalen der Physik* **14**, 566-577 (2005) <https://doi.org/10.1002/andp.200510157>.
- [30] V. W. Scarola y S. Das Sarma, «Quantum Phases of the Extended Bose-Hubbard Hamiltonian: Possibility of a Supersolid State of Cold Atoms in Optical Lattices», *Phys. Rev. Lett.* **95**, 033003 (2005) <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.033003>.
- [31] G. Mazzaella, S. M. Giampaolo y F. Illuminati, «Extended Bose Hubbard model of interacting bosonic atoms in optical lattices: From superfluidity to density waves», *Phys. Rev. A* **73**, 013625 (2006) <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.73.013625>.
- [32] S. Baier, M. J. Mark, D. Petter, K. Aikawa, L. Chomaz, Z. Cai, M. Baranov, P. Zoller y F. Ferlaino, «Extended Bose-Hubbard models with ultracold magnetic atoms», *Science* **352**, 201-205 (2016) <https://doi.org/10.1126/science.aac9812>.
- [33] K. Biedroń, M. Łącki y J. Zakrzewski, «Extended Bose-Hubbard model with dipolar and contact interactions», *Phys. Rev. B* **97**, 245102 (2018) <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.245102>.
- [34] C. Itzykson y J. Zuber, «Canonical Quantization», en *Quantum Field Theory* (Dover New York, 2006), págs. 105-126.
- [35] A. Altland y B. D. Simons, «Second quantization», en *Condensed Matter Field Theory*, 2.<sup>a</sup> ed. (Cambridge University Press, 2010), págs. 39-94, <https://doi.org/10.1017/CB09780511789984.003>.
- [36] J.-Q. Liang, J.-L. Liu, W.-D. Li y Z.-J. Li, «Atom-pair tunneling and quantum phase transition in the strong-interaction regime», *Phys. Rev. A* **79**, 033617 (2009) [10.1103/PhysRevA.79.033617](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.79.033617).

- [37] J. M. Zhang y R. X. Dong, «Exact diagonalization: the Bose–Hubbard model as an example», *European Journal of Physics* **31**, 591-602 (2010) [10.1088/0143-0807/31/3/016](https://doi.org/10.1088/0143-0807/31/3/016).
- [38] J. Kopp, «Efficient numerical diagonalization of hermitian  $3 \times 3$  matrices», *International Journal of Modern Physics C* **19**, 523-548 (2008) <https://doi.org/10.1142/S0129183108012303>.
- [39] M. Ying, «Chapter 2 - Preliminaries», en *Foundations of Quantum Programming*, ed. por M. Ying (Morgan Kaufmann, Boston, 2016), págs. 11-58, <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-802306-8.00002-1>.
- [40] S. M. Nagiyev y A. I. o. Ahmadov, «Time evolution of quadratic quantum systems: Evolution operators, propagators, and invariants», *Theoretical and Mathematical Physics* **198**, 392-411 (2019) <https://doi.org/10.1134/S004057791903005X>.
- [41] W. Wootters, «A measure of the distinguishability of quantum states», en *Quantum optics, experimental gravity, and measurement theory* (Springer, 1983), págs. 145-154, [https://doi.org/10.1007/978-1-4613-3712-6\\_8](https://doi.org/10.1007/978-1-4613-3712-6_8).
- [42] A. Majtey, P. Lamberti, M. Martin y A. Plastino, «Wootters' distance revisited: A new distinguishability criterium», *European Physical Journal D* **32**, 10.1140/epjd/e2005-00005-1 (2004) [10.1140/epjd/e2005-00005-1](https://doi.org/10.1140/epjd/e2005-00005-1).
- [43] R. Duan, Y. Feng, Y. Xin y M. Ying, «Distinguishability of Quantum States by Separable Operations», *IEEE Transactions on Information Theory* **55**, 1320-1330 (2009) <https://doi.org/10.1109/TIT.2008.2011524>.
- [44] O. Oreshkov y J. Calsamiglia, «Distinguishability measures between ensembles of quantum states», *Phys. Rev. A* **79**, 032336 (2009) [10.1103/PhysRevA.79.032336](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.79.032336).
- [45] I. Bengtsson y K. Życzkowski, «Distinguishability measures», en *Geometry of Quantum States: An Introduction to Quantum Entanglement* (Cambridge University Press, 2006), págs. 323-338, [10.1017/CB09780511535048.014](https://doi.org/10.1017/CB09780511535048.014).
- [46] R. Jozsa, «Fidelity for Mixed Quantum States», *Journal of Modern Optics* **41**, 2315-2323 (1994) <https://doi.org/10.1080/09500349414552171>.
- [47] D. Dieks, «Overlap and distinguishability of quantum states», *Physics Letters A* **126**, 303-306 (1988) [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(88\)90840-7](https://doi.org/10.1016/0375-9601(88)90840-7).
- [48] A. Valdés-Hernández y F. J. Sevilla, «A new route toward orthogonality», *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **54**, 025301 (2020) <https://doi.org/10.1088/1751-8121/abcd56>.
- [49] F. J. Sevilla, A. Valdés-Hernández y A. J. Barrios, «The Underlying Order Induced by Orthogonality and the Quantum Speed Limit», *Quantum Reports* **3**, 376-388 (2021) [10.3390/quantum3030024](https://doi.org/10.3390/quantum3030024).
- [50] V. Giovannetti, S. Lloyd y L. Maccone, «Quantum limits to dynamical evolution», *Phys. Rev. A* **67**, 052109 (2003) <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.67.052109>.

- [51] T. Caneva, M. Murphy, T. Calarco, R. Fazio, S. Montangero, V. Giovannetti y G. E. Santoro, «Optimal Control at the Quantum Speed Limit», *Phys. Rev. Lett.* **103**, 240501 (2009) <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.240501>.
- [52] M. H. Goerz, T. Calarco y C. P. Koch, «The quantum speed limit of optimal controlled phasegates for trapped neutral atoms», *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **44**, 154011 (2011) <https://doi.org/10.1088/0953-4075/44/15/154011>.
- [53] G. C. Hegerfeldt, «Driving at the Quantum Speed Limit: Optimal Control of a Two-Level System», *Phys. Rev. Lett.* **111**, 260501 (2013) <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.260501>.
- [54] I. Brouzos, A. I. Streltsov, A. Negretti, R. S. Said, T. Caneva, S. Montangero y T. Calarco, «Quantum speed limit and optimal control of many-boson dynamics», *Phys. Rev. A* **92**, 062110 (2015) <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.92.062110>.
- [55] Y.-B. Wei, J. Zou, Z.-M. Wang y B. Shao, «Quantum speed limit and a signal of quantum criticality», *Scientific reports* **6**, 1-8 (2016) <https://doi.org/10.1038/srep19308>.
- [56] M. R. Frey, «Quantum speed limits—primer, perspectives, and potential future directions», *Quantum Information Processing* **15**, 3919-3950 (2016) <https://doi.org/10.1007/s11128-016-1405-x>.
- [57] S. Deffner y S. Campbell, «Quantum speed limits: from Heisenberg's uncertainty principle to optimal quantum control», *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **50**, 453001 (2017) [10.1088/1751-8121/aa86c6](https://doi.org/10.1088/1751-8121/aa86c6).
- [58] J. Lee, C. Arenz, H. Rabitz y B. Russell, «Dependence of the quantum speed limit on system size and control complexity», *New Journal of Physics* **20**, 063002 (2018) <https://doi.org/10.1088/1367-2630/aac6f3>.
- [59] E. O'Connor, G. Guarnieri y S. Campbell, «Action quantum speed limits», *Phys. Rev. A* **103**, 022210 (2021) <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.103.022210>.
- [60] G. N. Fleming, «A unitarity bound on the evolution of nonstationary states», *Il Nuovo Cimento A (1965-1970)* **16**, 232-240 (1973) <https://doi.org/10.1007/BF02819419>.
- [61] K. Bhattacharyya, «Quantum decay and the Mandelstam-Tamm-energy inequality», *Journal of Physics A: Mathematical and General* **16**, 2993-2996 (1983) [10.1088/0305-4470/16/13/021](https://doi.org/10.1088/0305-4470/16/13/021).
- [62] L. B. Levitin y T. Toffoli, «Fundamental Limit on the Rate of Quantum Dynamics: The Unified Bound Is Tight», *Phys. Rev. Lett.* **103**, 160502 (2009) <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.160502>.

- [63] A. Einstein, B. Podolsky y N. Rosen, «Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?», *Phys. Rev.* **47**, 777-780 (1935) 10.1103/PhysRev.47.777.
- [64] 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**, 1895-1899 (1993) 10.1103/PhysRevLett.70.1895.
- [65] A. Barenco, D. Deutsch, A. Ekert y R. Jozsa, «Conditional Quantum Dynamics and Logic Gates», *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4083-4086 (1995) 10.1103/PhysRevLett.74.4083.
- [66] F. Verstraete, K. Audenaert, J. Dehaene y B. De Moor, «A comparison of the entanglement measures negativity and concurrence», *Journal of Physics A: Mathematical and General* **34**, 10327 (2001) <https://doi.org/10.1088/0305-4470/34/47/329>.
- [67] A. Miranowicz y A. Grudka, «A comparative study of relative entropy of entanglement, concurrence and negativity», *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics* **6**, 542 (2004) <https://doi.org/10.1088/1464-4266/6/12/009>.
- [68] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin y W. K. Wootters, «Mixed-state entanglement and quantum error correction», *Phys. Rev. A* **54**, 3824-3851 (1996) 10.1103/PhysRevA.54.3824.
- [69] S. Hill y W. K. Wootters, «Entanglement of a Pair of Quantum Bits», *Phys. Rev. Lett.* **78**, 5022-5025 (1997) 10.1103/PhysRevLett.78.5022.
- [70] W. K. Wootters, «Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits», *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2245-2248 (1998) 10.1103/PhysRevLett.80.2245.
- [71] A. Uhlmann, «Fidelity and concurrence of conjugated states», *Phys. Rev. A* **62**, 032307 (2000) 10.1103/PhysRevA.62.032307.
- [72] P. Rungta, V. Bužek, C. M. Caves, M. Hillery y G. J. Milburn, «Universal state inversion and concurrence in arbitrary dimensions», *Phys. Rev. A* **64**, 042315 (2001) 10.1103/PhysRevA.64.042315.
- [73] K. Chen, S. Albeverio y S.-M. Fei, «Concurrence of Arbitrary Dimensional Bipartite Quantum States», *Phys. Rev. Lett.* **95**, 040504 (2005) 10.1103/PhysRevLett.95.040504.
- [74] V. Giovannetti, S. Lloyd y L. Maccone, «The role of entanglement in dynamical evolution», *Europhysics Letters (EPL)* **62**, 615-621 (2003) 10.1209/epl/i2003-00418-8.
- [75] C. Zander, A. R. Plastino, A. Plastino y M. Casas, «Entanglement and the speed of evolution of multi-partite quantum systems», *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **40**, 2861-2872 (2007) 10.1088/1751-8113/40/11/020.

- [76] A. Borrás, M. Casas, A. R. Plastino y A. Plastino, «Entanglement and the lower bounds on the speed of quantum evolution», *Phys. Rev. A* **74**, 022326 (2006) [10.1103/PhysRevA.74.022326](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.74.022326).
- [77] J. Batle, M. Casas, A. Plastino y A. R. Plastino, «Connection between entanglement and the speed of quantum evolution», *Phys. Rev. A* **72**, 032337 (2005) [10.1103/PhysRevA.72.032337](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.72.032337).