



Universidad Nacional Autónoma de México

**POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
CENTRO DE NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGÍA**

Fases Geométricas y Métricas del Cútrit

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

Maestro en Ciencias (Física)

PRESENTA:

Fernando Nieto Guadarrama

TUTOR:

Dr. Fernando Rojas ñíguez (CNyN-UNAM)

Y LOS MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR:

Dr. Ernesto Cota Araiza (CNyN-UNAM)

Dr. Jesús A. Maytorena Córdova (CNyN-UNAM)

Ensenada, Baja California, a 16 de junio de 2023



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.

*Dedicado a
mi familia*

Agradecimientos

Estos últimos tres años de mi vida han sido de gran desarrollo para mí y de grandes retos, como lo fue cursar la maestría durante época de pandemia. A pesar de las dificultades que esto conllevó, también tuve la oportunidad de conocer personas de diferentes partes del país que de otra manera no habría conocido.

Agradezco al Dr. Fernando Rojas Íñiguez por aceptarme como su estudiante sin haberme conocido previamente, por tenerme paciencia en cada paso del desarrollo de la maestría, por apoyarme y darme su confianza al incluirme en sus proyectos.

También agradezco al Dr. Ernesto Cota Araiza y al Dr. Jesús A. Maytorena Córdova por apoyarme como miembros del comité tutor y ayudarme con comentarios durante el desarrollo de la tesis, así como la evaluación de la misma una vez acabada.

Doy las gracias a mis padres, Fernando y María Isabel, por su incondicional apoyo en cada uno de los proyectos que he realizado. Por su esfuerzo día con día para que yo pudiera concluir con mi licenciatura y maestría, aun estando yo lejos de casa. Sin su amor y dedicación esto no hubiera sido posible.

También agradezco a Ana Ibeth y Abraham Alvarado, por estar al pendiente de mí durante este tiempo y estar disponibles siempre que los necesité.

Al Posgrado en Ciencias Físicas y a la UNAM, mediante el coordinador Alberto Güijosa Hidalgo y todas aquellas personas de la administración del posgrado y del Centro de Nanociencia y Nanotecnología que me apoyaron con los trámites. Agradezco su paciencia y dedicación.

Agradezco al CONACyT por brindarme una beca de maestría durante los dos años que debían durar mis estudios.

Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM IN111122. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca de terminación de tesis recibida.

Quisiera agradecer a mis amigos y compañeros con los que pase estos años, en especial al recién doctorado Diego Morachis por sus charlas y recomendaciones que ayudaron en gran

manera en el desarrollo de mi tesis. También al Dr. Jorge Villavicencio, quien, junto con mi comité tutor y Diego, conformamos el grupo de investigación sobre fases geométricas del CNyN, de donde obtuve ideas para la tesis.

Resumen

En el presente trabajo se investigó las fases geométricas y métricas de dos sistemas adiabáticos de tres niveles, o cútrits, en una evolución cíclica respecto a un campo magnético. Se estudia la fase de Berry en los estados puros, y la fase de Sjöqvist y la fase de Uhlmann para estados mixtos. Por el lado de las métricas, se estudia la métrica de Fubini-Study y la métrica de Bures. El primer sistema tratado consiste en una partícula de espín $s = 1$ en un campo magnético con simetría esférica. Dado que este sistema ha sido estudiado extensamente, se reprodujeron los resultados sobre las fases y métricas antes mencionadas. Adicionalmente, se obtuvo una visualización geométrica de la evolución del sistema, se relacionó la métrica de Bures y la fase de Uhlmann, y se comparó la fase de Sjöqvist con la fase de Uhlmann. Se encontró que la fase de Berry no presenta ningún comportamiento peculiar para ninguno de los tres eigenestados del sistema. De igual manera, ocurre con la métrica de Fubini-Study, la cual resulta ser una métrica de un espacio esférico de radio constante.

Para los estados mixtos se consideró que la partícula estaba en contacto con un reservorio a temperatura T . Con esto, se encontró que la métrica de Bures describe una estructura esférica con radio variable pesado por una función dependiente de la temperatura. El elemento de la métrica que corresponde a la temperatura se expresó en función del calor específico del sistema. Con respecto a las fases: la fase de Sjöqvist no mostró algún resultado peculiar que indicara una transición de fase. La fase de Uhlmann, por otro lado, muestra dos transiciones de fase para un cierto valor del ángulo polar del campo. La fase de Uhlmann fue expresada mediante los valores esperados de la base de matrices de espín-1. También se expresó la fase de Uhlmann en función del elemento de la métrica de Bures de la temperatura.

De la relación entre la métrica de Bures y la fase de Uhlmann se encontró un interesante vínculo entre el calor específico y la fase de Uhlmann. A bajas temperaturas, el calor específico presenta un máximo, conocido como anomalía de Schottky, el cual está relacionado con la aparición del primer estado excitado. Se encontró que la temperatura de dicho máximo es cercana a la temperatura de la primera transición de fase.

El segundo sistema estudiado es una partícula de espín-1 en un campo magnético longitudinalmente anisótropo. Dicho sistema es descrito por un Hamiltoniano de espín-1 en un campo, modificado por la matriz de espín-1 en z al cuadrado, un elemento cuadrupolar de la base de matrices de espín-1. Dado que el sistema de espín-1 mencionado anteriormente mantiene una simetría $SU(2)$, el sistema propuesto rompe con dicha simetría, mostrando una simetría dinámica $SU(3)$.

Este nuevo sistema, debido a la complejidad de las operaciones resultantes, se dividió en

dos partes. En la primera se considera que el ángulo polar es constante y corresponde al ángulo para el cual el sistema de espín-1 tiene las dos transiciones. Para este caso, los resultados se obtuvieron de manera analítica. La segunda parte es el caso general, donde los resultados son numéricos.

La fase de Berry y la métrica de Fubini-Study solo mostraron un comportamiento antisimétrico respecto al signo del elemento cuadrupolar agregado. La fase de Sjöqvist sigue un mismo comportamiento, caracterizado por un ensanchamiento de los máximos respecto al elemento cuadrupolar. Por su parte, la métrica de Bures mostró comportamiento simétrico en algunos de sus términos y antisimétrico en otros. En ninguno de los casos, tanto fases como métricas, se encontró algún comportamiento que indique una transición, ya sea topológica o cuántica.

Debido a la extensión y complejidad de los elementos de la métrica de Bures, no se pudo expresar la fase en función de la métrica, como en el caso isotrópico, solo fue posible expresar la fase mediante valores esperados, al menos en el caso analítico. Se encontró que la fase de Uhlmann tiene dos comportamientos, dependiendo del valor del término cuadrupolar: en el primero de ellos no se observa ninguna transición, mientras que el segundo tiene dos transiciones, donde varía la longitud entre ambas transiciones, dependiendo también del valor del elemento cuadrupolar.

Finalmente, se exploraron el calor específico y las transiciones de fase. Se encontró que la evolución del máximo en el calor específico, conforme la contribución cuadrupolar cambia, tiene un comportamiento similar a la primera transición. Por tanto, la probabilidad del primer estado excitado se vuelve significativa cerca de la primera transición.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	VII
1 Introducción	1
§1.1 Antecedentes	1
§1.1.1 Hipótesis y Objetivos	3
§1.2 Estructura de la Tesis	5
2 Conceptos Básicos	6
§2.1 Espacio de Hilbert	6
§2.2 Operadores Lineales	8
§2.3 Estados Cuánticos	11
§2.3.1 Estados Puros	12
§2.3.2 Estados Mixtos	13
§2.4 Visualización Geométrica de Estados Cuánticos.	14
3 De Distancias y Métricas	22
§3.1 Distancia en Estados Puros	23
§3.1.1 Métrica FS del Cúbit-Espín $s=1/2$	24
§3.2 Distancia en Estados Mixtos	24
§3.2.1 Desarrollo de la Métrica de Bures para Estados Térmicos	28
4 Fases Geométricas	31
§4.1 Fase de Berry	34
§4.1.1 Fase de Berry del espín-1/2	37
§4.2 Fase de Sjöqvist	37
§4.2.1 Fase de Sjöqvist para el espín-1/2	38
§4.3 Fase de Uhlmann	38
§4.3.1 Fase de Uhlmann para el espín-1/2	42
5 Sistemas de Tres Niveles: Espín $s = 1$	46
§5.1 Modelo $\hat{H} = \vec{B} \cdot \vec{S}$	46
§5.2 Visualización geométrica de los eigenvectores y estados térmicos.	49
§5.3 Métrica de Fubini-Study	50
§5.4 Obtención de la Fase de Berry y la Fase de Sjöqvist	51

§5.5	Cálculo de la Métrica de Bures	52
§5.6	Fase de Uhlmann mediante valores esperados de la base de $SU(3)$	54
6	Sistema modificado por un elemento \hat{S}_z^2	62
§6.1	Modelo: Hamiltoniano Cuadripolar	62
§6.2	Caso con $\theta = \frac{\pi}{2}$	65
§6.2.1	Visualización geométrica de los eigenestados y estados térmicos	68
§6.2.2	Métrica de Fubini-Study	69
§6.2.3	Fase de Berry y Fase de Sjöqvist	70
§6.2.4	Métrica de Bures	70
§6.2.5	Fase de Uhlmann	74
§6.3	Caso numérico para $\theta \in [0, \theta]$	77
§6.3.1	Visualización geométrica	79
§6.3.2	Métrica de Fubini-Study	81
§6.3.3	Fase de Berry y Fase de Sjöqvist	84
§6.3.4	Métrica de Bures	87
§6.3.5	Fase de Uhlmann	90
7	Conclusiones y Trabajo Futuro	96
	Apéndices	98
A	Fase de Uhlmann en su forma integral	99
B	Fase de Uhlmann para espín s mediante valores esperados	101
C	Elementos de la métrica de Bures y fase de Uhlmann del sistema modificado con $\theta = \pi/2$	103

Capítulo 1

Introducción

En cualquier campo de la física, el estudio de la geometría del espacio de estados ha sido de gran relevancia, y en Mecánica Cuántica esto no es la excepción. Más en las últimas décadas, donde el estudio del espacio de estados cuánticos ha sido de gran relevancia en el entendimiento de Transiciones de Fase Cuánticas, Información Cuántica, Nanoestructuras, Óptica Cuántica, entre otros.

En esta tesis se estudiará la geometría de un espacio de hilbert de sistemas de tres niveles mediante las fases geométricas y métricas, exponiendo en este primer capítulo el contexto actual, así como la relevancia de dichos conceptos. También, se explicará el problema específico a tratar, las hipótesis y los objetivos para probarlas.

1.1. Antecedentes

El estudio de la geometría de los espacios físicos ha sido de gran importancia en cualquier campo de la física, incluyendo recientemente el de los sistemas cuánticos. Para esto, dos de las herramientas más utilizadas para describir el espacio geométrico de los estados cuánticos son las Fases Geométricas y las Métricas, donde la primera de ellas permite estudiar la topología de una evolución cíclica, mientras la otra permite estudiar cómo cambia el espacio alrededor de algún punto del espacio de estados.

Si un sistema evoluciona en el tiempo, el estado del sistema adquirirá una fase total Φ_T , la cual tiene dos contribuciones, una fase dinámica (FD), Φ_D , que depende de la evolución, y otra que depende únicamente de la geometría del espacio de parámetros del sistema, llamada fase geométrica (FG), Φ_G . La relación entre estos conceptos es simplemente $\Phi_T = \Phi_D + \Phi_G$. Como tal, cualquier sistema que evolucione tendrá una fase geométrica, la cual puede ser clasificada dependiendo de las condiciones del sistema, como por ejemplo, la fase de Berry [1] que corresponde a una evolución adiabática no degenerada de un estado puro. También está la fase de Wilczek-Zee [2] para un sistema adiabático degenerado, o la fase de Aharonov-Anandan [3] para sistemas no-adiabáticos, entre otras, que consideran estados puros.¹

También se tiene el caso de estados mixtos, donde el primer acercamiento puede ser entendido como la mezcla estadística de las fases de los estados puros que componen el estado

¹Una lista más completa de Fases Geométricas en Estados Puros se puede encontrar en [4].

mixto, como lo define Sjöqvist en [5], o la generalización de la fase de Berry para estados mixtos, la fase de Uhlmann [6].

La importancia de las fases geométricas ha crecido en las últimas décadas en diferentes áreas como Estado Sólido [7] con los llamados aislantes topológicos [8; 9], los cuales pueden ser caracterizados mediante invariantes topológicos como el número de Chern o el índice de curva cerrada (*winding number*), los cuales están relacionados con las fases geométricas, como la curvatura de Berry con el número de Chern [7]. También se han presentado propuestas para el desarrollo de computación cuántica basada en las fases geométricas, conocida como Computación Cuántica Geométrica [10–14]. A su vez, se pueden encontrar diferentes aplicaciones en óptica [15–17], sistemas de fermiones [18; 19], en procesos dinámicos [20] y en sistemas compuestos [21] donde se compara el entrelazamiento y la fase.

Una de las fases geométricas para estados puros más importante, y la más utilizada, es la fase de Berry, la cual fue una de las primeras en mostrar resultados al explicar, en la década de los 70, el cambio de fase aislante-conductor que presenta el modelo Su–Schrieffer–Heeger (SSH)[22], así como caracterizar el efecto Hall Cuántico [23]. A partir de este descubrimiento, la fase de Berry ha sido utilizada en los aislantes topológicos [14; 24–26], Transiciones de Fase Cuánticas ²[27; 28], así como en óptica [29] y otros sistemas [30; 31].

Si bien la fase de Berry tiene una gran importancia, está limitada a estados puros donde los factores externos como la temperatura no son considerados. Para estudiar la fase geométrica de un estado mixto, donde se consideran más factores, la situación se complica, ya que el estado no está representado por un vector complejo como en el caso puro, sino que ahora se tiene una matriz, la matriz de densidad, la cual se debe evolucionar para encontrar de alguna manera la fase acumulada durante el ciclo. Como primer acercamiento a dicha generalización se puede pensar en la Fase de Sjöqvist, mencionada anteriormente, la cual ha sido obtenida en diferentes sistemas mixtos [32; 33], y ha sido propuesta en [34] como un posible parámetro de orden topológico para temperatura finita. Dada la naturaleza interferométrica de esta fase, ha sido posible su medición experimental en diferentes ocasiones [35; 36].

Por otro lado, una generalización más matemática de la fase geométrica de un estado mixto ocurre al purificar dicho estado y obtener la fase de Berry del estado puro resultante, tal como lo propuso Armin Uhlmann en [6], desarrollando lo que hoy se conoce como fase de Uhlmann. Una de las aplicaciones de la fase de Uhlmann [17; 19–21; 37], y de especial interés en el presente trabajo, son las transiciones de fase en sistemas mixtos encontradas por primera vez por Viyuela et al. [38], donde los autores muestran la relación entre la fase de Uhlmann y un invariante topológico que denominan como número de Uhlmann, caracterizando así las fases topológicas de un sistema mixto, por ejemplo, un sistema de fermiones bidimensional a temperatura finita [18]. A raíz de este resultado se han realizado una gran cantidad de estudios sobre diferentes sistemas con el objetivo de buscar transiciones de fase y su relación con otros parámetros como el entrelazamiento [21], el calor específico [39] y el *winding number* [40; 41].

Comparaciones entre la fase de Sjöqvist y la fase de Uhlmann ya ha sido hecha en [21; 42], donde los autores en ambos casos describen que el comportamiento de una no se ve refle-

²No debe confundirse con las transiciones de fase topológicas presentes en los aislantes topológicos.

jado en la otra.

El otro concepto a tratar en el presente trabajo es la métrica del espacio de Hilbert, recordando que la métrica de un espacio es la distancia infinitesimal entre dos elementos del espacio, que en este caso son los estados cuánticos. Por tanto, la métrica permite describir el comportamiento geométrico local de un espacio alrededor de un punto. Dependiendo de la definición de distancia utilizada se tiene una métrica diferente, siendo la métrica de Fubini-Study (FS)[43; 44] la más utilizada en el caso de estados puros, y su generalización a estados mixtos, la métrica de Bures [45]. Dentro de las aplicaciones de estas métricas se tiene el análisis en Información Cuántica [46–50]. Otra aplicación de la métrica de FS es su relación con las Transiciones de Fase Cuánticas (QPT, por sus siglas en inglés) propuesta por Zanardi et al. [51] en un sistema de fermiones. Por otro lado, en [52] se puede encontrar que en el sistema de fermiones casi libres acoplado mediante el modelo de Ising en contacto con un reservorio a temperatura T , estados mixtos, la métrica de Bures caracteriza las QPT's del sistema.

1.1.1. Hipótesis y Objetivos

Se considera el artículo de Morachis et. al. [40], donde se estudian los sistemas de espín en un campo magnético B , con Hamiltoniano dado como $\hat{H} = B\hat{n} \cdot \vec{S}$, donde $\vec{S} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ es el vector de matrices de espín-s y $\hat{n} = (\cos\phi \sin\theta, \sin\phi \sin\theta, \cos\theta)$ la dirección del campo. Dicho sistema se encuentra en contacto con un reservorio a temperatura T , por lo que el estado mixto está dado como $\rho = \sum_n \exp[-\beta E_n] |n\rangle \langle n| / Z$, con $Z = \sum_m \exp[-\beta E_m]$ la función de partición, $\beta = 1/k_B T$, E_n la energía y $|n\rangle$ el eigenvector del n -ésimo eigenestado.

Con este sistema, los autores encontraron que la fase de Uhlmann está dada por

$$\Phi_U = \arg [U_{2j}(z)] \quad (1.1)$$

con $U_n(x)$ el n -ésimo polinomio de Chebyshev de segundo tipo y $z = \cosh(\beta B\hbar/2) \cos(\pi C(\theta)) - i \sinh(\beta B\hbar/2) \sin(\pi C(\theta)) \cos\theta/C(\theta)$ donde $C(\theta) = \sqrt{1 - \sin^2\theta \tanh^2(\beta B\hbar/2)}$.

Para el caso $\theta = \pi/2$, z será una función real, por lo que la fase tendrá solo dos valores, 0 o π dependiendo de si $z > 0$ o $z < 0$, respectivamente, por lo que los ceros del polinomio de Chebyshev, dependientes de βB , definirán transiciones de fase $0(\pi) \rightarrow \pi(0)$. Dado que el n -ésimo polinomio tiene n ceros, el sistema de espín- j tendrá $2j$ temperaturas críticas T_c donde ocurren transiciones de fase.

En el presente trabajo se pretende plantear una asociación entre la métrica de Bures y la fase de Uhlmann en los sistemas de tres niveles, partiendo de las transiciones de fase encontradas para el espín con $s = 1$ [40]. Dicha proposición fue ligeramente tratada por Uhlmann en [53], donde también establece a la métrica de Bures como una generalización de la probabilidad de transición entre dos estados mixtos. Dicha relación resulta interesante, ya que la fase de Berry y la métrica de Fubini-Study han sido relacionadas [54], teniendo este resultado importantes aplicaciones en QPT.

Hipótesis

Teniendo en cuenta el sistema de espín con $s = 1$, se tienen dos temperaturas críticas donde existen dos transiciones de fase,

- se propone que rompiendo la simetría $SU(2)$ del sistema de espín-1, la transición de fase se modificará teniendo un número diferente de temperaturas críticas. Para hacer esto, se tomará el caso de un sistema de tres niveles en $SU(3)$ para un campo longitudinalmente anisótropo.

Por otro lado, ya que la métrica es otra herramienta utilizada para estudiar la geometría del espacio, y tomando en cuenta los resultados sabidos sobre la fase de Berry y la métrica de F-S

- se tiene como segunda hipótesis que la métrica deberá mostrar algún comportamiento característico en el punto donde la fase de Uhlmann tiene la transición de fase.

Objetivo General

Con el objetivo de verificar la veracidad de las hipótesis, en el presente trabajo se pretende estudiar las fases geométricas para los sistemas de espín-1 en un campo magnético y un sistema planteado cuyo Hamiltoniano pertenezca a $SU(3)$ pero que rompa la simetría $SU(2)$, ambos con una evolución adiabática. A su vez, y para estudiar la segunda hipótesis, se obtendrán las métricas para estados puros y estados mixtos para ambos sistemas.

Objetivos Específicos

Para cumplir los objetivos principales del trabajo se cumplirán los siguientes objetivos específicos para el sistema de espín $s = 1$

- Se obtendrá la Visualización Geométrica de los estados puros y térmicos.
- Se calculará la métrica de Fubini-Study para los estados puros y la métrica de Bures para los estados térmicos.
- Se calcularán la fase de Berry para estados puros y la fase de Uhlmann para estados mixtos. Se obtendrá la fase de Sjöqvist como un primer acercamiento a la fase de estados mixtos.

Para el sistema propuesto antes mencionado, el cual consiste en un espín en un campo magnético anisótropo [55] descrito por un Hamiltoniano con un elemento cuadrupolar \hat{S}_z^2 :

- Por la complejidad de las expresiones encontradas, se considerará una simplificación en el Hamiltoniano que permitirá llegar a expresiones analíticas de la fase de Berry, fase Sjöqvist, fase de Uhlmann y las métricas de Fubini-Study y Bures.
- Sin considerar la simplificación mencionada, las fases y métricas se calcularán de manera numérica.

1.2. Estructura de la Tesis

El presente trabajo se encuentra se divide en siete capítulos y tres apéndices, donde en el segundo capítulo se tiene una recopilación de conceptos básicos de mecánica cuántica relacionados con el espacio de Hilbert, los espacios proyectivos y el espacio de parámetros de sistemas cuánticos. El tercer capítulo describe de manera breve el concepto de distancia entre dos estados cuánticos (estados puros o mixtos), con lo que se explican las métricas de Fubini-Study (FS) y de Bures. De manera similar, en el cuarto capítulo, se hace lo propio con las fases geométricas de Berry, de Sjöqvist y de Uhlmann. En el capítulo cinco se trabaja en el sistema de espín-1 donde se replican los resultados conocidos de la fase de Berry y la fase de Uhlmann, y se calculan las métricas y la fase de Sjöqvist. La fase de Uhlmann es obtenida mediante los valores esperados de la base de matrices cuadrupolares del espín-1. Para el sexto capítulo se desarrolla todo lo que respecta al sistema modificado propuesto para romper la simetría $SU(2)$, las fases, métricas y visualización geométrica. Por último, en el séptimo capítulo se discuten los resultados de manera global para verificar las hipótesis propuestas y cuál es la ruta a seguir para mejorar el entendimiento de las fases geométricas y sus posibles aplicaciones.

El primer apéndice propuesto describe la fase de Uhlmann en una forma integral, mientras que el segundo consiste en expresar a partir de [40] la fase de Uhlmann de un espín- s en términos de valores esperados de la base de matrices de espín- s . El último apéndice presenta las expresiones completas de algunos elementos de la métrica de Bures y fase de Uhlmann del sistema cuadrupolar con dirección polar del campo magnético $\theta = \pi/2$.

Capítulo 2

Conceptos Básicos

El objetivo de cualquier teoría física, incluyendo la mecánica cuántica, es establecer axiomas o postulados que permiten hacer una descripción matemática de un proceso físico. Por ejemplo, si se considera una partícula en mecánica newtoniana, entonces se elige el espacio vectorial real, llamado espacio euclidiano, para representar el espacio real, en donde la partícula se mueve, y a cada punto en este espacio se le asigna un vector respecto a un origen previamente definido. De esta forma, la partícula puede ser descrita moviéndose en el espacio real como un mapeo en el espacio euclidiano, en donde cada posición corresponderá a un vector, y, por tanto, se puede describir su trayectoria. A partir de esto, se define la distancia, la velocidad y demás observables clásicos.

En este capítulo se dará un breve resumen sobre las bases del formalismo matemático necesarias para el desarrollo de esta tesis, tales como la definición y propiedades del espacio matemático donde se mapean los estados cuánticos, qué es un estado cuántico y qué tipos existen. También se estudia cuáles son las observables cuánticas y su representación matemática, así como la representación gráfica del espacio de estados cuánticos.

2.1. Espacio de Hilbert

De mecánica clásica se sabe que los sistemas físicos pueden ser representados mediante un Hamiltoniano \hat{H} , a partir del cual se puede obtener la descripción del sistema mediante las ecuaciones de Hamilton. Erwin Schrödinger en 1925 realizó la cuantización del Hamiltoniano, definiendo así la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (2.1)$$

conocida como la Ecuación de Schrödinger, en donde $|\psi\rangle$ es un vector complejo que representa el estado del sistema y como tal contiene la distribución probabilística de los posibles resultados de mediciones realizadas sobre el sistema. En otras palabras, $|\psi\rangle$ representa un estado cuántico, el cual, usando notación de Dirac, es llamado *ket*. Dado que un *ket* representa un estado, contiene su distribución de probabilidad, y, por lo tanto, su norma debe ser unitaria.

Para obtener un estado normalizado se define el producto interno entre vectores, llamado

braket, como $\langle \phi | | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle = z$ con $z \in \mathbb{C}$, donde $\langle \psi |$, llamado *bra*, es el transpuesto conjugado del *ket*, $\langle \psi | = [(|\psi\rangle)^*]^T$, con T la transpuesta del vector, donde la normalización está dada por $\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1$. Ambos elementos se representan, usando notación de Dirac, como

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}; \quad \langle \psi | = (a_0^* \ a_1^* \ \dots \ a_n^*), \quad (2.2)$$

con $a_n \in \mathbb{C}$.

Con esto, el espacio matemático en donde un sistema cuántico es mapeado debe ser tal que sus elementos sean los vectores complejos $|\psi\rangle$, con un espacio dual con elementos $\langle \psi |$, en el que esté definida la operación de producto interno

$$\langle \phi | \psi \rangle : \mathbb{H} \times \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad (2.3)$$

conocido como Espacio de Hilbert, representado como \mathbb{H} , del cual se puede definir un subespacio $S(\mathbb{H}) = \{|\psi\rangle \mid \langle \psi | \psi \rangle = 1\}$ de *kets* normalizados.

Como cada elemento del espacio de Hilbert es un vector complejo y el producto interno entre dos *kets* es un número complejo. La interpretación física directa que estos tienen es mediante el módulo cuadrado del *braket*, obteniendo un valor real que como tal representa una probabilidad en el caso normalizado. De esto, se tiene que, desde un punto de vista físico, $|\psi\rangle \sim |\phi\rangle$ cuando $|\psi\rangle = c|\phi\rangle$ con $c \in \mathbb{C}$. Se define, por tanto, un subespacio de \mathbb{H} que no considere dichas equivalencias,

$$\mathcal{P}(\mathbb{H}) = \mathbb{H} / \sim, \quad (2.4)$$

el cual es un subespacio también de $S(\mathbb{H})$ y es conocido como espacio proyectivo de \mathbb{H} o espacio fase. Es importante aclarar que cuando se tiene el caso normalizado, $|\langle \Phi | \Phi \rangle|^2 = |c|^2 = 1$, entonces $c = e^{i\phi}$ con ϕ una fase. Se puede, por tanto, definir una proyección canónica del espacio de Hilbert al espacio proyectivo dada como

$$\Pi : \mathbb{H} \rightarrow \mathcal{P}(\mathbb{H}), \quad (2.5)$$

que representa al conjunto de vectores complejos equivalentes $[\psi]$ en \mathbb{H} , que son representados por un solo vector $|\psi\rangle$ en $\mathcal{P}(\mathbb{H})$. Sí se considera la operación inversa Π^{-1} , entonces se está refiriendo a un objeto matemático conocido como haz fibrado (*fibre bundle*).

Para el caso específico de $|\psi\rangle$'s normalizados se define una función

$$\pi : S(\mathbb{H}) \rightarrow \mathcal{P}(\mathbb{H}) \quad (2.6)$$

tal que mapea un conjunto de estados en $S(\mathbb{H})$ a un punto en $\mathcal{P}(\mathbb{H})$, tales que cumplen con las características de un haz fibrado [56], dados como

$$\pi^{-1}([\psi]) = \left\{ \frac{e^{i\phi} |\psi\rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \in S(\mathbb{H}) \right\}, \quad (2.7)$$

donde se tiene que $e^{i\phi}$ es un elemento del grupo $U(1)$ de Lie y, por tanto, la construcción es un haz $U(1)$ -fibrado ($U(1)$ -bundle)¹.

Por otro lado, para comprender mejor el significado de un *ket* se consideran los eigenket's de un Hamiltoniano

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (2.8)$$

donde E_n son los eigenvalores de H . Cada eigenket representa un estado normal del sistema, los cuales son ortonormales y los d eigenket's forman una base de \mathbb{H} , por lo que cada estado $|\psi\rangle$ puede ser representado como un desarrollo lineal de los “estados naturales” del sistema,

$$|\psi\rangle = a_0 |0\rangle + \dots + a_d |d\rangle \quad (2.9)$$

con $a_n \in \mathbb{C}$ y $|n\rangle$, con $n = 0, \dots, d$, los d eigenkets de H .

Como se mencionó anteriormente, $|\psi\rangle$ representa una distribución probabilística, por lo que al proyectar el estado sobre un eigenestado, $\langle n|\psi\rangle = a_n$, entonces dicha interpretación se vuelve más clara, ya que a_n es la amplitud del estado $|\psi\rangle$ en la dirección $|n\rangle$, donde el módulo cuadrado $p_{a_n} = |a_n|^2 = ||\langle n|\psi\rangle||^2$ es la probabilidad de que el sistema esté en el estado $|n\rangle$. Por tanto, la normalización de un estado cualquiera, $|\psi\rangle$, puede ser representada como

$$||\psi||^2 = \langle \psi|\psi\rangle = |a_0|^2 + |a_1|^2 + \dots + |a_{d-1}|^2 = 1. \quad (2.10)$$

Otro concepto, útil para las siguientes secciones, es el producto externo $|\psi\rangle \langle \phi|$, el cual se define como

$$|\psi\rangle \langle \phi| = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} (b_0^* \quad b_1^* \quad \dots \quad b_n^*) = \begin{pmatrix} a_0 b_0^* & a_0 b_1^* & \dots & a_0 b_n^* \\ a_1 b_0^* & \ddots & & \\ \vdots & & \ddots & \\ a_n b_0^* & & & a_n b_n^* \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

con el que se puede definir un proyector $\hat{P} = |\phi\rangle \langle \phi|$, el cual actúa sobre un estado ψ como $P|\psi\rangle = c|\phi\rangle$, con $c = \langle \phi|\psi\rangle$, proyectando el estado $|\psi\rangle$ al estado $|\phi\rangle$.

2.2. Operadores Lineales

Como se vio, un proyector modifica el estado original y puede ser representado mediante el producto externo de ket's. Tal como los proyectores, se pueden definir otros operadores que modifican los estados, transformándolos en otros estados, representando una medición, o cualquier operación deseada.

Usando el producto externo ya definido y una base $\{|n\rangle\}$ del espacio de Hilbert de dimensión d , se definen los operadores como una combinación lineal de productos externos de kets que forman una base en \mathbb{H} ,

$$\hat{O} = \sum_{nm} o_{nm} |n\rangle \langle m|, \quad (2.12)$$

¹Para una mayor claridad sobre estas consideraciones se puede consultar [56; 57], donde se desarrolla la mecánica cuántica desde un punto de vista geométrico.

de tal forma que su acción sobre un estado cualquiera $|\psi\rangle$ es $\hat{O}|\psi\rangle = \sum_{nm} o_{nm} |n\rangle \langle m|\psi\rangle$, esto es, el operador genera otro estado dado por la combinación lineal de estados donde los coeficientes del desarrollo son los elementos del operador por la proyección en cada dirección de la base. Esta forma de definir los operadores es útil para visualizar geoméricamente la acción de un operador.

El primer operador que se puede definir es la identidad de dimensión $d \times d$, o relación de completez, dada como

$$\mathcal{I}_d = \sum_{n=0}^{d-1} |n\rangle \langle n|, \quad (2.13)$$

recordando que $|n\rangle$ es una base del espacio \mathbb{H} sobre el que actúa \mathcal{I} .

A partir de la relación de completez, se encuentran los valores de los elementos del desarrollo de los operadores,

$$\hat{O} = \mathcal{I}_d \hat{O} \mathcal{I}_d = \sum_i^d |i\rangle \langle i| \hat{O} \sum_j^d |j\rangle \langle j| = \sum_{i,j}^d |i\rangle \langle i| \hat{O} |j\rangle \langle j| = \sum_{ij}^d o_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (2.14)$$

donde $o_{ij} = \langle i|\hat{O}|j\rangle$ son los elementos de matriz del operador. Como tal, los operadores son mapeos lineales que actúan sobre el espacio de Hilbert. También se pueden definir aquellos operadores que actúan sobre el espacio dual como los operadores adjuntos denotados por \hat{O}^\dagger .²

Como el operador puede representarse por una matriz, se define la traza de un operador como la suma de los elementos de la diagonal de dicha matriz, como

$$\text{Tr}[\hat{A}] = \sum_n \langle n|\hat{A}|n\rangle, \quad (2.15)$$

de la cual se puede definir el producto interno de Hilbert-Schmidt, el cual permite definir la ortogonalidad entre dos operadores como,

$$\hat{A} \cdot \hat{B} = \text{Tr}[\hat{A}^\dagger \hat{B}]; \quad (2.16)$$

que, si son ortogonales, entonces

$$\hat{A} \cdot \hat{B} = 0.$$

Con esto, la norma de un operador es

$$\hat{A} \cdot \hat{A} = N. \quad (2.17)$$

Con la definición de la ortonormalidad se tiene que una base de operadores $\{\hat{Q}\}$ del espacio de Hilbert de dimensión d cumple con que

$$\hat{Q}_i \cdot \hat{Q}_j = \delta_{ij} N \quad \text{y} \quad \sum_{i=1}^{d^2} \hat{Q}_i \hat{Q}_i = \mathcal{I}, \quad (2.18)$$

²Por sencillez, de ahora en adelante los operadores se denotaran con letras del alfabeto latino, a menos que se especifique lo contrario.

donde \hat{Q}_i son los elementos de la base con norma N . Con dicha base se obtiene la descomposición de cualquier operador \hat{A} dada por

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^{d^2} (\hat{Q}_i \cdot \hat{A}) \hat{Q}_i = \sum_{i=1}^{d^2} \text{Tr}[\hat{Q}_i^\dagger \hat{A}] \hat{Q}_i. \quad (2.19)$$

Dentro de los operadores lineales (ecuación (2.14)), se tienen aquellos que pueden diagonalizarse (operadores normales), por lo que tienen un desarrollo en una base del espacio de Hilbert dada por

$$\hat{R} = \sum_n r_n |r_n\rangle \langle r_n|, \quad (2.20)$$

la cual es conocida como *desarrollo espectral*, en donde r_n son los eigenvalores de \hat{R} y $|r_n\rangle$ los eigenvectores correspondientes. La ecuación de eigenvalores correspondiente es

$$\hat{R} |r_n\rangle = r_n |r_n\rangle. \quad (2.21)$$

Para definir una observable³, se postula que el operador debe cumplir con una ecuación de eigenvalores los cuales serán los valores esperados de la observable. Por lo tanto, \hat{R} debe ser un operador normal. Dado que los eigenvalores de una observable se interpretaran como un posible resultado en una medición, estos deberán ser reales. De esto, se llega a que el operador transpuesto conjugado no cambia, i.e

$$\hat{R}^\dagger = \hat{R}. \quad (2.22)$$

Dichos operadores se conocen como operadores hermitianos.

Dentro de los operadores hermitianos se encuentran los:

- Operadores Positivos:

$$\langle \psi | \hat{R} | \psi \rangle \geq 0 \text{ o } r_n \geq 0; \quad (2.23)$$

- Operadores Proyectivos: Se definen como aquellos operadores hermitianos positivos que es idempotente, esto es,

$$\hat{P}^2 = \hat{P}. \quad (2.24)$$

con eigenvalores en el rango

$$p_i \in \{0, 1\}. \quad (2.25)$$

Existe también otro tipo de operadores normales que no son hermitianos, y, por tanto, no representan observables, los cuales resultan de suma importancia tanto para el desarrollo de la mecánica cuántica, como para los conceptos usados en la presente tesis. Dichos operadores son conocidos como operadores unitarios, y deben su nombre a que cumplen con,

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}, \quad (2.26)$$

³Operador, el cual puede ser medido experimentalmente.

por lo que $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \mathcal{I}$, que pueden ser expresados mediante una descomposición espectral dada por

$$\hat{U} = \sum_i e^{i\phi} |i\rangle \langle i|, \quad (2.27)$$

donde se tiene que los eigenvalores de este operador son fases complejas. Este tipo de operadores es de suma importancia porque definirá una transformación unitaria $\hat{R}' |\psi'\rangle = \hat{U}\hat{R}\hat{U}^\dagger(\hat{U} |\psi\rangle) = \lambda\hat{U} |\psi\rangle$ de los operadores

$$\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1}, \quad (2.28)$$

o del vector complejo

$$|\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle. \quad (2.29)$$

Si $\hat{U}_p = \exp(i\hat{H}t/\hbar)$, con H el Hamiltoniano del sistema, entonces \hat{U} representa la evolución dinámica del sistema. Si este es el caso, U_p se conoce como propagador. Existen otro tipo de operadores unitarios, incluyendo aquellos que representan la fase del estado, que son de especial interés en la presente tesis.

Entonces, cada estado cuántico está representado por un vector complejo que físicamente representa una distribución de probabilidad sobre los eigenestados del sistema, como se ve en ecuación (2.9). De esto, el hecho de medir una observable R representará asignarle un peso probabilístico a la acción de \hat{R} en cada dirección de sus eigenestados y sumarlos,

$$\langle \psi | \hat{R} | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | r_n | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_n r_n |\langle n | \psi \rangle|^2$$

con r_n y $|n\rangle$ los eigenvalores y eigenkets de R , pero $|\langle n | \psi \rangle|^2$ es la probabilidad de que el estado $|\psi\rangle$ esté en el estado $|n\rangle$, por lo que $\langle \psi | \hat{R} | \psi \rangle = \langle \hat{R} \rangle$ es un valor esperado.

De lo anterior se tiene que, como se mencionó anteriormente, físicamente el término de fase parece irrelevante, ya que $\langle \psi | e^{-i\phi} \hat{R} e^{i\phi} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{R} | \psi \rangle$.

2.3. Estados Cuánticos

Hasta ahora se ha considerado que los estados cuánticos están representados por vectores complejos normalizados del subespacio $S(\mathbb{H})$, de la forma (2.9). Sin embargo, en general un estado cuántico puede ser una mezcla de estados $\{|\psi_n\rangle\}$, no necesariamente eigenvectores del Hamiltoniano del sistema estudiado.

Por tanto, para generalizar el concepto de estado cuántico, pasando de representarlo como un vector complejo a un operador de estado $\hat{\rho}$, o matriz de densidad, con desarrollo,

$$\hat{\rho} = \sum_n \lambda_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \quad (2.30)$$

donde λ_n es el peso estadístico del estado $|\phi_n\rangle$ en $\hat{\rho}$, los cuales deben tener las siguientes características para representar una distribución de probabilidad:

- $\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$, que implica $\sum_n \lambda_n = 1$

- $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$, por lo que $p_n \in \mathfrak{R}$
- $\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \geq 0$, o lo que es lo mismo, $p_n > 0$

con $|\psi\rangle$ un *ket* cualquiera.

Si se tiene $\hat{\rho}$, entonces la evolución de un operador de estado puede ser escrita mediante la representación de Heisenberg,

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^{-1}(t, t_0) \quad (2.31)$$

donde $U(t, t_0)$ es el operador de evolución temporal. En esta representación se obtiene la ecuación de Von-Neumann

$$i\hbar \dot{\hat{\rho}} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)]. \quad (2.32)$$

Si conocemos la evolución temporal del sistema, esto es, se tiene $\hat{\rho}(t)$, entonces la descripción del sistema está completa.

2.3.1. Estados Puros

Los estados puros son aquellos estados cuánticos que son representados por un *ket* normalizado, $|\psi\rangle \in S(\mathbb{H})$, o en su defecto por una función de onda ψ . Si un sistema está descrito por el Hamiltoniano H , entonces sus eigenestados están dados por la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (2.33)$$

con E_n las energías del sistema y $|n\rangle$ los eigenvectores, los cuales están orto-normalizados, $\langle m | n \rangle = \delta_{mn}$. El conjunto de eigenvectores forma una base del espacio de Hilbert normalizado $S(\mathbb{H})$, por lo que, cualquier estado puro $|\psi\rangle$ puede ser desarrollado como una combinación lineal del conjunto de eigenvectores de \hat{H} , siendo $|\psi\rangle$ una distribución de probabilidad sobre los eigenestados del sistema.

De la generalización de la definición de estado se tiene que un estado puro puede ser representado como

$$\hat{\rho}_P = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (2.34)$$

la cual cumple con que:

- $\hat{\rho}_P$ es un operador positivo (y, por lo tanto, hermitiano).
- $\hat{\rho}_P$ está normalizado, $\text{Tr}[\hat{\rho}] = \langle \psi | \psi \rangle = 1$.
- Al ser puro, $\hat{\rho}_P$ es idempotente, esto es, $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. Esto es equivalente a decir que $\text{Tr}[\hat{\rho}^2] = 1$.

En el formalismo de la matriz de densidad de un estado puro, si se desea medir el valor esperado de una observable R en el estado $|\psi\rangle$ se tiene que,

$$\langle \hat{R} \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho}_P \hat{R}] = \text{Tr}[|\psi\rangle \langle \psi| \hat{R}] = \langle \psi | \hat{R} | \psi \rangle. \quad (2.35)$$

2.3.2. Estados Mixtos

Los estados mixtos son todos aquellos estados que pueden ser descompuestos en una mezcla estadística de estados puros, esto es,

$$\hat{\rho} = \sum_n \lambda_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \sum_n \lambda_n \hat{\rho}_n, \quad (2.36)$$

donde $\hat{\rho}_n = |\phi_n\rangle \langle \phi_n|$. Cada λ_n es la probabilidad de que el estado esté en el estado puro $|\phi_n\rangle$, mientras que la medición sobre una variable física \hat{R} estará dada por,

$$\langle \hat{R} \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{R}] = \sum_n \lambda_n \langle \phi_n | \hat{R} | \phi_n \rangle. \quad (2.37)$$

En este caso, dado que $p_n < 1$ se tiene que $\lambda_n^2 < \lambda_n$, entonces

$$\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}. \quad (2.38)$$

con $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) < 1$. Con esto, se puede medir el nivel de mezclado mediante el número de Schmidt, $n_S = 1/\text{Tr}(\hat{\rho}^2)$.

Estados Térmicos

La mayor parte de los sistemas cuánticos son representados por estados mixtos, donde uno de los más relevantes son los llamados Estados Térmicos, donde se considera que el sistema físico se encuentra en un ambiente a una cierta temperatura T , . Estos estados se encuentran definidos mediante el formalismo del ensamble canónico, el cual considera que el sistema está en contacto con un reservorio a temperatura T . Por tanto, cada estado del sistema estará pesado por el factor de Boltzmann [58], dado como

$$p_n(\beta) = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \quad (2.39)$$

donde $\beta = 1/k_B T$ con k_B la constante de Boltzmann y $Z = \sum_m e^{-\beta E_m}$ la función de partición, con E_n los eigenvalores del Hamiltoniano del sistema considerado, \hat{H} . Con esto, la matriz de densidad del sistema está dada por

$$\hat{\rho}_T = \sum_n p_n(\beta) |n\rangle \langle n|, \quad (2.40)$$

donde $\text{Tr}[\hat{\rho}] = \sum_i p_n = 1$ y p_n es el peso estadístico de $|i\rangle$, los cuales resultan ser los eigenvalores de $\hat{\rho}$. Dado que $[\hat{\rho}, \hat{H}] = 0$, entonces $|i\rangle$ son los eigenvectores de \hat{H} .

Una vez obtenida la matriz de densidad se pueden calcular diferentes propiedades termodinámicas como la energía promedio ($\langle E \rangle$) y el calor específico (C_H)[58], dadas como

$$\langle E \rangle = \text{Tr}[\hat{H} \hat{\rho}_T] = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \sum_i p_i E_i; \quad (2.41)$$

$$C_H = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{-1}{k_B T^2} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (2.42)$$

entre otras fuera del interés del presente trabajo.

2.4. Visualización Geométrica de Estados Cuánticos.

Una vez definido el espacio de Hilbert como aquel al que pertenecen los estados cuánticos, resulta interesante una visualización geométrica de cada estado y la acción de los operadores. Si bien esto parecería algo trivial, en un sistema de d niveles, con $d = 2, 3, 4, \dots$, existen $d^2 - 1$ direcciones independientes, por lo que la visualización geométrica deberá ser de $d^2 - 1$ dimensiones. Por esto, de manera directa solo sistemas de $d = 0, 1, 2$ pueden ser representados de manera directa, donde el caso más conocido por ser un ejemplo didáctico y por sus aplicaciones en varios campos, incluyendo computación cuántica, es con $d = 2$, conocido como cúbit, donde la visualización corresponde a una esfera.

En esta sección se presenta el desarrollo de la visualización geométrica de un sistema de dos niveles (cúbit), y se expone el modelo propuesto en [59] para sistemas de tres niveles (cútrit).

Cúbit

Para un sistema de dos niveles, o cúbit, se tiene que cada estado puro puede ser representado de forma general como

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle,$$

utilizando la base canónica (o computacional) $|0\rangle = (1, 0)^T$ y $|1\rangle = (0, 1)^T$, donde T denota el transpuesto. Dado que los coeficientes del desarrollo deben cumplir con la condición de normalización, $|a|^2 + |b|^2 = 1$, la cual es la ecuación de un círculo con radio unitario, se tiene que el estado de un cúbit se reescribe en función de los ángulos de coordenadas esféricas

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\varphi}|1\rangle, \quad (2.43)$$

donde se agregó un tercer grado de libertad φ como la fase relativa del estado.

Con esto, a un estado puro del cúbit le corresponderá una coordenada (θ, φ) , formando de esta manera una esfera. Se considera $\theta/2$ para que el estado $|0\rangle$ esté en el polo norte y $|1\rangle$ en el polo sur de la esfera. A dicha esfera se le conoce como esfera de Bloch (Ver la figura 2.1).

Considerando un operador \hat{R} que actúa sobre el espacio de Hilbert del cúbit, resulta útil desarrollarlo en la base computacional de tal forma que

$$\hat{R} = R_1|0\rangle\langle 0| + R_2|0\rangle\langle 1| + R_3|1\rangle\langle 0| + R_4|1\rangle\langle 1| \quad (2.44)$$

con $R_1, R_2, R_3, R_4 \in \mathbb{C}$. Si lo que se busca es que \hat{R} sea un operador que represente un estado, esto es, un operador de estado o matriz de densidad, entonces se debe cumplir que $R_1 + R_4 = 1$ con $R_1, R_4 \in \mathfrak{R}$, y que $R_3 = r_2^*$, para cumplir con la hermiticidad de la matriz de densidad. Por conveniencia se expresa $R_3 = q_R + iq_I$ y $R_2 = q_R - iq_I$ donde $q_R, q_I \in \mathfrak{R}$ para de esta manera poder definir las llamadas matrices de Pauli como

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

las cuales, junto con la identidad, forman una base del espacio de $SU(2)$ ya que cumplen con

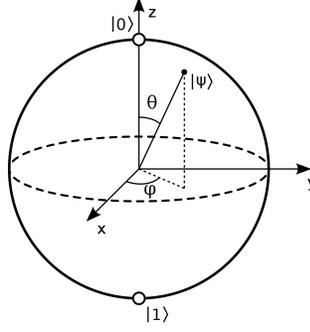


Figura 2.1: Visualización geométrica de un sistema de dos niveles, mediante la esfera de Bloch. Obtenida de [60]

- Ser ortogonales

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij}, \quad (2.45)$$

y satisfacen la relación de completéz,

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \Rightarrow \mathcal{I}^2/4 + \sum_i^{d^2-1} \sigma_i^2/4 = \mathbb{I}. \quad (2.46)$$

Las matrices de Pauli no afectan la interpretación probabilística ni la hermiticidad de una matriz de densidad, ya que

- $\text{Tr}[\sigma_x] = \text{Tr}[\sigma_y] = \text{Tr}[\sigma_z] = 0 \rightarrow$ Traza nula
- $\sigma_x = \sigma_x^\dagger, \sigma_y = \sigma_y^\dagger$ y $\sigma_z = \sigma_z^\dagger$,

por lo que la matriz de densidad de un cúbit se puede escribir como

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (\mathbb{I} + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}), \quad (2.47)$$

donde $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$ se le llama el vector de Bloch, con $a_i = \text{Tr}[\sigma_i \rho]$ para $i = x, y, z$. En esta representación se llega a que la matriz de densidad está dada por

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} \\ \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + a_z & a_x - ia_y \\ a_x + ia_y & 1 - a_z \end{pmatrix},$$

con

$$a_x = \rho_{10} + \rho_{01} = 2\Re(\rho_{01}); \quad (2.48)$$

$$a_y = i(\rho_{01} - \rho_{10}) = 2\Im(\rho_{10}); \quad (2.49)$$

$$a_z = \rho_{00} - \rho_{11}. \quad (2.50)$$

Si se supone un estado puro tal que $\text{Tr}[\rho^2] = 1$, entonces

$$\text{Tr}[\hat{\rho}^2] = \frac{1}{2} (1 + |\vec{a}|^2) = 1 \quad \Rightarrow |\vec{a}| = 1, \quad (2.51)$$

mientras que para un estado mixto

$$\text{Tr}[\hat{\rho}^2] = \frac{1}{2} (1 + |\vec{a}|^2) < 1 \quad \Rightarrow |\vec{a}| < 1. \quad (2.52)$$

Por lo tanto, los estados de un cúbit pueden ser representados por una esfera unitaria, donde los estados puros representarían la superficie de dicha esfera, $|\vec{a}_{puro}| = 1$, mientras que los estados mixtos serán mapeados dentro de la esfera, $|\vec{a}_{mixto}| < 1$, de tal forma que el centro de la esfera será el estado máximamente mezclado⁴.

Dado que cada estado será mapeado a algún punto de la esfera, la acción de cualquier operador podrá ser representada como una rotación en θ y ϕ , y cualquier proceso de mezclado estará dado por un cambio en la magnitud del vector de Bloch. Esto es una gran ventaja en computación cuántica, ya que cualquier compuerta lógica en un algoritmo podrá ser expresado en término de rotaciones.

La esfera de Bloch puede ser utilizada en sistemas compuestos de cúbits con las debidas precauciones del valor de cada eje y cada punto de la esfera.

Cútrit

Si bien solo los sistemas de igual o menor dimensión que un cúbit pueden ser mapeados directamente a una visualización geométrica, en la literatura se encuentran al menos dos opciones para tener una visualización geométrica de un sistema de tres niveles (o cútrit) [59; 61], el cual tiene $3^2 - 1$ grados de libertad. La reducción de 8 direcciones a 3 representará una pérdida de información, la cual dependerá del modelo usado.

En esta tesis se optó por trabajar con el modelo propuesto por Eltschka et al. en [59], donde los autores realizan una proyección de los seis ejes que corresponden a los elementos fuera de la diagonal de la matriz ρ del cútrit.

Para entender el proceso realizado por Eltschka, se debe obtener primero la versión del vector de Bloch para el cútrit. Para esto se deberá definir ocho matrices tales que sean base de $SU(3)$ y que permitan un desarrollo cuyos coeficientes se relacionen con los elementos de la matriz de densidad que cumplen con $\sum_i \rho_{ii} = 1$ y $\rho_{ij} = \rho_{ji}^*$.

Siguiendo la idea del cúbit donde se utilizaron las matrices de Pauli las cuales son usadas también como matrices de espín-1/2, $\hat{S}_i = \hbar\sigma_i/2$, se podría pensar en una base con las matrices de espín $s = 1$, $\{\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z\}$, donde las cinco matrices restantes para completar la base de $SU(3)$ correspondan a los elementos cuadrupolares $\hat{S}_\alpha^{(2)} = \hat{S}_i\hat{S}_j + \hat{S}_j\hat{S}_i$ con $i, j = x, y, z$, de los cuales solo cinco son independientes, ya que se cumple que $\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = 2\hbar^2$. Con esto, la matriz de densidad podría ser escrita como⁵

$$\hat{\rho} = \mathcal{I} + a_x\hat{S}_x + a_y\hat{S}_y + a_z\hat{S}_z + \sum_n b_n\hat{S}_n^2 + \sum_{n \neq m} c_{nm}\{\hat{S}_n, \hat{S}_m\}, \quad (2.53)$$

donde $a_n = \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{S}_n]/\hbar$, $b_n = \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{S}_n^2]/\hbar^2$ y $c_{nm} = \text{Tr}[\hat{\rho}\{\hat{S}_n, \hat{S}_m\}]/\hbar^2$ con $\{\cdot, \cdot\}$ como el anti-conmutador.

Si bien la base de espín-1 es usada con frecuencia, resulta útil definir la generalización de

⁴Esto porque el estado máximamente mezclado es $\hat{\rho} = \mathbf{I}/2$, y, por tanto $a_x = a_y = a_z = 0$

⁵Eligiendo de manera arbitraria los cinco términos cuadrupolares independientes.

las matrices de Pauli, conocidas como matrices de Gell-Mann, las cuales forman una base de $SU(3)$, son hermitianas, linealmente independientes y tienen traza nula para que la condición $\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$ se cumple mediante la matriz identidad. Gell-Mann en 1962 [62] propuso las matrices para un sistema de tres niveles, que posteriormente fueron generalizados a n dimensiones, dadas como⁶

$$\begin{aligned} X_1 &= \sqrt{\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; & Y_1 &= \sqrt{\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ X_2 &= \sqrt{\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; & Y_2 &= \sqrt{\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ X_3 &= \sqrt{\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; & Y_3 &= \sqrt{\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \\ Z_1 &= \sqrt{\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; & Z_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

las cuales cumplen con

$$\lambda_i \cdot \lambda_j = 3\delta_{ij}; \quad (2.54)$$

$$\left(\frac{\mathbb{I}}{3}\right)^2 + \sum_{i=1}^{d^2-1} \frac{\lambda_i \lambda_i}{9} = \mathbb{I}; \quad (2.55)$$

$$\text{Tr}[\lambda_i] = 0; \quad (2.56)$$

$$\lambda_i^\dagger = \lambda_i \quad (2.57)$$

donde, para ajustar notación, se definió $\lambda_i = X_i$ para $i = 1, 2, 3$, $\lambda_j = Y_{j-3}$ para $j = 4, 5, 6$ y $\lambda_l = Z_{l-6}$ para $l = 7, 8$.

De esto, el desarrollo de operador de estado en un cútrit se escribe como

$$\hat{\rho} = \frac{1}{3} \left(\mathbb{I}_3 + \sum_{j=1}^3 x_j X_j + \sum_{k=1}^3 y_k Y_k + \sum_{l=1}^2 z_l Z_l \right); \quad (2.58)$$

donde los coeficientes están dados por $x_j = \text{Tr}(X_j \hat{\rho})$, $y_k = \text{Tr}(Y_k \hat{\rho})$ y $z_l = \text{Tr}(Z_l \hat{\rho})$. Los seis coeficientes x_j, y_j , con $j = 1, 2, 3$, los dos de z_l con $l = 1, 2$ representaran las coordenadas en cada dirección de la visualización de ocho dimensiones.

Con dichos componentes se puede definir la métrica del espacio euclidiano mediante la norma de Hilbert-Schmidt $\|\hat{\rho}_1 - \hat{\rho}_2\|_2$, la cual debe cumplir con algunas restricciones impuestas por las propiedades de los sistemas de tres niveles[59], las cuales son:

- $SU(3)$ es un conjunto convexo⁷ con la topología de una esfera maciza, por lo que el modelo debería de tener dichas características.

⁶Los coeficientes de cada matriz pueden variar dependiendo del interés del autor.

⁷Un conjunto convexo C es aquel donde si se toman dos elementos del conjunto $\hat{\rho}_1$ y $\hat{\rho}_2$, entonces $\lambda \hat{\rho}_1 + (1 - \lambda) \hat{\rho}_2 \in C$ para cualquier $\lambda \in [0, 1]$

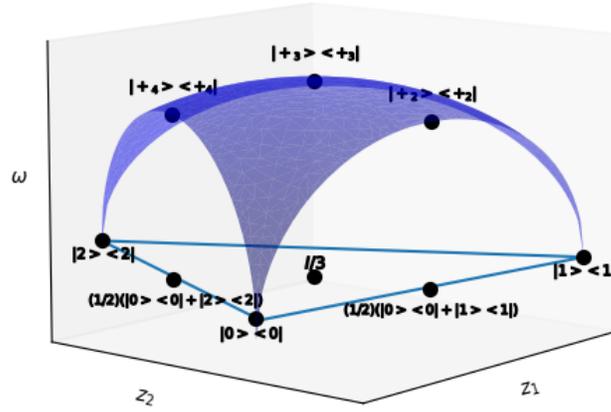


Figura 2.2: Representación geométrica de un cútrit de acuerdo al modelo de Eltschka et al. [59] donde se tiene que $|+2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, $|+3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle)$ y $|+4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |2\rangle)$. La malla azul que se observa en la figura corresponde a los estados puros del sistema, donde los vértices corresponden a los estados conformados por los vectores canónicos $|0\rangle$, $|1\rangle$ y $|2\rangle$.

- La geometría de los estados (cuerpo de Bloch) no forman un politopo ni será suave.
- Los estados puros formarán una superficie separada del estado máximamente mezclado $\frac{1}{3}\mathcal{I}_3$ a una distancia máxima de $\sqrt{2}$.
- Los estados mezclados estarán dentro de la superficie formada por los estados puros.

Considerando dichas restricciones, Eltschka propone una proyección de las ocho componentes a tres componentes, donde considera que las matrices Z_1 y Z_2 forman una subálgebra de Cartan y los estados de la base canónica del espacio de Hilbert ($|0\rangle, |1\rangle, |3\rangle$) están en el plano $Z_1 - Z_2$. De esto, se propone la proyección

$$\omega = \sqrt{\sum_{j=1}^3 (x_j^2 + y_j^2)}, \quad (2.59)$$

con lo que el vector tipo Bloch está dado por

$$\vec{b} = (z_1, z_2, \omega). \quad (2.60)$$

En esta representación se tiene que:

- El estado máximamente mezclado se encuentra en $\vec{b} = (0, 0, 0)$.
- Para estados puros se tiene que

$$\text{Tr}[\hat{\rho}^2] = \frac{1}{3} (1 + \omega^2 + z_1^2 + z_2^2) = 1, \quad (2.61)$$

por lo que los estados puros están a una distancia de $|\vec{b}_p| = \sqrt{2}$ del estado máximamente mezclado.

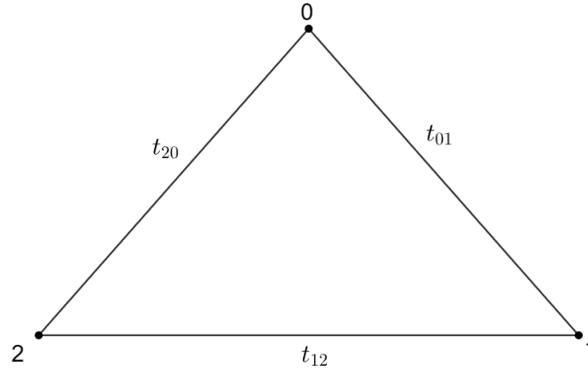


Figura 2.3: Esquema de la cadena lineal, o trímero, considerado para ejemplificar su representación geométrica.

- Para estados mixtos se tiene que $\text{Tr}[\hat{\rho}^2] < 1$, entonces $|\vec{b}_m| < 1$. Los estados mixtos están dentro del cuerpo de Bloch formado por los estados puros.
- La proyección que se hace en ω genera una pérdida de información en seis componentes de X_i y Y_i , con $i = 1, 2, 3$, lo que se refleja en que existirán estados mapeados al mismo punto que tendrán la diagonal y la pureza igual, pero diferentes valores fuera de la diagonal. Dichos estados mapeados al mismo punto pertenecen a una clase equivalente, formando un subespacio 5-dimensional que será cerrado bajo la acción de operadores unitarios que conmuten con Z_1 y Z_2 .

Trímero

Para ejemplificar los resultados que se obtienen con esta representación se supone una cadena lineal de tres sitios (ver figura 2.3). En la aproximación de amarre fuerte se consideran enlaces entre sitios dados por

$$\begin{aligned} t_{01} &= t_0 + s \cos(\varphi) \\ t_{12} &= t_0 + s \cos(\varphi - 2\pi/3) \\ t_{20} &= [t_0 + s \cos(\varphi - 4\pi/3)] e^{i\alpha}, \end{aligned}$$

donde $e^{i\alpha}$ representa un flujo magnético [7]. De esto, el Hamiltoniano del sistema de tres niveles se escribe como

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & t_{01} & t_{20}^* \\ t_{01}^* & 0 & t_{12} \\ t_{20} & t_{12}^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.62)$$

Si se obtienen numéricamente los eigenvalores de \hat{H} y se considera un valor fijo de α en un ciclo $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, se llega a que la trayectoria de tres eigenestados forman un triángulo con los vértices arqueados como se ve en figura 2.4(a). Dicha trayectoria estará contenida en la malla de estados puros con su centro en el estado $|+_3\rangle$, definido con anterioridad.

Por otro lado, se tiene que si se hace el ciclo inverso, esto es, para un φ constante en un ciclo de α se obtiene figura 2.4(c) donde dicha trayectoria es una línea. Al analizar la trayectoria

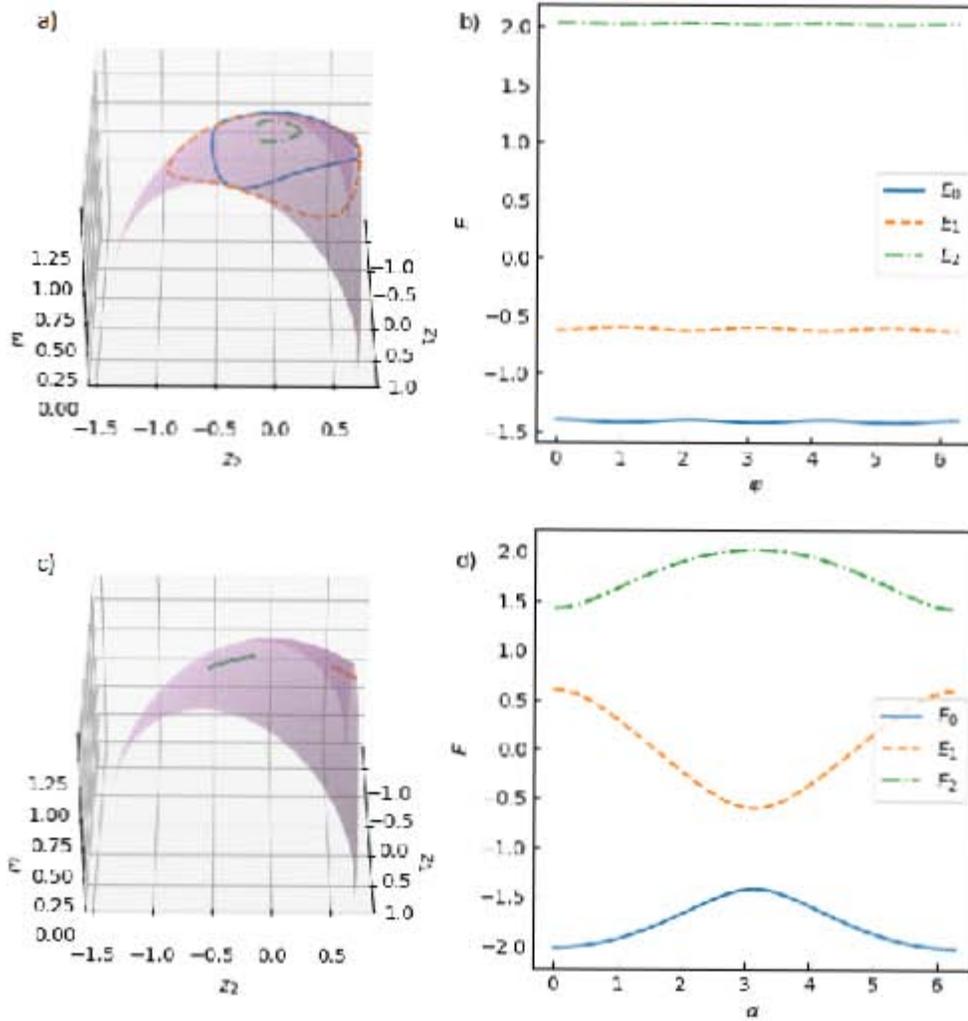


Figura 2.4: Representación geométrica de los tres eigenestados de un trímero. En a) se considera un ciclo en φ para $\alpha = \pi$, donde la energía para dicha evolución se grafica en b). En c) el ciclo es sobre α para un $\varphi = \pi$, donde las energías evolucionan como se ve en d). En ambos caso el color de la trayectoria sobre la malla corresponde al color de la energía, la línea azul continúa corresponde a la energía E_0 , el estado base, la amarilla discontinúa al primer estado excitado E_1 y la verde discontinúa punteada al segundo estado excitado E_2 . Se consideró $t_0 = -1$ y $s = -0.4$

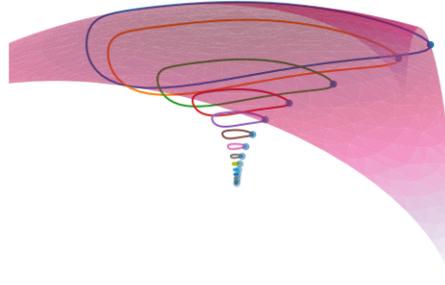


Figura 2.5: Representación geométrica de los estados térmicos del trímero en un ciclo de φ con $\alpha = \pi$ fija, para diferentes temperaturas $T \in \{0.1, 0.3, 0.6, 1.0, 1.5, 2.1, 2.8, 3.6, 4.5, 5.5, 6.6, 7.8, 9.1, 1.5\}$, comenzando con el ciclo cercano al estado puro y terminando con la temperatura con ciclo cercano al estado máximamente mezclado.

detenidamente se encontró que de $0 \leq \alpha < \pi$ la evolución va de izquierda a derecha y de $\pi \leq \alpha \leq 2\pi$ los estados regresan de derecha a izquierda. Es importante enfatizar que, debido a la pérdida de información por la proyección, aunque los puntos mapeados se repiten dos veces, no corresponderán al mismo estado, únicamente a la misma pureza. El estado base y el segundo estado excitado en figura 2.4(c) describen el mismo camino azul. Ahora, considerando los estados térmicos del trímero,

$$\hat{\rho}_T = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{\text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}]} \quad (2.63)$$

se obtiene la figura 2.5, donde se ve que, para cualquier temperatura, la trayectoria en un ciclo de φ para $\alpha = \pi$ mantiene su forma, pero conforme aumenta la temperatura los estados se van “mezclando”, hasta que para temperaturas altas se llega al estado máximamente mezclado, considerando ya el régimen clásico.

Capítulo 3

De Distancias y Métricas

Hasta ahora se han descrito varios conceptos sobre mecánica cuántica que serán útiles para el desarrollo de la presente tesis, uno de ellos es el espacio de Hilbert (\mathbb{H}) al que pertenecen los estados cuánticos. También se ha establecido cómo se pueden representar tanto estados puros como estados mixtos mediante la matriz de densidad ($\hat{\rho}$). Entonces, como en cualquier otro espacio, se puede definir la distancia entre dos estados. Esto, siempre que $D(\rho_1, \rho_2)$, con ρ_1 y ρ_2 elementos del espacio, sea una función bien definida que cumpla con

- Ser real, $D(\rho_1, \rho_2) \in \mathfrak{R}$, y positiva, $D(\rho_1, \rho_2) \geq 0$.
- $D(\rho_1, \rho_1) = 0$.
- Ser simétrica, $D(\rho_1, \rho_2) = D(\rho_2, \rho_1)$.
- Con ρ_3 otro estado cuántico, D cumple con la desigualdad del triángulo: $D(\rho_1, \rho_3) \leq D(\rho_1, \rho_2) + D(\rho_2, \rho_3)$,

entonces se dice que $D(\rho_1, \rho_2)$ es una distancia del espacio considerado.

En el espacio de Hilbert \mathbb{H} se pueden definir diferentes funciones que cumplen con la definición de distancia, pero dentro de la literatura las más utilizadas son la distancia de la Traza [63], dada como

$$D_{\text{Tr}}(\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2) := \frac{1}{2} \text{Tr} |\hat{\rho}_1 - \hat{\rho}_2| = \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\sqrt{(\hat{\rho}_1 - \hat{\rho}_2)^\dagger (\hat{\rho}_1 - \hat{\rho}_2)} \right], \quad (3.1)$$

con $|\hat{A}| = \sqrt{\hat{A}^\dagger \hat{A}}$, y la distancia de Hilbert-Schmidt [64]

$$D_{HS}(\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2) := \sqrt{\text{Tr}[(\hat{\rho}_1 - \hat{\rho}_2)^2]}. \quad (3.2)$$

Ambas distancias son usadas ampliamente, por ejemplo, en el campo de Información Cuántica, donde se suelen usar para medir tanto Coherencia Cuántica como Discordia Cuántica [63; 65]. Para realizar esto se usa la idea de minimizar la distancia entre un estado $\hat{\rho}$ con el que se trabaja y el estado $\hat{\rho}_0$ más cercano que no tiene la característica pedida, en este caso cero coherencia, o discordia.

3.1. Distancia en Estados Puros

Para los estados puros, $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, las distancias antes mencionadas se reducen a

$$D_{\text{Tr}}(\phi_1, \phi_2) = 2\sqrt{1 - |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|}, \quad (3.3)$$

mientras que

$$D_{HS}(\psi_1, \psi_2) = \sqrt{2(1 - |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2)}. \quad (3.4)$$

Si se considera que $|\psi'_2\rangle = e^{i\varphi}|\psi_2\rangle$, con $|\psi'_2\rangle$ y $|\psi_2\rangle$ físicamente equivalentes, las distancias D_{Tr} y D_{HS} serán indiferentes a la fase φ . Aunque los estados sean físicamente equivalentes, matemáticamente representan dos puntos diferentes en el espacio de estados, como se puede ver en la esfera de Bloch antes descrita. Para eliminar la ambigüedad creada por la fase, se debe realizar una minimización para obtener la distancia entre los estados equivalentes más cercanos. La función distancia que considera esto es la distancia de Fubini-Study [43; 44], la cual está definida únicamente para estados puros en la representación de *ket*'s considerando las geodésicas de \mathbb{H} , esto es

$$D_{FS}^2(\psi_1, e^{i\varphi}\psi_2) := \min_{\varphi} \|\psi_1 - e^{i\varphi}\psi_2\|^2 = \min_{\varphi} \langle\psi_1 - e^{i\varphi}\psi_2|\psi_1 - e^{i\varphi}\psi_2\rangle \quad (3.5)$$

donde, desarrollando el *braket* se tiene que

$$\min_{\varphi} \langle\psi_1 - e^{i\varphi}\psi_2|\psi_1 - e^{i\varphi}\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_1\rangle + \langle\psi_2|\psi_2\rangle - 2\max_{\varphi} \Re \langle\psi_1|e^{i\varphi}\psi_2\rangle = 2(1 - |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|), \quad (3.6)$$

donde se usó que $|\langle\psi_1|e^{i\varphi}\psi_2\rangle| \geq \Re \langle\psi_1|e^{i\varphi}\psi_2\rangle$ para obtener el máximo. Con esto, la distancia de Fubini-Study es

$$D_{FS}(\psi_1, \psi_2) = \sqrt{2(1 - |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|)}, \quad (3.7)$$

la cual no es muy diferente a (3.3) y (3.4), pero asegura que la distancia medida es invariante de norma.

Definida la distancia, se define la métrica de Fubini-Study. Considerando los alrededores de un estado puro $|\psi_1\rangle = |\psi(\vec{x})\rangle$, $|\psi_2\rangle = |\psi(\vec{x} + d\vec{x})\rangle$, donde \vec{x} es el conjunto de parámetros de los que depende la evolución del sistema. Expandiendo a segundo orden, usando notación de Einstein sobre el número de parámetros, se llega a

$$\langle\psi(\vec{x})|\psi(\vec{x} + d\vec{x})\rangle = 1 + \langle\psi(\vec{x})|\partial_i\psi(\vec{x})\rangle dx_i + \frac{1}{2} \langle\psi(\vec{x})|\partial_i\partial_j\psi(\vec{x})\rangle dx_i dx_j. \quad (3.8)$$

El módulo del *braket* está dado por

$$|\langle\psi(\vec{x})|\psi(\vec{x} + d\vec{x})\rangle| = 1 + \frac{1}{2} \Re [-\langle\partial_i\psi(\vec{x})|\partial_j\psi(\vec{x})\rangle + \langle\partial_i\psi(\vec{x})|\psi(\vec{x})\rangle \langle\psi(\vec{x})|\partial_j\psi(\vec{x})\rangle] dx_i dx_j, \quad (3.9)$$

donde se usó que $\Re \langle\psi|\partial_i\partial_j\psi\rangle = -\Re \langle\partial_i\psi|\partial_j\psi\rangle$. Con esto, la métrica de Fubini-Study¹ se escribe como

$$ds_{FS}^2 = g_{ij} dx_i dx_j \quad (3.10)$$

donde

$$g_{ij} = \Re [\langle\partial_i\psi|\partial_j\psi\rangle - \langle\partial_i\psi|\psi\rangle \langle\psi|\partial_j\psi\rangle]. \quad (3.11)$$

¹Se puede considerar una derivación alterna [66], sin considerar la distancia de F-S.

$$ds_{F-S}^2 = \|\psi(\lambda + d\lambda) - \psi(\lambda)\|^2 = \langle\delta\psi|\delta\psi\rangle = (\gamma_{\mu\nu} + i\sigma_{\mu\nu}) d\lambda_{\mu} d\lambda_{\nu}$$

3.1.1. Métrica FS del Cúbit-Espín $s=1/2$

Un sistema de espín-1/2 en un campo magnético está descrito por el Hamiltoniano

$$\hat{H} = B\hbar\hat{n} \cdot \hat{\sigma}/2 \quad (3.12)$$

donde $\hat{n} = (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta)$ es la dirección del campo y $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ las matrices de Pauli. Los eigenvalores del sistema son $E_{\pm} = \pm B\hbar/2$, con los correspondientes eigenvectores

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2)e^{i\phi} \end{pmatrix}; \quad |-\rangle = - \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2)e^{i\phi} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

De los eigenvectores se tiene que los parámetros de la métrica de FS son $\{\theta, \phi\}$, por lo que los elementos de la métrica serán $g_{\phi, \phi}$, $g_{\theta\theta}$ y $g_{\phi, \theta}$, respecto a ambos estados. De esto, los elementos de la métrica están dados como

$$g_{\phi\phi}^{(+)} = g_{\phi\phi}^{(-)} = \frac{\sin^2\theta}{4}; \quad g_{\theta\theta}^{(+)} = g_{\theta\theta}^{(-)} = \frac{1}{4}; \quad g_{\theta\phi}^{(+)} = g_{\theta\phi}^{(-)} = 0, \quad (3.14)$$

la cual se puede identificar como la métrica de una esfera de radio constante $r = 1/2$.

3.2. Distancia en Estados Mixtos

Como se vio anteriormente, existen diferentes maneras de obtener la distancia entre dos estados mixtos, la distancia de H-S (ecuación (3.2)) y la distancia de la Traza (ecuación (3.1)), pero aquí se considerará la distancia de Bures que es una generalización de la distancia de F-S para estados mixtos. Otra razón por la cual se considera esta distancia es que su desarrollo está relacionado con la fase de Uhlmann, como se verá posteriormente. La distancia de Bures considera un proceso de purificación y minimización de un estado mixto $\hat{\rho}$, propuesta por Uhlmann en [38].

Purificación de un Estado Mixto

Uhlmann consideró que un estado mixto podía ser “purificado” de tal forma que en un espacio de mayor dimensión podría ser tratado como un estado puro entrelazado. Sea $\hat{\rho}$ la

donde $\langle \partial_\mu \psi | \partial_\nu \psi \rangle = \gamma_{\mu\nu} + i\sigma_{\mu\nu}$. Debido a la antisimetría que se tiene en la parte imaginaria, $\sigma_{\mu\nu} = -\sigma_{\nu\mu}$, $ds_{F-S}^2 = \gamma_{\mu\nu} d\lambda_\mu d\lambda_\nu$.

Esta definición de la métrica de F-S no es invariante de norma, por lo que al realizar un cambio de norma, $|\psi'\rangle = \exp[i\alpha(\lambda)] |\psi\rangle$, se obtiene

$$\begin{aligned} \gamma'_{\mu\nu} &= \gamma_{\mu\nu} - \beta_\mu \partial_\nu \alpha - \beta_\nu \partial_\mu \alpha + \partial_\mu \alpha \partial_\nu \alpha \\ \sigma'_{\mu\nu} &= \sigma_{\mu\nu}, \end{aligned}$$

donde $\beta_\mu = i \langle \psi(\lambda) | \partial_\mu \psi(\lambda) \rangle$, que se conoce como conexión de Berry. Con esto, para hacer la métrica invariante de norma,

$$ds_{F-S}^2 = g_{\mu\nu} d\lambda_\mu d\lambda_\nu$$

con

$$g_{\mu\nu} = \gamma_{\mu\nu} - \beta_\mu \beta_\nu.$$

matriz de densidad de un estado en el espacio de Hilbert \mathbb{H} de dimensión N , se define una matriz w en un espacio \mathbb{H}_w , la cual se expresa como $w = \sqrt{\hat{\rho}}\hat{U}$, donde $\hat{U} \in \mathcal{U}(N)$ es una matriz unitaria que representa la fase de w .

Usando la descomposición espectral de la matriz de densidad, $\hat{\rho} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$, con p_n los eigenvalores y $|\psi_n\rangle$ los eigenvectores de $\hat{\rho}$, se tiene que la raíz² $\sqrt{\hat{\rho}}$ está dada como

$$\sqrt{\hat{\rho}} = \sum_n \sqrt{p_n} |\psi_n\rangle \langle \psi_n|, \quad (3.15)$$

por lo que,

$$w = \sum_n \sqrt{p_n} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| U. \quad (3.16)$$

Como $\hat{\rho}$ es una matriz positiva semi-definida, w se puede considerar como la amplitud de $\hat{\rho}$ y \mathbb{H}_w el correspondiente espacio de amplitudes, entonces

$$\hat{\rho} = ww^\dagger = \left(\sum_n \sqrt{p_n} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \right) \hat{U} \hat{U}^\dagger \left(\sum_m \sqrt{p_m} |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \right). \quad (3.17)$$

Se define un isomorfismo entre los espacios \mathbb{H}_w y $\mathbb{H} \otimes \mathbb{H}$ como

$$w = \sum_n \sqrt{p_n} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \hat{U} \longleftrightarrow |w\rangle = \sum_n \sqrt{p_n} |\psi_n\rangle \otimes U^T |\psi_n\rangle \quad (3.18)$$

donde $\sqrt{p_n} |\psi_n\rangle$ y $\hat{U}^T |\psi_n\rangle$ representan diferentes estados en \mathbb{H} , con \hat{U}^T la transpuesta de \hat{U} . Al estado puro compuesto $|w\rangle$ se conoce como el estado purificado de $\hat{\rho}$ ya que cumple con

$$\hat{\rho} = \text{Tr}_2[|w\rangle \langle w|], \quad (3.19)$$

donde la traza se realiza sobre el segundo espacio.

Minimización de la Trayectoria

Dado que existe un conjunto de estados $|w\rangle$ con diferentes \hat{U} que representarán al mismo estado $\hat{\rho}$, como se ve en ecuación (3.17), se busca obtener la distancia mínima entre

²En la descomposición espectral de un operador normal $\hat{N} = \sum_n \lambda_n |n\rangle \langle n|$, con λ_n los eigenvalores y $|n\rangle$ los eigenvectores de \hat{N} , la matriz $f(\hat{N})$, con f una función, está dada como [67]

$$f(\hat{N}) = \sum_n f(\lambda_n) |n\rangle \langle n|.$$

Entonces, si $f(\hat{\rho}) = \sqrt{\hat{\rho}}$ se debe cumplir que $\sqrt{\hat{\rho}}\sqrt{\hat{\rho}} = \hat{\rho}$. Esto se cumple y se puede ver en la descomposición espectral:

$$\begin{aligned} \sqrt{\hat{\rho}}\sqrt{\hat{\rho}} &= \sum_n \sum_m \sqrt{p_n} \sqrt{p_m} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \psi_n \langle \psi_n| \langle \psi_n| = \sum_n \sum_m \sqrt{p_n} \sqrt{p_m} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \delta_{n,m} \\ &= \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \hat{\rho} \end{aligned}$$

dos estados $\hat{\rho}_1$ y $\hat{\rho}_2$, desde el punto de vista del estado purificado.

En el espacio purificado, el producto interno de dos estados puros se puede escribir en función de las amplitudes, $\langle w_1 | w_2 \rangle = \text{Tr}(w_1^\dagger w_2)$, con lo que la distancia de Fubini-Study $\|\hat{A} - \hat{B}\| = \sqrt{\langle \hat{A} - \hat{B}, \hat{A} - \hat{B} \rangle}$, con $\langle \cdot \rangle$ el producto interno, se puede escribir como

$$D_{F-S}(w_1, w_2) = \min \|w_1 - w_2\| := \min \sqrt{\langle w_1 - w_2 | w_1 - w_2 \rangle} = \min \sqrt{\text{Tr}[|w_1 - w_2|^2]}, \quad (3.20)$$

que se conoce como la distancia de Bures. Desarrollando,

$$\begin{aligned} D_B^2 &= \min \|w_1 - w_2\|^2 = \min \text{Tr}[w_1 w_1^\dagger + w_2 w_2^\dagger - (w_1^\dagger w_2 + w_2^\dagger w_1)] \\ &= \text{Tr}[w_1 w_1^\dagger] + \text{Tr}[w_2 w_2^\dagger] - \max \text{Tr}[w_1^\dagger w_2 + w_2^\dagger w_1] \\ &= \text{Tr}[w_1 w_1^\dagger] + \text{Tr}[w_2 w_2^\dagger] - \max \left\{ \text{Tr}[w_1^\dagger w_2] + \text{Tr}[(w_1^\dagger w_2)^\dagger] \right\}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

donde, para encontrar el máximo se recurre al hecho de que el módulo conjugado de un número complejo es igual o mayor a la parte real de dicho número, $\text{Re}[z] \leq |z|$. De esto, el máximo se da cuando $\text{Re}[z] = |z|$, o, en términos de las amplitudes, cuando la matriz $w_1 w_2^\dagger$ es autoadjunta y positiva definida,

$$w_1^\dagger w_2 = w_2^\dagger w_1 > 0. \quad (3.22)$$

Considerando la definición de $w_{1,2}$, se puede expresar el máximo en función de la fase de las amplitudes, \hat{U}_1 y \hat{U}_2 ,

$$\begin{aligned} \max_{w_1, w_2} |\text{Tr}(w_1^\dagger w_2)| &= \max_{\hat{U}_1, \hat{U}_2} |\text{Tr}(\hat{U}_1^\dagger \sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2} \hat{U}_2)| \\ &= \max_{\hat{U}_1, \hat{U}_2} \text{Re} |\text{Tr}(\sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2} \hat{U}_2 \hat{U}_1^\dagger)| \\ &= \max_{\hat{U}} |\text{Tr}(\sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2} \hat{U})| \end{aligned} \quad (3.23)$$

donde $\hat{U} = \hat{U}_2 \hat{U}_1^\dagger$. Usando la descomposición polar de una matriz $\hat{A} = |\hat{A}\rangle U_A$, con $|\hat{A}\rangle = \sqrt{\hat{A} \hat{A}^\dagger}$ y U_A la amplitud de \hat{A} , se tiene que, usando la desigualdad de Cauchy-Schwarz $|\text{Tr}[\hat{A}^\dagger \hat{B}]| \leq \text{Tr}(\hat{A}^\dagger \hat{A}) \text{Tr}(\hat{B}^\dagger \hat{B})$,

$$\begin{aligned} |\text{Tr}(\sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2} \hat{U})| &= |\text{Tr}(|\sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}\rangle U_{12} \hat{U})| = \left| \text{Tr} \left(\sqrt{|\sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}\rangle \langle \sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}|} \sqrt{|\sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}\rangle \langle \sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}|} U_{12} \hat{U} \right) \right| \\ &\leq \sqrt{\text{Tr}(|\sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}\rangle \langle \sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}|) \text{Tr}(\hat{U}^\dagger U_{12}^\dagger |\sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}\rangle \langle \sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}| \hat{U})} = \text{Tr}(|\sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}\rangle \langle \sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}|) \\ &= \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}_1} \hat{\rho}_2 \sqrt{\hat{\rho}_1}}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

con lo que $\max_{\hat{U}} \text{Re} [\text{Tr}(\sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2} \hat{U})] = \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}_1} \hat{\rho}_2 \sqrt{\hat{\rho}_1}}$.

De esto se llega a que la distancia de Bures se escribe como

$$D_B(\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2) = \sqrt{2 - 2\mathcal{F}(\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2)} \quad (3.25)$$

donde se define la fidelidad de Uhlmann como

$$\mathcal{F}(\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2) = \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}_1} \hat{\rho}_2 \sqrt{\hat{\rho}_1}} \quad (3.26)$$

Para obtener la métrica de Bures se considera una distancia infinitesimal entre dos estados, esto es, $\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}$ y $\hat{\rho}_2 = \hat{\rho} + \delta\hat{\rho}$, y se realiza una aproximación a segundo orden en $\delta\hat{\rho}$ de la fidelidad, tal que

$$\sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\rho} + \delta\hat{\rho})\sqrt{\hat{\rho}}} \approx \hat{\rho} + X(\hat{\rho}, \delta\hat{\rho}) + Y(\hat{\rho}, \delta\hat{\rho}, |\delta\hat{\rho}|^2), \quad (3.27)$$

donde X y Y son los elementos del desarrollo. Elevando al cuadrado se llega a

$$\begin{aligned} \sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\rho} + \delta\hat{\rho})\sqrt{\hat{\rho}} &= \hat{\rho}^2 && \text{Orden cero} \\ &+ \hat{\rho}X + X\hat{\rho} && \text{Orden uno} \\ &+ \hat{\rho}Y + XX + Y\hat{\rho} && \text{Orden dos} \\ &+ YY, && \text{Orden tres} \end{aligned}$$

y, dejando únicamente los términos hasta segundo orden se obtiene el sistema de ecuaciones matriciales

$$\begin{aligned} \sqrt{\hat{\rho}}\delta\hat{\rho}\sqrt{\hat{\rho}} &= \hat{\rho}X + X\hat{\rho} \\ 0 &= \hat{\rho}Y + XX + Y\hat{\rho}. \end{aligned}$$

Si se toma $\hat{\rho}$ en su base diagonal, $\hat{\rho} = \sum_i p_i |i\rangle \langle i|$ con p_i los eigenvalores y $|i\rangle$ los eigenvectores de $\hat{\rho}$, la primera ecuación matricial puede ser expresada mediante coeficientes como

$$\begin{aligned} (\hat{\rho}X)_{\mu\nu} + (X\hat{\rho})_{\mu\nu} &= p_\mu X_{\mu\nu} + X_{\mu\nu} p_\nu = p_\mu^{1/2} \delta\rho_{\mu\nu} p_\nu^{1/2} \\ \Rightarrow X_{\mu\nu} &= \delta\rho_{\mu\nu} \frac{p_\mu^{1/2} p_\nu^{1/2}}{p_\mu + p_\nu}; \end{aligned} \quad (3.28)$$

con la traza de X dada por

$$\text{Tr}[X] = \sum_\mu X_{\mu\mu} = \sum_\mu \frac{\delta\rho_{\mu\mu}}{2} = \frac{1}{2} \text{Tr}[\delta\hat{\rho}] = 0 \quad (3.29)$$

y, de la segunda ecuación matricial se obtiene el término Y ,

$$Y_{\mu\nu} = -(X^2)_{\mu\nu} \frac{1}{p_\mu + p_\nu}, \quad (3.30)$$

con traza

$$\begin{aligned} \text{Tr}[Y] &= \sum_\mu \frac{-1}{2p_\mu} \left(\sum_\sigma X_{\mu\sigma} X_{\sigma\mu} \right) = - \sum_{\mu\sigma} \frac{1}{2p_\mu} |X_{\mu\sigma}|^2 \\ &= -\frac{1}{4} \sum_{\mu\sigma} \frac{|\delta\rho_{\mu\sigma}|^2}{p_\mu + p_\sigma}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Entonces, para $\hat{\rho}$ diagonal, la distancia de Bures se escribe como

$$ds^2(\hat{\rho}) = 2 - 2\text{Tr}[\hat{\rho} + X + Y] = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \frac{|\langle m|d\hat{\rho}|n\rangle|^2}{p_m + p_n} \quad (3.32)$$

Desarrollando el diferencial de $\hat{\rho}$,

$$d\hat{\rho} = \sum_k [dp_k |k\rangle \langle k| + p_k |dk\rangle \langle k| + p_k |k\rangle \langle dk|],$$

con los elementos de matriz dados por

$$\langle m|d\hat{\rho}|n\rangle = dp_n + (p_n - p_m) (\langle m|dn\rangle), \quad (3.33)$$

donde se utilizó que $\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \Rightarrow \langle di|j\rangle = -\langle i|dj\rangle$.

Entonces, obteniendo el módulo cuadrado de ecuación (3.33) finalmente se llega a un desarrollo espectral de la distancia de Bures dado por

$$ds^2(\hat{\rho}) = \frac{1}{4} \sum_n \frac{dp_n^2}{p_n} + \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{(p_n - p_m)^2}{p_n + p_m} |\langle n|dm\rangle|^2. \quad (3.34)$$

Si $p_n = p_n(\vec{\lambda})$ y $|m\rangle = |m(\vec{\sigma})\rangle$, donde $\vec{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_T)$ y $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_J)$ son los parámetros de los que depende ρ ³, la métrica de Bures se escribe como

$$ds^2(\hat{\rho}) = g_{\lambda_1 \lambda_1} d\lambda_1^2 + \dots + g_{\lambda_T \lambda_T} d\lambda_T^2 + g_{\sigma_1 \sigma_1} d\sigma_1^2 + \dots + g_{\sigma_J \sigma_J} d\sigma_J^2 + \text{T.C.}, \quad (3.35)$$

donde las funciones g_{ij} forman los elementos del tensor métrico,

$$g = \begin{pmatrix} g_{\lambda_1 \lambda_1} & g_{\lambda_1 \lambda_2} & \dots & g_{\lambda_1 \sigma_J} \\ g_{\lambda_2 \lambda_1} & g_{\lambda_2 \lambda_3} & \dots & g_{\lambda_2 \sigma_J} \\ \vdots & \ddots & & \\ g_{\sigma_J \lambda_1} & g_{\sigma_J \lambda_2} & \dots & g_{\sigma_J \sigma_J} \end{pmatrix}$$

3.2.1. Desarrollo de la Métrica de Bures para Estados Térmicos

Hasta este punto se ha encontrado la expresión matemática de la métrica Bures para el caso general, pero resulta interesante que para el caso térmico, la métrica de Bures puede ser relacionado con una variable termodinámica como lo es el calor específico C_H , como se ve en [52].

Para ello se considera la matriz de densidad de un estado térmico con el factor de Boltzmann $p_i = e^{-\beta E_i} / Z$ con $Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}]$ y $\beta = 1/k_B T$, donde se supone que \hat{H} es diagonal y puede depender de varios parámetros pero no de la temperatura. Desarrollando únicamente el diferencial respecto a β se tiene

$$\begin{aligned} dp_n &= \frac{\partial p_n}{\partial \beta} d\beta + \dots = \left(-E_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} + \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \sum_m E_m \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} \right) d\beta + \dots \\ &= -p_n (E_n - \langle E \rangle_\beta) d\beta + \dots \end{aligned}$$

³Puede existir algún parámetro $\lambda_i = \sigma_i$, por lo que el elemento de dicho parámetro tendrá contribución tanto del diferencial de p_n como de los eigenkets.

donde $\langle dE \rangle_\beta = \sum_j dE_j p_j$ es el promedio térmico. Al elevar al cuadrado dp_n se llegará a una expresión similar a la ecuación (3.35) donde, por el momento, solo es de interés el elemento de la métrica $g_{\beta\beta}$, que corresponde al diferencial $d\beta^2$. Entonces, el primer elemento de la métrica se escribe como

$$\sum_n \frac{dp_n^2}{p_n} = \sum_n p_n \left(E_n - \langle E \rangle_\beta \right)^2 d\beta^2 + \dots = \text{Var}_\beta(H) d\beta^2 + \dots \quad (3.36)$$

donde he considerado que la varianza de la energía es $\text{Var}(E) = \sum_i p_i (E_i - \langle E \rangle)^2$. Este resultado es de suma importancia, ya que, de mecánica estadística [58], se sabe que

$$C_H = k_B \beta^2 \text{Var}(E),$$

entonces, el componente de la métrica de Bures respecto a la temperatura es proporcional al calor específico del sistema,

$$g_{\beta\beta} = \frac{1}{4} \frac{C_H}{k_B \beta^2} = \frac{k_B C_H}{4} T^2. \quad (3.37)$$

Métrica de Bures para los Estados Térmicos del Cúbit-Espín $s=1/2$

Considerando nuevamente el caso de espín-1/2 con la matriz de densidad de los estados térmicos dada por

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle \langle n|, \quad (3.38)$$

donde los eigenkets están dados como la ecuación (3.13) y $p_n = e^{n\beta B \hbar/2} / Z$ con $n = (+, -)$, donde la función de partición es

$$Z = 2 \cosh \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right).$$

De la ecuación (3.34) se puede ver que los elementos de la métrica que relacionan los ángulos θ, ϕ con los parámetros β, B serán cero, ya que $p_n = p_n(\beta, B)$ y $|n\rangle = |n(\theta, \phi)\rangle$. Calculando los elementos restantes se llega a

$$g_{\beta\beta} = \frac{B^2 \hbar^2}{16} \text{sech}^2 \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right); \quad g_{BB} = \frac{\beta^2 \hbar^2}{16} \text{sech}^2 \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right); \quad (3.39)$$

$$g_{\beta B} = \frac{\beta B \hbar^2}{8} \text{sech}^2 \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right); \quad g_{\phi\theta} = 0 \quad (3.40)$$

$$g_{\phi\phi} = \frac{1}{4} \sin^2 \theta \tanh^2 \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right); \quad g_{\theta\theta} = \frac{1}{4} \cos^2 \theta \tanh^2 \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right) \quad (3.41)$$

Para verificar (3.37), el calor específico del sistema es

$$C_H = \frac{k_B \beta^2 B^2 \hbar^2}{4} \text{sech}^2 \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right), \quad (3.42)$$

por lo que

$$g_{\beta\beta} = \frac{C_H}{4k_B\beta^2}, \quad (3.43)$$

con lo que se logra expresar el elemento de la métrica respecto a β en función del calor específico, o en su lugar, de las fluctuaciones de energía. Este resultado será de gran importancia al momento de relacionar la fase de Uhlmann y la métrica de Bures.

Capítulo 4

Fases Geométricas

Las fases geométricas de sistemas cuánticos han tomado una gran relevancia en diferentes campos de la física como lo es Estado Sólido, Computación Cuántica y Óptica, ya que proveen importante información sobre el espacio de parámetros de un sistema, siendo incluso relacionadas con invariantes topológicos [7; 38], caracterizando así lo que se conoce como transiciones de fase topológicas. Es por esto que existe una gran cantidad de sistemas a los que se les ha calculado dichas fases, tanto para estados puros como estados mixtos, con el objetivo de encontrar aplicaciones y posibles relaciones con observables. Dentro de estos sistemas se encuentra los sistemas de espín- n en un campo magnético B , a los cuales se les ha encontrado $2n$ transiciones de fase al estudiar la fase geométrica de la evolución adiabática del un sistema en contacto con un reservorio a temperatura T [40]. Sea \hat{H} un Hamiltoniano dependiente del tiempo, entonces, un estado $|\psi(t)\rangle$ cumple con la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ESDT)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (4.1)$$

del que se puede obtener la matriz de densidad $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, la cual cumplirá la ecuación de von Neumann

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [H, \rho(t)]. \quad (4.2)$$

Ahora, de la ecuación de von Neumann se tiene que la evolución del sistema será indiferente a transformaciones del Hamiltoniano del tipo $\hat{H}' = \hat{H} + a(t)\mathcal{I}$,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}'(t) = [\hat{H} + a(t)\mathcal{I}, \hat{\rho}'(t)] = [\hat{H}, \hat{\rho}'(t)]$$

con $\hat{\rho}'(t) = |\psi'(t)\rangle \langle \psi'(t)|$, donde $|\psi'(t)\rangle$ es un estado de H' que tendrá una solución general de la forma

$$|\psi'(t)\rangle = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t a(\tau) d\tau\right) |\psi(t)\rangle, \quad (4.3)$$

de donde se ve que $|\psi\rangle$ y $|\psi'\rangle$ son estados físicamente equivalentes, únicamente con una fase total de diferencia, dada como

$$\phi' = \phi - \int_0^T a(t) dt / \hbar,$$

donde $\phi' = \arg(\langle \psi'(0) | \psi'(t) \rangle)$ es la fase total de H' y $\phi = \arg(\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle)$ es la fase total de la evolución de H .

La ESDT de H' es

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle = [\hat{H} + \mathcal{I}a(t)] |\psi'(t)\rangle, \quad (4.4)$$

donde al multiplicar por el *bra* se llega a

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^T a(t) dt = \int_0^T \langle \psi'(t) | i \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t) \rangle dt - \frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle \psi'(t) | \hat{H} | \psi'(t) \rangle dt, \quad (4.5)$$

donde, para obtener la forma de ϕ , se elige $a(t)$ tal que $|\psi'(T)\rangle = |\psi'(0)\rangle$, con T un periodo, con lo que la evolución será una curva cerrada en $S(\mathbb{H})$. Con esto, $\phi' = 0$, y, por tanto,

$$\phi = \frac{1}{\hbar} \int_0^T a(t) dt = \int_0^T \langle \psi'(t) | i \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t) \rangle dt - \frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle \psi'(t) | \hat{H} | \psi'(t) \rangle dt,$$

por lo que, substituyendo (4.3) en la integral sobre los elementos de matriz del Hamiltoniano H se tiene

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle \psi'(t) | \hat{H} | \psi'(t) \rangle dt = \frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle dt. \quad (4.6)$$

Por lo tanto, la fase total de \hat{H} puede ser escrita como

$$\phi + \frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle dt = \int_0^T \langle \psi'(t) | i \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t) \rangle dt, \quad (4.7)$$

donde la integral de los elementos de matriz del Hamiltoniano,

$$\phi_D = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle \psi'(t) | \hat{H} | \psi'(t) \rangle dt = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle dt, \quad (4.8)$$

es conocida como la fase dinámica, ya que dependen de la evolución temporal del sistema, mientras que

$$\phi_G = \int_0^T \langle \psi'(t) | i \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t) \rangle dt \quad (4.9)$$

es la fase de Aharonov-Anandan (AA)[3], la cual es la fase geométrica de un sistema en una evolución cíclica.

A la ecuación (4.9) se le conoce como fase geométrica, ya que se puede demostrar que la fase de AA solo depende de la curva cerrada en el espacio proyectivo $\mathcal{P}(\mathbb{H})$. Para mostrar esto se puede tomar un estado¹ $|\varphi\rangle = e^{if(t)} |\psi'\rangle$ tal que

$$\begin{aligned} \int_0^T \langle \varphi(t) | i \frac{\partial}{\partial t} \varphi(t) \rangle dt &= \int_0^T dt \langle \psi'(t) | e^{-if(t)} \left[-f(t)e^{if(t)} + ie^{if(t)} \frac{\partial}{\partial t} \right] |\psi'(t)\rangle \\ &= f(0) - f(T) + \int_0^T dt \langle \psi'(t) | i \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t) \rangle \end{aligned}$$

¹El estado $|\varphi\rangle$ puede ser visto como otra propuesta de transformación tipo $\hat{H}'' = \hat{H} + b(t)\mathcal{I}$.

$$= \int_0^T dt \langle \psi'(t) | i \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t) \rangle, \quad (4.10)$$

donde se usó que $f(0) = f(T)$, al ser $|\varphi(t)\rangle$ una curva cerrada en $S(\mathbb{H})$. La ecuación (4.10) muestra que (4.9) es independiente de la elección de la forma de $a(t)$, siendo, por tanto, la fase de AA una característica geométrica de la curva cerrada formada en el espacio proyectivo.

La obtención de la fase de Aharonov-Anandan resulta ilustrativa, ya que permite ver que la fase total ϕ tendrá dos contribuciones,

$$\phi = \phi_{din} + \phi_{geo}, \quad (4.11)$$

una parte geométrica ϕ_{geo} y otra parte dinámica ϕ_{din} .

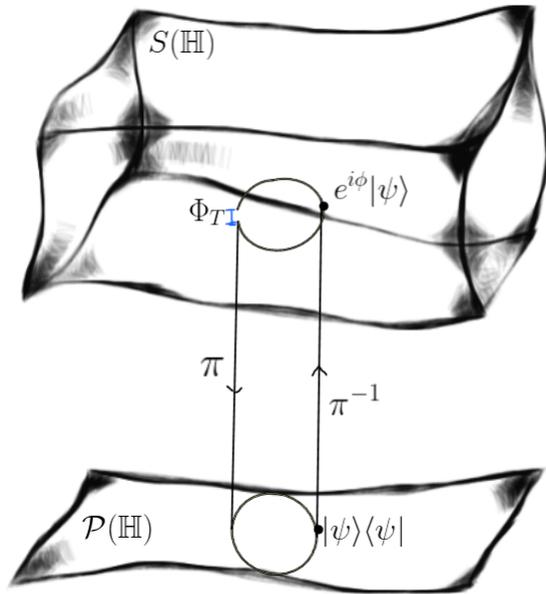


Figura 4.1: Esquema de la fase de estados puros.

total.

Al considerar el formalismo de un haz fibrado se definen varios conceptos como la holonomía de un haz fibrado, que es, a grandes rasgos, el factor de “proporción” en el espacio total entre dos elementos de un haz. La exponencial imaginaria de la fase de AA es una holonomía.

Otro concepto de interés es la conexión en el haz fibrado, para la cual se debe encontrar un espacio horizontal al haz. La conexión se define como la relación entre los elementos del haz y del espacio horizontal. En el caso del espacio de Hilbert donde se tiene el haz $F_\psi = \{e^{i\alpha} |\psi\rangle | \alpha \in \mathbb{R}\}$, el espacio horizontal está formado por los *kets* $|h\rangle$, ortogonales a los elementos de F_ψ , esto es, aquellos que cumplen con $\langle \psi | h \rangle = 0$.

La exponencial imaginaria de la integral cerrada de la conexión A del haz sobre el espacio

Para entender la fase geométrica desde un punto de vista geométrico se debe recurrir al formalismo de un haz fibrado. Como se mencionó anteriormente, cada estado puro $|\psi\rangle \in S(\mathbb{H})$ tendrá un conjunto de estados físicamente equivalentes $\{e^{i\phi} |\psi\rangle\} \in S(\mathbb{H})$, los cuales serán mapeados a un solo punto en el espacio proyectivo, $|\psi\rangle \langle \psi| \in \mathcal{P}(\mathbb{H})$, mediante la operación $\pi : S(\mathbb{H}) \rightarrow \mathcal{P}(\mathbb{H})$. Entonces, considerando el espacio $\mathcal{U}(1)$ con elementos de la forma $e^{i\phi} \in \mathcal{U}(1)$, se puede definir el haz fibrado tipo $\mathcal{U}(1)$ -fibrado sobre el estado $|\psi\rangle$ como π^{-1} , donde $S(\mathbb{H})$ es el espacio total y $\mathcal{P}(\mathbb{H})$ el espacio base del haz [56] (Ver la figura 4.1).

Ahora, si se considera una evolución cerrada \tilde{C} en $\mathcal{P}(\mathbb{H})$, dicha evolución no será necesariamente cerrada en $S(\mathbb{H})$, formando un camino abierto C con un estado inicial $|\psi(0)\rangle$ y un estado final tal que $|\psi(T)\rangle = e^{i\phi_T} |\psi(0)\rangle$, con T un periodo y ϕ_T la fase

base es la holonomía Φ del haz,

$$\Phi = \exp \left(i \oint_{\tilde{C}} A \right), \quad (4.12)$$

que, como se puede notar, es la forma de la fase de AA. Se puede demostrar que la conexión de AA es $A = i \langle \psi'(t) | i \frac{d}{dt} \psi'(t) \rangle$ [56].

Si bien lo mencionado hasta ahora es para estados puros, los estados mixtos tienen fase con parte dinámica y parte geométrica, con la diferencia de que la evolución no será una exponencial del grupo unitario $\mathcal{U}(1)$ sino que será una matriz exponencial del grupo unitario $\mathcal{U}(n)$, con n la dimensión del sistema, donde cada elemento de la matriz será la fase acumulada en cada elemento de la matriz de densidad. También se mantendrá el concepto de haz fibrado, pero ahora será tipo $\mathcal{U}(n)$ -fibrado y, como se verá después, se podrá definir la conexión y la holonomía de dicho haz.

Se han dado algunos conceptos a grandes rasgos del formalismo de un haz fibrado porque es este el que ayuda a entender con mayor claridad el proceso de obtener la fase de un estado mixto, así como la conexión con invariantes topológicos y le da un mayor sentido a la búsqueda de una conexión con la métrica.

La importancia de las fases geométricas radica en su relación con dichos invariantes topológicos: como el número de Chern [7] y el número de Uhlmann [38]. Un cambio en el valor del invariante define una transición de fase topológica (TFT). Las TFTs son de gran importancia en materia condensada para caracterizar teóricamente los materiales conocidos como aislantes topológicos [68]. Dichas transiciones pueden ser vistas como comportamientos singulares en la fase geométrica, como se ve en la fase de Uhlmann de la evolución térmica de un sistema de espín en un campo externo [40; 41], o con la fase de Sjöqvist en el modelo de *Kitaev Chain* [69].

En la presente sección se mostrará el desarrollo de las fases geométricas de un sistema adiabático. Para estados puros se le conoce como fase de Berry, la cual será descrita en la primera parte del capítulo. Para estados mixtos se desarrollará la generalización de la fase de Berry, conocida como la fase de Uhlmann. Por completez, se expondrá también la fase de Sjöqvist, la cual es una mezcla estadística de la fase de Berry de los eigenestados del sistema pesada con la probabilidad de cada eigenestado. La fase de Sjöqvist se describirá en la segunda sección, mientras que la fase de Uhlmann se desarrollará al final del capítulo.

4.1. Fase de Berry

Se considera la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ESDT),

$$\hat{H}(t) |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle, \quad (4.13)$$

donde la evolución del sistema puede ser temporal, o por medio del conjunto de parámetros que dependan del tiempo ($\lambda = \lambda(t)$). Por otro lado, los eigenvalores de H son

$$\hat{H}(\lambda(t)) |n(\lambda(t))\rangle = E_n(\lambda(t)) |n(\lambda(t))\rangle. \quad (4.14)$$

Desarrollando cualquier estado del sistema como combinación lineal de los eigenestados del Hamiltoniano se obtiene

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |n(\lambda(t))\rangle. \quad (4.15)$$

que, al substituir en la ESDT se llega a una ecuación para los coeficientes

$$\dot{C}_m(t) = -\frac{i}{\hbar} E_m(t) C_m(t) - \sum_n C_n(t) \langle m(\lambda) | \frac{\partial}{\partial t} |n(\lambda)\rangle. \quad (4.16)$$

Para simplificar está ecuación se expande el elemento de la suma como

$$\sum_n C_n(t) \langle m(\lambda) | \frac{\partial}{\partial t} |n(\lambda)\rangle = \langle m(\lambda) | \frac{\partial}{\partial t} |m(\lambda)\rangle + \sum_{n \neq m} C_n(t) \frac{\langle m(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} |n(\lambda)\rangle}{E_n - E_m},$$

donde, considerando la aproximación adiabática; pequeñas variaciones en \hat{H} y diferencia de energías finitas, se tiene que al derivar respecto al tiempo en la ecuación (4.14) el segundo elemento de la derecha es cercano a cero, ya que

$$\langle m | \frac{\partial}{\partial t} n \rangle = \frac{\langle m(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} |n(\lambda)\rangle}{E_n - E_m} \approx 0.$$

Con esto,

$$\dot{C}_m(t) \approx -\frac{i}{\hbar} E_m(\lambda) C_m(t) - C_m(t) \langle m(\lambda) | \frac{\partial}{\partial t} |m(\lambda)\rangle, \quad (4.17)$$

que convierte la integral en algo trivial con solución exponencial.

Entonces, si un sistema está inicialmente en el estado $|n(0)\rangle$, después de una evolución cíclica con periodo T , el estado final en la aproximación adiabática estará dado como

$$|n(\lambda_T)\rangle = e^{\phi_G} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt' E_n(\lambda')} |n(0)\rangle \quad (4.18)$$

donde, usando $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \lambda}{\partial t} \cdot \nabla_\lambda$,

$$\phi_G(\lambda) = i \oint_C d\lambda \langle n(\lambda) | \nabla(\lambda) |n(\lambda)\rangle, \quad (4.19)$$

la cual se conoce como fase de Berry, con la integral cerrada sobre el espacio de parámetros. El otro término depende de la evolución temporal del estado, fase dinámica, como se definió anteriormente.

De la ecuación (4.19) se tiene una forma similar al flujo magnético, una integral cerrada de un producto punto de un vector, por lo que se define el potencial de Berry, o conexión de Berry dentro de formalismo de un haz fibrado, como

$$A(\lambda) = i \langle n(\lambda) | \nabla(\lambda) |n(\lambda)\rangle. \quad (4.20)$$

Con esta analogía se llega a una importante interpretación física sobre la fase de Berry como el flujo cuántico de un sistema.

Fase de Berry en el formalismo del haz fibrado.

Retomando el formalismo de haz fibrado, si se tiene una curva C en $S(\mathbb{H})$ con elementos $|\psi(t)\rangle$, entonces cada punto en C tendrá un estado horizontal $|h\rangle$ que cumple con $\langle\psi(t)|h\rangle = 0$. Tomando como espacio horizontal al haz el espacio tangente, se considera el vector tangente a $|\psi(t)\rangle$, tal que

$$\langle\psi(t)|\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = 0, \quad (4.21)$$

la cual se conoce como condición de transporte paralelo en \mathbb{H} .²

Incluso cuando se considera una evolución siguiendo la condición de transporte paralelo, los eigenestados $|n(\vec{R}(t))\rangle$ adquieren una fase independiente a la fase dinámica³. Asumiendo que $|\psi(t)\rangle = e^{i\phi_n(t)}|n(\vec{R}(t))\rangle$, con \vec{R} los parámetros de los que depende el Hamiltoniano y $|n\rangle$ los eigenvectores, se llega a que

$$\frac{d\phi_n}{dt} = i \langle n(\vec{R}(t)) | \frac{d}{dt} | n(\vec{R}(t)) \rangle, \quad (4.22)$$

la cual se puede resolver usando la propiedad $\frac{d}{dt} = \frac{d\vec{R}}{dt} \cdot \nabla_{\vec{R}}$. Al integrar sobre la curva cerrada \tilde{C} en $\mathcal{P}(\mathbb{H})$ se obtiene

$$\phi_n = \arg \langle \psi(0) | \psi(\tau) \rangle = i \oint_C d\vec{R} \langle n(\vec{R}(t)) | \nabla_{\vec{R}} | n(\vec{R}(t)) \rangle, \quad (4.23)$$

que es la fase de Berry, que a su vez es la holonomía del haz.

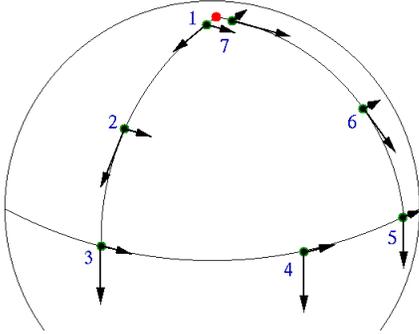


Figura 4.2: Transporte paralelo de estados puros. Imagen obtenida de [70].

De la ecuación (4.23) se concluye que ϕ_n es el ángulo entre el estado inicial y el estado final, el cual dependerá, ya que se debe cumplir con la ecuación (4.21), de la geometría del camino C , como se ve en la figura 4.2. De esto se tiene que ϕ_n es invariante de norma módulo 2π (un giro completo).

Dicha invariancia se da gracias al ciclo en la ecuación (4.23), aunque la conexión de Berry no es invariante de norma.

²Se conoce como transporte paralelo a aquella evolución que describe una curva $\tilde{\gamma}$ que permanece tangente a otra curva γ con la cual está relacionada mediante una conexión.

³De esto se tiene que la condición de transporte paralelo corresponde a imponer una evolución adiabática en el sistema.

4.1.1. Fase de Berry del espín-1/2

Recordando que

$$\hat{H} = \sin \theta \cos \phi \hat{S}_x + \sin \theta \sin \phi \hat{S}_y + \cos \theta \hat{S}_z$$

con $\hat{S}_n = \hbar \sigma_n / 2$, donde σ_n son las matrices de Pauli. Los eigenvalores son $E = \{-B\hbar/2, B\hbar/2\}$ y los eigenvectores

$$\begin{aligned} |-\rangle &= -\sin(\theta/2) |0\rangle - e^{i\phi} \cos(\theta/2) |1\rangle; \\ |+\rangle &= \cos(\theta/2) |0\rangle + e^{i\phi} \sin(\theta/2) |1\rangle. \end{aligned}$$

Las conexiones de Berry para cada estado puro son

$$A^{(+)} = i \langle + | d | + \rangle = i \langle + | \partial_\theta | + \rangle d\theta + i \langle + | \partial_\phi | + \rangle d\phi = -\frac{1}{2}(1 - \cos \theta) d\phi; \quad (4.24)$$

$$A^{(-)} = i \langle - | d | - \rangle = -\frac{1}{2}(1 + \cos \theta) d\phi, \quad (4.25)$$

por lo que la fase de Berry es,

$$\Phi_G^{(\pm)} = - \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} (1 \mp \cos \theta) d\phi = -\pi(1 \mp \cos \theta). \quad (4.26)$$

4.2. Fase de Sjöqvist

Las complicaciones para encontrar la fase geométrica en estados puros se basa únicamente en encontrar la manera de definir la evolución del sistema, para posteriormente solo resolver la ecuación (4.11). Sin embargo, para estados mixtos no es tan sencillo porque la fase acumulada está representada por una matriz $\mathcal{U}(n)$, con n la dimensión del sistema.

Sjöqvist et al. en [5] propusieron una manera de obtener la fase geométrica de estados mixtos como una mezcla estadística de la fase de cada eigenestado, la cual es definida mediante la medición de la interferencia entre los estados puros de un estado mixto. La ventaja de usar esta fase es que puede ser medida experimentalmente [35; 36], sin embargo, han sido pocos los casos donde esta fase ha mostrado alguna TFT.

La interferencia entre dos estados cuánticos $|A\rangle$ y $|B\rangle$ está dada como

$$I_p = |e^{i\phi} |A\rangle + |B\rangle|^2 = 2 + 2|\langle A|B\rangle| \cos[\phi - \langle A|B\rangle], \quad (4.27)$$

y si se considera la evolución de un estado mixto,

$$\hat{\rho}_0 = \sum_n p_n |n\rangle \langle n|; \quad \hat{\rho}(t) = \sum_n p_n |n(t)\rangle \langle n(t)|, \quad (4.28)$$

entonces la interferencia estará dada como

$$I = \sum_n p_n I_n = 2 + 2 \sum_n p_n \nu_n \cos(\phi - \arg \langle n|n(t)\rangle), \quad (4.29)$$

donde se usó que $\sum_n p_n = 1$ y se definió $\nu_n = |\langle n|n(t)\rangle|$.

El término $\arg \langle n|n(t)\rangle = \varphi_n$ se conoce como fase de Pancharatnam.

Ahora, usando la suma de ángulos $\cos(\phi - \varphi_n) = \cos \phi \cos \varphi_n + \sin \phi \sin \varphi_n$, la fórmula de interferencia se puede escribir como

$$I = 2 + 2 \left[\cos \phi \left(\sum_n p_n \nu_n \cos \varphi_n \right) + \sin \phi \left(\sum_n p_n \nu_n \sin \varphi_n \right) \right], \quad (4.30)$$

que permite definir $\sum_n p_n \nu_n e^{i\varphi_n} = \nu e^{i\varphi}$, donde

$$\nu = \left| \sum_n p_n \nu_n e^{i\varphi_n} \right|; \quad \varphi = \arg \left(\sum_n p_n \nu_n e^{i\varphi_n} \right), \quad (4.31)$$

con φ como la fase interferométrica o fase de Sjöqvist. Con esto, la fórmula de interferencia es

$$I = 2 + 2\nu \cos(\phi - \varphi), \quad (4.32)$$

donde se aprovechó que $\Re[\sum_n p_n \nu_n e^{i\varphi_n}] = \sum_n p_n \nu_n \cos \varphi_n = \nu \Re(e^{i\varphi})$ y $\Im[\sum_n p_n \nu_n e^{i\varphi_n}] = \sum_n p_n \nu_n \sin \varphi_n = \nu \Im(e^{i\varphi})$.

Si se toma la fase de Sjöqvist en un ciclo y en la aproximación adiabática, tal que $\langle n|n(\tau)\rangle = e^{i\varphi_n^{(B)}}$, con $\varphi_n^{(B)}$ la fase de Berry del n -ésimo eigenestado, entonces $\nu_n = |\langle n|n(t)\rangle| \approx 1$ y, por tanto, la fase de Sjöqvist es,

$$\varphi_G = \arg \left(\sum_n p_n e^{i\varphi_n^{(G)}} \right). \quad (4.33)$$

4.2.1. Fase de Sjöqvist para el espín-1/2

Conociendo la fase de Berry para ambos eigenestados del sistema de espín-1/2 (ecuación (4.26)) se llega fácilmente, usando la ecuación (4.33), a

$$\begin{aligned} \Phi_S &= \arg \left[\frac{e^{-\beta B \hbar / 2}}{Z} e^{-i\pi(1-\cos\theta)} + \frac{e^{\beta B \hbar / 2}}{Z} e^{-i\pi(1+\cos\theta)} \right] \\ &= \arg \left[-2 \cosh \left(\frac{\beta B \hbar}{2} + i\pi \cos \theta \right) \right], \end{aligned} \quad (4.34)$$

donde se usó que $\arg(x/y) = \arg(x) - \arg(y)$, y como $Z = 2 \cosh(\beta B \hbar / 2) \in \Re$, entonces $\arg(Z) = 0$.

4.3. Fase de Uhlmann

Se ha definido la fase de Berry para estados puros y la fase de Sjöqvist para estados mixtos. El problema con la fase de Sjöqvist es que resulta ser una mezcla estadística de la fase de cada estado puro involucrado, pero puede ser interesante definir otra fase geométrica para estados mixtos que contemple una evolución en el espacio de parámetros

del Hamiltoniano, para así tener una interpretación más directa. A. Uhlmann [6] generalizó la fase de Berry a estados mixtos mediante el proceso de purificación presentado en la métrica de Bures, donde un estado mixto representado por la matriz de densidad $\hat{\rho}$ puede ser expresado como un estado puro de un espacio compuesto de mayor dimensión, y sobre este estado puro se obtiene la fase de Berry. A dicha fase para sistemas mixtos adiabáticos se le conoce como Fase de Uhlmann.

En Capítulo 3 se vio que cualquier matriz de densidad con dimensión $d \times d$ puede ser escrita como

$$\hat{\rho} = ww^\dagger, \quad (4.35)$$

donde $w = \sqrt{\hat{\rho}}\hat{U} = \sum_n \sqrt{p_n} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| U$ es la amplitud de $\hat{\rho}$, con $\hat{U} \in \mathcal{U}(d)$. Con esta representación de $\hat{\rho}$ se puede hacer el proceso de purificación donde se define un espacio compuesto $\mathbb{H} \otimes \mathbb{H}$ con estados puros de la forma

$$|w\rangle = \sum_n \sqrt{p_n} |\psi_n\rangle \otimes \hat{U}^T |\psi_n\rangle, \quad (4.36)$$

que cumplen con $\hat{\rho} = \text{Tr}_2[|w\rangle \langle w|]$.

Definiendo el espacio de matrices de densidad de estados mixtos $\mathcal{Q}(\mathbb{H}) = \{\hat{\rho} | \hat{\rho} = ww^\dagger\}$, donde cada elemento $\hat{\rho}$ tiene un conjunto de estados puros $\{|w(\hat{U})\rangle | \hat{\rho} = \text{Tr}_2[|w(\hat{U})\rangle \langle w(\hat{U})|]\}$ en $\mathbb{H} \otimes \mathbb{H}$ los cuales conforman un haz fibrado tipo $\mathcal{U}(d)$ -fibrado de $\hat{\rho}$.

Para obtener la fase se debe evolucionar $\hat{\rho}$ respecto a los parámetros \vec{R} , pero como cada elemento de $\hat{\rho}(\vec{R}(t))$ puede tener múltiples estados puros $|w\rangle_{\vec{R}}$ con diferentes \hat{U} , se debe imponer una condición tal que deje invariante la fase. Para asegurar una única fase se minimiza sobre \hat{U} de tal manera que se asegura que la evolución será entre las matrices equivalentes más cercanas.

De la métrica de Bures se tiene que la mínima distancia entre dos amplitudes w_1 y w_2 se da cuando se cumple que

$$w_0^\dagger w_1 = w_1^\dagger w_0 = C > 0, \quad (4.37)$$

como se demostró en la ecuación (3.22), la cual se conoce como condición de paralelismo de Uhlmann y es la versión matricial de la condición de transporte paralelo dada en la fase de Berry.

De la condición de transporte paralelo,

$$C^2 = w_0^\dagger w_1 w_1^\dagger w_0 = \hat{U}_0^\dagger \sqrt{\hat{\rho}_0} \hat{\rho}_1 \sqrt{\hat{\rho}_0} \hat{U}_0,$$

que permite obtener

$$C = \hat{U}_0^\dagger \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}_0} \hat{\rho}_1 \sqrt{\hat{\rho}_0}} \hat{U}_0. \quad (4.38)$$

Haciendo los cálculos correspondientes al igualar la ecuación anterior con la condición de transporte paralelo y suponer que $\hat{\rho}$ es una matriz de rango completo, y, por tanto, tiene inversa, se llega a la relación

$$\hat{U}_1 \hat{U}_0^\dagger = \sqrt{\hat{\rho}_1^{-1}} \sqrt{\hat{\rho}_0^{-1}} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}_0} \hat{\rho}_1 \sqrt{\hat{\rho}_0}}. \quad (4.39)$$

Si se considera que tanto $\hat{\rho}_0$ como $\hat{\rho}_1$ pertenecen a una misma evolución, entonces se define $\hat{U}_0 = \hat{V}(\vec{R}(t))$ como la holonomía de Uhlmann, tal que $\hat{U}_1 = V(\vec{R}(t)) + dV(\vec{R}(t))$. Con esto, para $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}$ y $\hat{\rho}_1 = \hat{\rho} + d\hat{\rho}$,

$$\hat{U}_1 \hat{U}_0^\dagger = [\hat{V}(\vec{R}(t)) + d\hat{V}(\vec{R}(t))] \hat{V}(\vec{R}(t)) = \sqrt{(\hat{\rho} + d\hat{\rho})^{-1}} \sqrt{\hat{\rho}^{-1}} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\rho} + d\hat{\rho})} \sqrt{\hat{\rho}}.$$

Como $\hat{V}(\vec{R}(t))$ representa una transformación unitaria cumple con la ecuación diferencial

$$\frac{d\hat{V}(\vec{R}(t))}{dt} = A(\vec{R}(t)) \hat{V}(\vec{R}(t)) \quad (4.40)$$

donde se establece la condición inicial $\mathcal{V}(0) = \mathcal{I}$, con $A(\vec{R})$ el generador infinitesimal de la transformación, conocido como conexión de Uhlmann. Con esto, la ecuación (4.40) tiene una solución general dada por

$$\hat{V}(\vec{R}) = \mathcal{P} e^{\oint_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(\tau)} Ad\vec{R}}, \quad (4.41)$$

donde \mathcal{P} indica una integral ordenada sobre el espacio de parámetros del Hamiltoniano, con τ un periodo. De la ecuación (4.41) se entiende por qué \hat{V} se conoce como holonomía, ya que cumple con ser la relación entre el estado $\hat{\rho}_0$ y $\hat{\rho}_\tau$, con τ el periodo de la evolución. Para obtener una forma explícita de la conexión de Uhlmann se realiza una aproximación a primer orden de V sobre un parámetro auxiliar s . Tomando $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}$ y $\hat{\rho}_1 = \hat{\rho} + sd\hat{\rho}$ y $\hat{U}_1 \hat{U}_0^\dagger$ dado por

$$(\hat{V} + sd\hat{V}) \hat{V}^\dagger = \sqrt{(\hat{\rho} + sd\hat{\rho})^{-1}} \sqrt{\hat{\rho}^{-1}} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\rho} + sd\hat{\rho})} \sqrt{\hat{\rho}}.$$

La expansión de la evolución del sistema a primer orden alrededor de $s = 0$ se expresa como

$$\mathcal{I} + sd\hat{V}\hat{V}^\dagger = \mathcal{I} + \frac{d}{ds} \left[(\sqrt{\hat{\rho}} + sd\sqrt{\hat{\rho}})^{-1} \sqrt{\hat{\rho}^{-1}} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\rho} + sd\hat{\rho})} \sqrt{\hat{\rho}} \right] \Big|_{s=0} s,$$

donde se utilizó que para un valor infinitesimal $\sqrt{\hat{\rho} + d\hat{\rho}} = \sqrt{\hat{\rho}} + d\sqrt{\hat{\rho}}$.

La conexión de Uhlmann, en su forma diferencial, resulta ser

$$A = d\hat{V}\hat{V}^\dagger = \left[\frac{d}{ds} (\sqrt{\hat{\rho}} + sd\sqrt{\hat{\rho}})^{-1} \right] \Big|_{s=0} \sqrt{\hat{\rho}} + \hat{\rho}^{-1} \left[\frac{d}{ds} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\rho} + sd\hat{\rho})} \sqrt{\hat{\rho}} \right] \Big|_{s=0}, \quad (4.42)$$

donde el primer término del lado derecho puede ser simplificado como

$$\begin{aligned} (\sqrt{\hat{\rho}} + sd\sqrt{\hat{\rho}})^{-1} \sqrt{\hat{\rho}} &= (\mathcal{I} + s\sqrt{\hat{\rho}^{-1}} d\sqrt{\hat{\rho}})^{-1} \sqrt{\hat{\rho}^{-1}} \sqrt{\hat{\rho}} \\ &= \mathcal{I} - s\sqrt{\hat{\rho}^{-1}} d\sqrt{\hat{\rho}}, \end{aligned} \quad (4.43)$$

donde se expandió a primer orden en el último paso. Con esto, la derivada es

$$\left[\frac{d}{ds} (\sqrt{\hat{\rho}} + sd\sqrt{\hat{\rho}})^{-1} \right] \Big|_{s=0} \sqrt{\hat{\rho}} = -\sqrt{\hat{\rho}^{-1}} d\sqrt{\hat{\rho}},$$

que, en la eigenbase de $\hat{\rho}$, es

$$-\langle \psi_i | \sqrt{\hat{\rho}^{-1}} d\sqrt{\hat{\rho}} | \psi_j \rangle = -\frac{1}{\sqrt{p_i}} \langle \psi_i | d\sqrt{\hat{\rho}} | \psi_j \rangle. \quad (4.44)$$

Para el segundo elemento se define $K(s) = \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\rho} + sd\hat{\rho})\sqrt{\hat{\rho}}}$, para poder obtener

$$\frac{d}{ds} K^2 = \frac{d}{ds} K(s)K(s) + K(s)\frac{d}{ds} K(s) = \sqrt{\hat{\rho}} d\hat{\rho} \sqrt{\hat{\rho}}, \quad (4.45)$$

que, con $s = 0$ ($K(0) = \hat{\rho}$), se escribe como

$$\left. \frac{d}{ds} K(s) \right|_{s=0} K(s) + K(s) \left. \frac{d}{ds} K(s) \right|_{s=0} = \sqrt{\hat{\rho}} d\hat{\rho} \sqrt{\hat{\rho}}, \quad (4.46)$$

el cual proyectado en la eigenbase de $\hat{\rho}$ tiene la forma

$$\langle \psi_i | \left. \frac{d}{ds} K(s) \right|_{s=0} | \psi_j \rangle = \frac{\sqrt{p_i p_j}}{p_i + p_j} \langle \psi_i | d\hat{\rho} | \psi_j \rangle. \quad (4.47)$$

Entonces, la segunda derivada de la parte derecha de (4.42) es

$$\begin{aligned} \langle \psi_i | \hat{\rho}^{-1} \left. \frac{d}{ds} K(s) \right|_{s=0} | \psi_j \rangle &= \langle \psi_j | \hat{\rho}^{-1} \left[\left. \frac{d}{ds} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\rho} + sd\hat{\rho})\sqrt{\hat{\rho}}} \right] \right|_{s=0} | \psi_j \rangle \\ &= \frac{1}{p_i} \langle \psi_i | \left. \frac{d}{ds} K(s) \right|_{s=0} | \psi_j \rangle = \frac{\sqrt{p_j}}{\sqrt{p_i}(p_i + p_j)} \langle \psi_i | d\hat{\rho} | \psi_j \rangle \\ &= \frac{\sqrt{p_j}(\sqrt{p_i} + \sqrt{p_j})}{\sqrt{p_i}(p_i + p_j)} \langle \psi_i | d\sqrt{\hat{\rho}} | \psi_j \rangle. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Con esto, los elementos de matriz de la conexión de Uhlmann⁴ en la eigenbase son

$$\langle \psi_i | A | \psi_j \rangle = \frac{\sqrt{p_i} - \sqrt{p_j}}{p_i + p_j} \langle \psi_i | d\sqrt{\hat{\rho}} | \psi_j \rangle,$$

que se pueden reescribir mediante el conmutador $[d\sqrt{\hat{\rho}}, \sqrt{\hat{\rho}}]$ como

$$\langle \psi_i | A | \psi_j \rangle = \frac{\langle \psi_i | [d\sqrt{\hat{\rho}}, \sqrt{\hat{\rho}}] | \psi_j \rangle}{p_i + p_j}. \quad (4.49)$$

Para obtener la matriz A se utiliza la relación de completéz de la eigenbase, $\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \mathcal{I}$, tal que la conexión de Uhlmann está dada como

$$A = \sum_{ij} |\psi_i\rangle \frac{\langle \psi_i | [d\sqrt{\hat{\rho}}, \sqrt{\hat{\rho}}] | \psi_j \rangle}{p_i + p_j} \langle \psi_j |, \quad (4.50)$$

⁴En el apéndice 1 se presenta una forma integral de la conexión de Uhlmann que no utiliza la descomposición espectral de $\hat{\rho}$.

la cual puede ser re-expresada si se considera el desarrollo espectral de $\hat{\rho} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$,

$$A = \sum_{nm} \frac{(\sqrt{p_n} - \sqrt{p_m})^2}{p_n + p_m} \langle \psi_n | d\psi_m \rangle |\psi_n\rangle \langle \psi_m|. \quad (4.51)$$

La fase de Uhlmann es la fase entre los estados $|w(\vec{R}(0))\rangle = |w_0\rangle$ y $|w(\vec{R}(\tau))\rangle = |w\rangle$ en el espacio H_w , $\langle w_0 | w \rangle$, que se puede expresar como $\langle w_0 | w \rangle = \text{Tr}(w_0^\dagger w)$, por lo que

$$\begin{aligned} \Phi &= \arg(\langle w_0 | w_1 \rangle) = \arg \left[\text{Tr}(w_0^\dagger w_1) \right] = \arg \left[\text{Tr}(\sqrt{\hat{\rho}_0} \sqrt{\hat{\rho}_0} V) \right] \\ &= \arg [\text{Tr}(\hat{\rho}_0 V)] \end{aligned} \quad (4.52)$$

donde V es la holonomía de Uhlmann

$$\hat{V} = \mathcal{P}e^{\oint A}. \quad (4.53)$$

Sean $\{|\sigma_n\rangle\}$ la base de eigenvectores de un ‘Hamiltoniano’ H_A , se tiene que la evolución temporal está dada por la ESDT,

$$i \frac{d}{dt} |\sigma_n(t)\rangle = H_A |\sigma_n(t)\rangle,$$

la cual se puede representar mediante un propagador U_t como

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} |\sigma_n(t)\rangle &= i \frac{d}{dt} \hat{U}_t |\sigma(0)\rangle = i \frac{d\hat{U}_t}{dt} |\sigma(0)\rangle \\ &= H_A \hat{U}_t |\sigma_n(0)\rangle, \end{aligned}$$

de lo que, multiplicando por el *bra* correspondiente y sumando sobre todos los eigenvectores, se llega a que el propagador \hat{U}_t cumple con que

$$i \frac{d\hat{U}_t}{dt} = H_A \hat{U}_t.$$

De esto, se ve que la ecuación (4.40) tiene una forma semejante a la ecuación del propagador \hat{U}_t para un ‘Hamiltoniano’ $H_A = iA$, por lo que la conexión de Uhlmann cumple con

$$i \frac{d}{dt} |\sigma\rangle = iA |\sigma\rangle, \quad (4.54)$$

para $|\sigma\rangle$ un eigenvector de iA .

4.3.1. Fase de Uhlmann para el espín-1/2

De los eigenvalores se llega a que los factores de Boltzmann del desarrollo espectral de la matriz de densidad son $p_- = \exp(\beta B \hbar / 2) / Z$ y $p_+ = \exp(-\beta B \hbar / 2) / Z$ con la función de partición dada como $Z = \exp(\beta B \hbar / 2) + \exp(-\beta B \hbar / 2) = 2 \cosh(\beta B \hbar / 2)$.

Para calcular la Fase de Uhlmann se tiene que,

$$\frac{(\sqrt{p_n} - \sqrt{p_m})^2}{p_n + p_m} = (\sqrt{p_n} - \sqrt{p_m})^2 = 1 - \text{sech} \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right),$$

ya que $p_n + p_m = 1$, con $n, m = -, +$. Se puede encontrar fácilmente que $\langle n | \partial_\phi m \rangle = -i \sin(\theta)/2$ para $n \neq m$. Con esto, la conexión de Uhlmann es

$$\begin{aligned} A_U &= -i\eta \begin{pmatrix} \sin \theta & -e^{-i\phi} \cos \theta \\ -e^{i\phi} \cos \theta & -\sin \theta \end{pmatrix} \\ &= -i\eta e^{-i(\phi/2)\sigma_z} [\sin \theta \sigma_z - \cos \theta \sigma_x] e^{i(\phi/2)\sigma_z} \end{aligned} \quad (4.55)$$

con $\eta = \sin \theta [1 - \operatorname{sech}(\beta B \hbar/2)]/2$.

Para eliminar la dependencia en ϕ se hace una transformación unitaria sobre el eigenvector de la matriz iA , $|\sigma'\rangle = \hat{U}_T |\sigma\rangle = \exp[i(\phi - \phi_0)\sigma_z/2] |\sigma\rangle$. La conexión de Uhlmann transformada resulta ser

$$A'_U = \hat{U}_T A_U \hat{U}_T^\dagger = -i\eta e^{-i(\phi_0/2)\sigma_z} [\sin \theta \sigma_z - \cos \theta \sigma_x] e^{i(\phi_0/2)\sigma_z}. \quad (4.56)$$

La conexión de Uhlmann cumple con la ecuación (4.54), que con la transformación unitaria se escribe como

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial \phi} (\hat{U}_T^\dagger \hat{U}_T |\sigma\rangle) &= i \frac{\partial}{\partial \phi} (\hat{U}_T^\dagger |\sigma'\rangle) = \hat{U}_T^\dagger \frac{\sigma_z}{2} |\sigma'\rangle + i \hat{U}_T^\dagger \frac{\partial |\sigma'\rangle}{\partial \phi} \\ &= i \hat{U}_T^\dagger \hat{U}_T A'_U \hat{U}_T^\dagger |\sigma\rangle = i \hat{U}_T^\dagger A' |\sigma'\rangle, \end{aligned}$$

por lo que

$$i \frac{\partial |\sigma'\rangle}{\partial \phi} = \left[iA' - \frac{\sigma_z}{2} \right] |\sigma'\rangle. \quad (4.57)$$

La holonomía de Uhlmann, dada por $i\partial\hat{U}/\partial\phi' = (iA_U - \sigma_z/2)\hat{U}'$, se obtiene integrando ϕ de 0 a 2π , que es

$$\begin{aligned} \hat{U}' &= -e^{-i(\phi_0/2)\sigma_z} \exp \left\{ -2i\pi R \frac{(\eta \sin \theta - 1/2)\sigma_z - \eta \cos \theta \sigma_x}{R} \right\} e^{i(\phi_0/2)\sigma_z} \\ &= -\mathcal{I} \cos(2\pi R) + i \sin(2\pi R) e^{-i(\phi_0/2)\sigma_z} \left[(\eta \sin \theta - \frac{1}{2})\sigma_z - \eta \cos \theta \sigma_x \right] e^{i(\phi_0/2)\sigma_z} \end{aligned} \quad (4.58)$$

con $R = \sqrt{\eta^2 - \eta \sin \theta + 1/4}$. Por lo tanto, la fase de Uhlmann es

$$\Phi_U = \arg \left\{ -\cos(2\pi R) \operatorname{Tr}(\rho_0) + i \frac{\sin(2\pi R)}{R} [(\eta \sin \theta - 1/2) \operatorname{Tr}(\rho_0 \sigma_z) - \eta \cos \theta \operatorname{Tr}(\rho_0 \sigma_x)] \right\}$$

donde, como σ_z y σ_x son observables, las trazas representan valores esperados

$$\Phi_U = \arg \left\{ -\cos(2\pi R) + i \frac{\sin(2\pi R)}{R} [(\eta \sin \theta - 1/2) \langle \sigma_z \rangle_0 - \eta \cos \theta \langle \sigma_x \rangle_0] \right\}, \quad (4.59)$$

donde $\langle \dots \rangle_0$ indica el valor esperado respecto a $\rho(\phi = 0)$, los cuales están dados por

$$\langle \sigma_x \rangle_0 = -\sin \theta \tanh \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right) \quad (4.60)$$

$$\langle \sigma_z \rangle_0 = -\cos \theta \tanh \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right). \quad (4.61)$$

Substituyendo los valores esperados en la fase de Uhlmann se llega a

$$\Phi_U = \arg \left\{ -\cos(2\pi R) + i \frac{\sin(2\pi R) \cos \theta}{2R} \tanh \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right) \right\} \quad (4.62)$$

Para $\theta = \pi/2$ se tiene que $\eta = [1 - \operatorname{sech}(\beta B \hbar/2)]/2$, $\langle \sigma_z \rangle = 0$ y $R = \eta - 1/2$, por lo que

$$\Phi_U = \arg \{ -\cos [2\pi(\eta - 1/2)] \} = \arg \{ -\cos [\pi \operatorname{sech}(\beta B \hbar/2)] \} \quad (4.63)$$

donde se tiene que

$$\Phi_U = \begin{cases} \pi & \text{si } \eta > \frac{1}{4} \text{ ó } \beta B \hbar > 2 \ln[2 + \sqrt{3}]; \\ 0 & \text{si } \eta \leq \frac{1}{4} \text{ ó } \beta B \hbar \leq 2 \ln[2 + \sqrt{3}], \end{cases}$$

con $\eta \in [0, 1/2)$. Esto indica que ϕ_U tiene una transición de fase en $\eta = 1/4$ para $\theta = \pi/2$, como se ve en la figura 4.3(b).

Por completez de los resultados que se mostrarán en el siguiente capítulo, se considera el calor específico del sistema, el cual está dado por

$$C_H = k_B \beta^2 B^2 \hbar^2 \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right). \quad (4.64)$$

Con lo que, de (3.37), se tiene que

$$g_{\beta\beta} = \frac{B^2 \hbar^2}{4} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right), \quad (4.65)$$

que permite escribir η como

$$\eta = \sin \theta \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{g_{\beta\beta}}}{B \hbar} \right). \quad (4.66)$$

Substituyendo $\eta(g_{\beta\beta})$ en Φ_U se tiene

$$\Phi_U = \arg \left\{ -\cos(2\pi R) + i \frac{\sin(2\pi R) \cos \theta}{2R} \sqrt{1 - \frac{4g_{\beta\beta}}{B^2 \hbar^2}} \right\} \quad (4.67)$$

donde, para el caso $\theta = \pi/2$, la fase se reduce a

$$\Phi_U = \arg \left\{ -\cos \left[\frac{2\pi}{B \hbar} \sqrt{g_{\beta\beta}} \right] \right\},$$

lo que permite encontrar el valor crítico del elemento de la métrica de Bures $g_{\beta\beta}$ para el cual se da la transacción de fase, el cual es $g_{\beta\beta}^c = B^2 \hbar^2 / 16 = 0.0625 J^2$.

En la figura (4.3)(b) se muestra la fase de Uhlmann respecto a θ y a $g_{\beta\beta}$, donde se ve que solo se tiene una transición de fase en $\theta = \pi/2$ y $g_{\beta\beta}^c$, resultado ya encontrado en [40]. En la figura (4.3)(a) se puede ver el caso de $\theta = \pi/2$, donde la línea azul representa la fase de

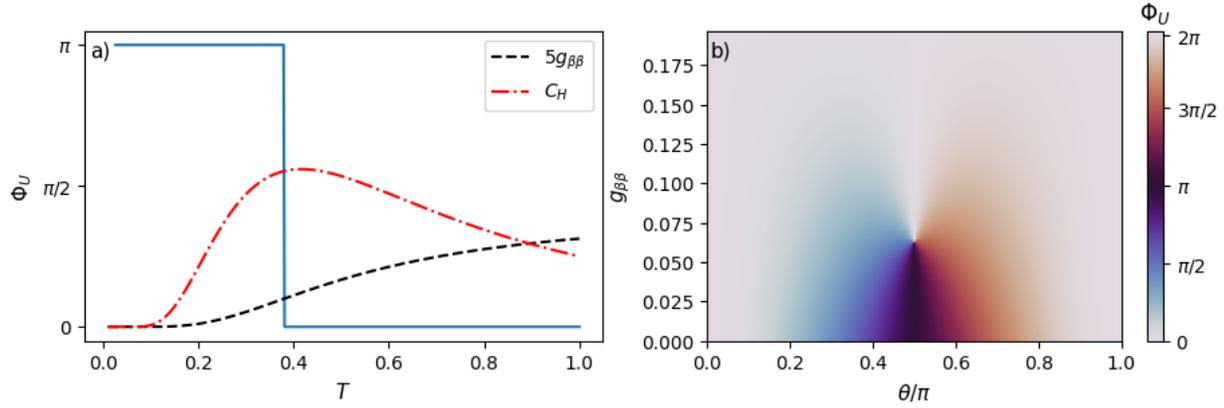


Figura 4.3: (a) Caso de la fase para $\theta = \pi/2$ donde se coloca de referencia con línea negra a trazos al elemento $g_{\beta\beta}$ y al calor específico con línea roja con puntos. (b) Evolución de la fase de Uhlmann respecto θ y el elemento de la métrica de Bures $g_{\beta\beta}$. Se consideró unidades naturales $\hbar = 1$, con un campo magnético $B = 1$.

Uhlmann, y se colocó de referencia el calor específico (línea roja cortada) y la evolución de $g_{\beta\beta}$ (línea negra cortada). En esta segunda imagen se muestran dos cosas, la primera es que $g_{\beta\beta}$ no muestra ningún comportamiento específico en T_c el cual indique la transición en Φ_U .

La segunda, y más interesante, el calor específico muestra un pico característico, llamado anomalía de Schottky[71; 72], el cual se encuentra cerca de la transición. Un análisis más completo sobre este pico y su posible relación con la transición será abordado en los próximos capítulos.

Capítulo 5

Sistemas de Tres Niveles: Espín $s = 1$

Definidos los conceptos necesarios para cumplir con los objetivos de la tesis, se procederá a obtener las métricas y fases geométricas antes mencionadas para el sistema de espín $s = 1$ en un campo magnético \vec{B} , con el propósito de encontrar alguna relación entre las métricas y las fases. Resulta de interés la transición de fase en la fase de Uhlmann para el sistema termalizado, encontrada por Morachis et al. [40] y Hou et al. [41] por separado. La estructura del capítulo consiste en presentar el modelo de espín $s = 1$ en la primera sección. En la segunda sección se presenta la visualización geométrica de los eigenestados y estados térmicos del modelo, usando la proyección propuesta en [59]¹. La siguiente sección consiste en obtener la métrica de Fubini-Study para los tres eigenestados de H , para posteriormente encontrar las fases de Berry, ya conocidas en la literatura, sobre cada eigenestado y con ellas calcular la fase de Sjöqvist. Las últimas dos secciones consisten en calcular la métrica de Bures y replicar, mediante valores esperados, el resultado encontrado en [40; 41] sobre la fase de Uhlmann.

Las gráficas y resultados numéricos obtenidos en el capítulo se hicieron en unidades naturales, $\hbar = 1$ y $k_B = 1$.

5.1. Modelo $\hat{H} = \vec{B} \cdot \vec{S}$

El Hamiltoniano de una partícula de espín $s = 1$ en un campo magnético está dada como $\hat{H} = B\hat{n} \cdot \vec{S}$ donde B es la magnitud de campo², $\hat{n} = (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta)$ es un vector unitario que indica la dirección del campo, y $\vec{S} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ son las matrices de espín³.

¹Explicada en el capítulo 2

²Por simplicidad en la notación $B = \frac{q}{2m}\tilde{B}$, donde q es la carga de la partícula de espín y m su masa, mientras que \tilde{B} es la magnitud del campo externo. Con esto, las unidades de B son $[Hz] = [1/s]$.

³

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \hat{S}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \hat{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Expresando el Hamiltoniano de manera matricial se tiene que

$$\hat{H} = \frac{B\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta & 0 \\ e^{i\phi} \sin \theta & 0 & e^{-i\phi} \sin \theta \\ 0 & e^{i\phi} \sin \theta & -\sqrt{2} \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

donde los eigenvalores son $E = mB\hbar$, con $m = (+1, 0, -1)$, mientras que los respectivos eigenvectores son

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{\cos \theta}{2} \\ \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ e^{2i\phi} \left(\frac{1}{2} - \frac{\cos \theta}{2} \right) \end{pmatrix}; \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{e^{-i\phi}}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \cos \theta \\ \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}} \sin \theta \end{pmatrix}; \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} e^{-2i\phi} \left(\frac{1}{2} - \frac{\cos \theta}{2} \right) \\ -\frac{e^{-i\phi}}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2} + \frac{\cos \theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Entonces, usando los eigenvectores y eigenvalores, la matriz de densidad del sistema a una temperatura T , dada por la ecuación (2.40), son

$$\hat{\rho} = \sum_{m=-1}^1 \frac{e^{-m\beta B\hbar}}{Z} |m\rangle \langle m| \quad (5.4)$$

donde la función de partición Z está dada como

$$Z = \sum_{m=-1}^1 \exp[-m\beta B\hbar] = 1 + 2 \cosh[\beta B\hbar]. \quad (5.5)$$

Las propiedades térmicas del sistema pueden ser obtenidas mediante las ecuaciones (2.41)-(2.42), de las que resulta

$$\langle E \rangle = \frac{-2B\hbar \sinh(\beta B\hbar)}{1 + 2 \cosh(\beta B\hbar)} \quad (5.6)$$

$$C_H = \frac{2\beta^2 B^2 \hbar^2 k_B [\cosh(\beta B\hbar) + 2]}{[2 \cosh(\beta B\hbar) + 1]^2}. \quad (5.7)$$

donde $\langle E \rangle$ es la energía promedio y C_H es el calor específico.

En la figura 5.1(a) se muestra la evolución respecto a la temperatura de ambas propiedades termodinámicas, donde la línea azul continúa es la energía y la línea naranja a trazos es el calor específico. De la figura 5.1(a) se tiene que la evolución del calor específico presenta un máximo, el cual, de la ecuación (5.7), está dado por la ecuación,

$$3 + 5 \cosh(\beta B\hbar) + \cosh(2\beta B\hbar) = \frac{\beta B\hbar}{2} [7 \sinh(\beta B\hbar) + \sinh(2\beta B\hbar)], \quad (5.8)$$

la cual se cumple cuando $\beta B\hbar = 1.88068$. Para el máximo mostrado en la figura 5.1, donde se utilizó unidades naturales ($\hbar = 1$ y $k_B = 1$), se tiene que $T_{max} = 0.53191\ominus$, con \ominus la unidad de temperatura en unidades naturales, o temperatura de Planck. Este tipo de comportamiento, un pico en C_H a bajas temperaturas, se conoce como anomalía de Schottky [71; 72]. Dicho fenómeno se encuentra relacionado con la probabilidad de

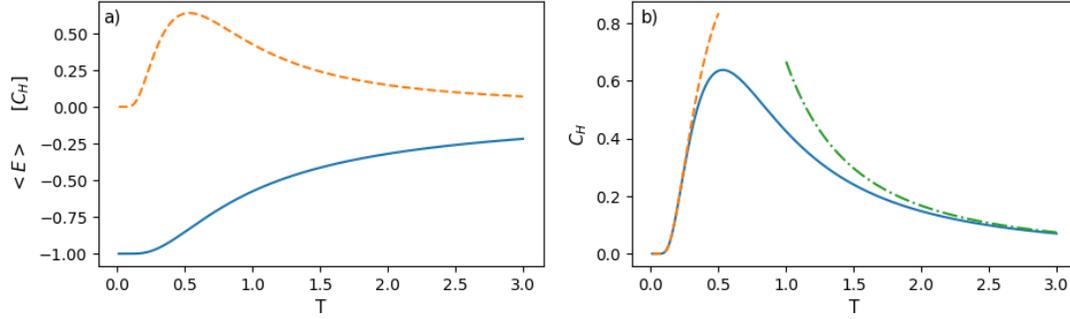


Figura 5.1: (a) Evolución de las diferentes variables termodinámicas consideradas: la energía promedio está representada por la línea azul sólida y el calor específico por la línea naranja a trazos. (b) Calor específico respecto a T , donde la línea azul sólida corresponde a la fórmula analítica, mientras que la línea naranja a trazos corresponde a la aproximación de T pequeñas, y la línea verde punteada es para temperaturas grandes. Se usó $\hbar = 1$, con $B = 1$.

transición al primer estado excitado, ya que, para temperaturas cercanas al cero absoluto, el sistema no tiene la suficiente energía para que se alcance este primer estado. Conforme la temperatura aumenta y el primer estado es accesible, C_H aumenta de manera exponencial hasta que la energía debida a la temperatura sea del orden de la diferencia de energía entre el primer estado y el estado base, donde el calor tiene un máximo para comenzar a decaer a cero como función de $1/T^2$ conforme todos los estados del sistema se vuelven accesibles, para terminar saturándose a temperaturas altas con $C_H \rightarrow 0$.

Como se demostró en el capítulo anterior, la anomalía de Schottky está presente en el espín-1/2 y como se puede ver que en [71] también se encuentra para espín con $s \geq 1$.

Para ver dicho comportamiento, se expresa (5.7) en función de la diferencia de energía del estado base con el primer estado excitado, $\Delta = E_0 - E_- = B\hbar$, como

$$C_H = \frac{4 + e^{\beta\Delta} + e^{-\beta\Delta}}{[1 + e^{\beta\Delta} + e^{-\beta\Delta}]^2} \beta^2 B^2 \hbar^2 k_B, \quad (5.9)$$

donde el comportamiento para altas y bajas temperaturas está dado como:

- Sí $k_B T \ll B\hbar$ se tiene que $B\hbar/k_B T \gg 1$ con lo que $\exp(\Delta/k_B T) \gg 1$. Tomando el límite en la ecuación (5.9) se obtiene

$$C_H(T \rightarrow 0) \approx \frac{2\Delta^2}{k_B T^2} \frac{4 + e^{\beta\Delta}}{e^{2\beta\Delta}} = \left(\frac{\Delta}{T}\right)^2 \frac{1 + 4e^{-\beta\Delta}}{k_B} e^{-\beta\Delta}. \quad (5.10)$$

- Cuando $k_B T \gg B\hbar$ se puede tomar que $\exp(\Delta/k_B T) \approx 1$ ya que $B\hbar/k_B T \ll 1$. Con esto,

$$C_H(T \gg 1) \approx \frac{2}{3k_B} \left(\frac{\Delta}{T}\right)^2. \quad (5.11)$$

Las ecuaciones (5.10) (línea naranja a trazos) y (5.11) (línea verde con puntos) se muestran junto con la ecuación (5.7) (línea azul continua) en la figura 5.1b), donde se ve que ambas

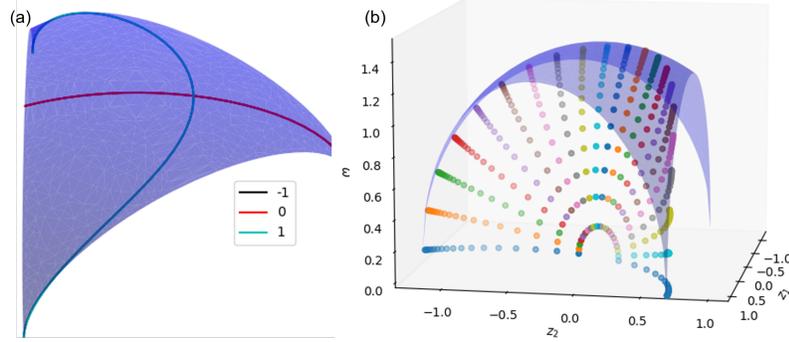


Figura 5.2: (a) Representación geométrica de los tres eigenestados de una partícula de espín 1, donde la línea negra representa al estado $E_{-1} = -B\hbar$, la línea azul a $E_1 = B\hbar$ y la roja a $E_0 = 0$. Las líneas negra y azul se sobreponen. (b) Representación geométrica de los estados térmicos de un sistema de espín 1 en un campo magnético externo, donde cada punto representa una temperatura y cada color un valor de θ .

aproximaciones se ajustan a C_H en los regímenes correspondientes, mientras que cuando Δ es del orden de $k_B T$, donde se da el máximo de C_H , ninguna de las aproximaciones se ajusta. De dichas aproximaciones se puede ver que la anomalía se cumple para temperaturas bajas, donde el crecimiento es exponencial, mientras que para temperaturas altas el decaimiento es de la forma $1/T^2$. Este resultado resultará importante en secciones futuras.

5.2. Visualización geométrica de los eigenvectores y estados térmicos.

Para tener en mente alguna visualización geométrica de los estados del sistema se usa la proyección propuesta en [59], explicada en el capítulo 2, donde se usa que las matrices de densidad pueden ser expresadas en la base de Gell-Mann,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{3} \left(\mathbb{I}_3 + \sum_{j=1}^3 x_j X_j + \sum_{k=1}^3 y_k Y_k + \sum_{l=1}^2 z_l Z_l \right) \quad (5.12)$$

con $x_j = \text{Tr}[\hat{\rho} X_j]$, $y_j = \text{Tr}[\hat{\rho} Y_j]$ y $z_j = \text{Tr}[\hat{\rho} Z_j]$ y X, Y y Z las ocho matrices de Gell-Mann descritas en el segundo capítulo.

Los estados puros del modelo están dados por las matrices de densidad $\hat{\rho}_- = |-\rangle \langle -|$, $\hat{\rho}_0 = |0\rangle \langle 0|$ y $\hat{\rho}_+ = |+\rangle \langle +|$, respectivamente. Dicha visualización se presenta en la figura 5.2(a) respecto a θ . Como ϕ solo afecta a los elementos fuera de la diagonal en ρ_n , la información aportada por ϕ se perderá en la proyección w (ver ecuación (2.59)), ya que la evolución en ϕ es proyectada al mismo punto de la visualización.

Respecto a θ , los estados $\hat{\rho}_+$ y $\hat{\rho}_-$ realizan el mismo camino de puntos mapeados, pero de manera inversa, esto es, el estado $|-\rangle$ empieza en el estado de la base computacional del cútrit $|2\rangle \langle 2|$ y termina en el estado de dicha base $|1\rangle \langle 1|$. Por otro lado, el estado ρ_+ empieza en $|1\rangle \langle 1|$ evoluciona hasta $|2\rangle \langle 2|$. En ambos caso los puntos mapeados están en

la malla de la visualización.

El eigenestado ρ_0 únicamente se cruza con los otros dos en $\theta = \pi/4$ (en dicha intersección θ para los otros dos estados es $\theta = \pi/2$ y $\theta = 3/4$, ya que este empieza en el estado de la base computacional⁴ $|0_b\rangle \langle 0_b|$ alcanzando el estado $|+_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |2\rangle)$ con $\theta = \pi/2$ para regresar a $|0_b\rangle \langle 0_b|$ por el mismo camino⁵.

De la matriz de densidad de los estados térmicos se obtiene la visualización mostrada en la figura 5.2(b), donde se presenta una evolución respecto a θ y T ya que, nuevamente, la variación en ϕ resulta indiferente en el mapeado de cada estado.

Finalmente, en la figura 5.2(b) muestra como el sistema se va termalizando hacia el estado máximamente mezclado ($\hat{\rho} = \mathcal{I}/3$), donde cada punto representa una diferente temperatura, con las temperaturas bajas cercanas a la superficie y conforme la temperatura aumenta, el estado mapeado se acerca a la coordenada del espacio tridimensional $(0, 0, 0)$. Cada color corresponde a un diferente valor de θ entre $[0, \pi]$, los cuales se presentan de izquierda a derecha, donde el que está sobre el centro de la figura corresponde a $\theta = \pi/2$.

5.3. Métrica de Fubini-Study

De la ecuación (5.3) se tiene que los estados puros dependen únicamente de los ángulos del vector de dirección del campo, $|n\rangle = |n(\theta, \phi)\rangle$, por lo que la métrica de F-S estará dada por

$$ds_{FS}^2(n) = g_{\phi\phi}^{(n)} d\phi^2 + g_{\theta\theta}^{(n)} d\theta^2 + 2g_{\theta\phi}^{(n)} d\theta d\phi, \quad (5.13)$$

con cada elemento dado como

$$g_{lk}^{(n)} = \Re [\langle \partial_x \psi | \partial_y \psi \rangle - \langle \partial_x \psi | \psi \rangle \langle \psi | \partial_y \psi \rangle].$$

para $n = +, -, 0$, cada eigenestado del sistema, y $l, k = \theta, \phi$.

Sustituyendo (5.3) en los coeficientes de ds_{FS} se llega a

$$g_{\theta\theta}^{(+)} = g_{\theta\theta}^{(-)} = \frac{1}{2}; \quad g_{\phi\phi}^{(+)} = g_{\phi\phi}^{(-)} = \frac{\sin^2 \theta}{2}; \quad g_{\theta\phi}^{(+)} = g_{\theta\phi}^{(-)} = 0; \quad (5.14)$$

$$g_{\theta\theta}^{(0)} = 1; \quad g_{\phi\phi}^{(0)} = \sin^2 \theta; \quad g_{\theta\phi}^{(0)} = 0, \quad (5.15)$$

donde notamos que todos los elementos del tensor métrico están descritos por funciones bien comportadas. La métrica de los tres estados es igual a la métrica de una esfera con radio $r = 1/\sqrt{2}$ para los estados $+, -$ y $r = 1$ para el estado 0 , lo que indica que los estados puros del sistema describen una esfera tal como se menciona en [59]. En la figura 5.3 se muestra la evolución de la métrica para el estado $|+\rangle$, que resulta ser igual al estado $|-\rangle$ y es proporcional a la métrica del estado $|0\rangle$.

⁴Se utiliza el subíndice b para diferenciar el eigenestado del Hamiltoniano de espín-1 $|0\rangle$ con el *ket* $|0_b\rangle = (0, 1, 0)^T$ de la base computacional.

⁵Al decir camino se debe entender que cada punto en la visualización representa una gran cantidad de estados, no necesariamente el mismo estado.

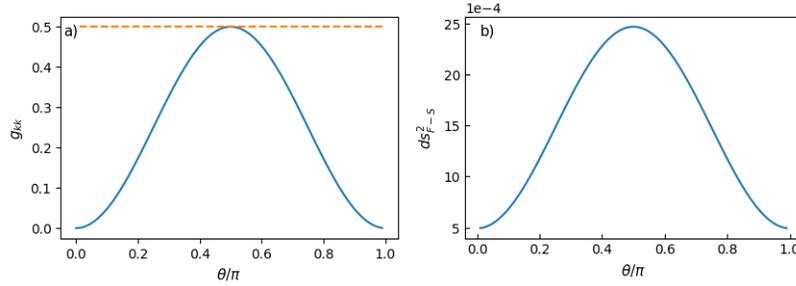


Figura 5.3: (a) Evolución de los elementos de la métrica de Fubini-Study del estado $|+\rangle$, donde la línea azul sólida corresponde a $g_{\phi\phi}$, mientras que la línea naranja a trazos es $g_{\theta,\theta}$. En (b) se presenta el elemento diferencial ds^2_{F-S}

5.4. Obtención de la Fase de Berry y la Fase de Sjöqvist

De la dependencia de los eigenvectores de \hat{H} , se tiene que la fase de Berry (ecuación (4.23)) es respecto a la evolución en ϕ y θ , por lo que la conexión de Berry es

$$\begin{aligned} \vec{A}_B^{(m)} &= (A_\theta^{(m)}, A_\phi^{(m)}) \\ &= (i \langle m | \partial_\theta | m \rangle, i \langle m | \partial_\phi | m \rangle), \end{aligned} \quad (5.16)$$

donde,

$$\partial_\phi |+\rangle = i \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{e^{i\phi} \sin \theta}{\sqrt{2}} \\ e^{2i\phi} (1 - \cos \theta) \end{pmatrix}; \quad \partial_\phi |0\rangle = i \begin{pmatrix} \frac{e^{-i\phi} \sin \theta}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{e^{i\phi} \sin \theta}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}; \quad \partial_\phi |-\rangle = i \begin{pmatrix} e^{-2i\phi} (\cos \theta - 1) \\ \frac{e^{-i\phi} \sin \theta}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix},$$

y,

$$\partial_\theta |+\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{\sin \theta}{2} \\ \frac{e^{i\phi} \cos \theta}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} e^{2i\phi} \sin(\theta) \end{pmatrix}; \quad \partial_\theta |0\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{e^{-i\phi} \cos \theta}{\sqrt{2}} \\ -\sin \theta \\ \frac{e^{i\phi} \cos \theta}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}; \quad \partial_\theta |-\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} e^{-2i\phi} \sin \theta \\ -\frac{e^{-i\phi} \cos \theta}{\sqrt{2}} \\ -\frac{\sin \theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (5.17)$$

de donde se obtiene que $A_\theta^{(m)} = 0$ y $A_\phi^{(m)} = -m(1 - \cos \theta)$, para $m = 1, 0, -1$.

Como solo el potencial de Berry para ϕ es diferente de cero, entonces la fase de Berry estará dada por

$$\Phi_B^{(m)} = \int_0^{2\pi} A_\phi^{(m)} d\phi = -m \int_0^{2\pi} (1 - \cos \theta) d\phi = -2\pi m (1 - \cos \theta), \quad (5.18)$$

donde la fase respecto a θ es $\Phi_\theta^{(m)} = 0$ y $\Phi_\phi^{(m)} = \Phi_B^{(m)}$ (Ver la figura 5.4).

La curvatura de Berry estará dada por

$$\Omega_{\theta\phi}^{(m)} = \partial_\theta A_\phi^{(m)} - \partial_\phi A_\theta^{(m)} = -m \sin \theta, \quad (5.19)$$

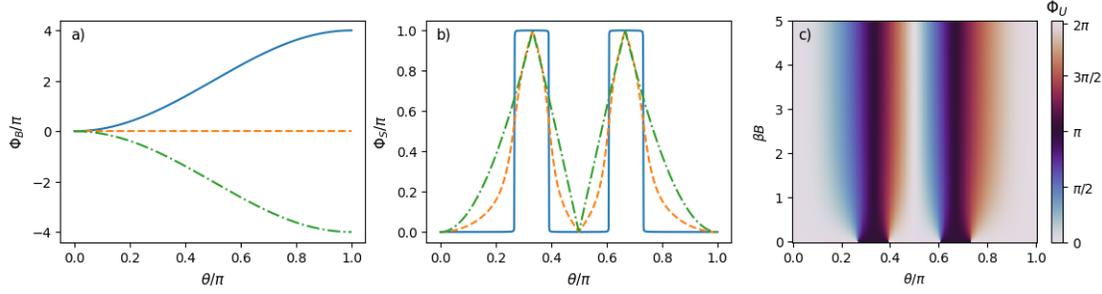


Figura 5.4: (a) Fase de Berry de los diferentes eigenestados del sistema de espín $S = 1$ en un campo magnético, donde la línea azul continua es el estado E_- , la línea verde discontinua es para E_+ y la línea naranja discontinua-punteada es para E_0 . (b) muestra la evolución de la fase de Sjöqvist para diferentes temperaturas (línea azul sólida $\rightarrow \beta B = 0.001$, línea naranja a trazos $\rightarrow \beta B = 0.5$ y línea verde punteada $\rightarrow \beta B = 5$), mientras que en (c) se muestra un mapa de color de esta fase.

De los resultados ya obtenidos se tiene que la Fase de Sjöqvist (ecuación (4.33)) es

$$\begin{aligned}
 \Phi_S &= \arg \left\{ \frac{e^{-\beta B \hbar}}{Z} e^{-i2\pi(1-\cos\theta)} + \frac{e^0}{Z} e^0 + \frac{e^{\beta B \hbar}}{Z} e^{i2\pi(1-\cos\theta)} \right\} \\
 &= \arg \frac{1}{Z} \{1 + 2 \cosh [\beta B \hbar + 2\pi i(1 - \cos \theta)]\} \\
 &= \arg \{1 + 2 \cosh [\beta B \hbar + 2\pi i(1 - \cos \theta)]\}, \tag{5.20}
 \end{aligned}$$

donde se consideró que, como $Z \in \mathfrak{R}$, entonces $\arg(Z) = 0$.

En la figura 5.4(a) se muestra la fase de Berry de los tres eigenestados, mientras que en la figura 5.4(c) se tiene la fase de Sjöqvist respecto a β y θ que muestra dos pilares con centro en $\theta = \pi/3$ y $\theta = 2\pi/3$ respectivamente. En (b) se muestra la evolución para diferentes valores de $B\beta$. Con βB pequeño el comportamiento de la fase comportamiento singular, teniendo una subida abrupta de $\Phi_S = 0$ a $\Phi_S = \pi$ en los intervalos $\theta/\pi \approx [0.2665, 0.3927]$ y $\theta/\pi \approx [0.6072, 0.7335]$, mientras que conforme βB crece el comportamiento cambia. Para βB grandes el comportamiento será similar, subiendo suavemente de $\Phi = 0$ a $\Phi = \pi$ en $\theta = \pi/3$ para posteriormente decaer a cero en $\theta = \pi/2$ y volver a crecer hasta otro máximo en $\theta = 2\pi/3$ y terminar en cero para $\theta = 2\pi$. Como se puede ver en la figura 5.4(b) para algunos valores de βB .

A pesar de dichos comportamientos, la fase de Sjöqvist no describe ningún comportamiento peculiar que se pueda relacionar con alguna transición de fase topológica.

5.5. Cálculo de la Métrica de Bures

De los eigenvalores y los eigenestados del sistema se tiene que ρ es función de los parámetros (β, B, ϕ, θ) , por lo que la métrica estará dada como

$$\begin{aligned}
 ds_B^2 &= g_{\beta\beta}d\beta^2 + g_{\beta B}d\beta dB + g_{\beta\phi}d\beta d\phi + g_{\beta\theta}d\beta d\theta + \\
 &+ g_{BB}dB^2 + g_{B\phi}dB d\phi + g_{B\theta}dB d\theta +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &+ g_{\phi\phi}d\phi^2 + g_{\phi\theta}d\phi d\theta + \\
 &+ g_{\theta\theta}d\theta^2.
 \end{aligned} \tag{5.21}$$

Del formalismo del ensamble canónico y los eigenvalores, $p = p(\beta, B)$, por lo que el diferencial de p_n es

$$dp_i^2 = \left(\frac{\partial p_i}{\partial \beta} \right)^2 d\beta^2 + \left(\frac{\partial p_i}{\partial B} \right)^2 dB^2 + 2 \left(\frac{\partial p_i}{\partial \beta} \right) \left(\frac{\partial p_i}{\partial B} \right) d\beta dB, \tag{5.22}$$

entonces, substituyendo $p_i = \exp(-\beta E_i)/Z$, se llega a que el primer elemento de la ecuación (3.34) es,

$$\frac{1}{4} \sum_i \frac{dp_i^2}{p_i} = \frac{C_v}{4k_B} \left(\frac{d\beta^2}{\beta^2} + \frac{dB^2}{B^2} + \frac{d\beta dB}{\beta B} \right), \tag{5.23}$$

donde C_v es el calor específico (ver ecuación (5.7)).

Por otro lado, los eigenkets del sistema de espín dependen únicamente de los ángulos θ y ϕ , con lo que, el segundo término en la ecuación (3.34) es

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{(p_i - p_j)^2}{p_i + p_j} |\langle m_i | dm_j \rangle|^2 &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{(p_i - p_j)^2}{p_i + p_j} (|\langle m_i | d_\phi m_j \rangle|^2 d\phi^2 + |\langle m_i | d_\theta m_j \rangle|^2 d\theta^2 + \\
 &2\Re [\langle m_i | d_\phi m_j \rangle \langle m_j | d_\theta m_i \rangle] d\theta d\phi)
 \end{aligned} \tag{5.24}$$

donde las respectivas derivadas de los estados se muestran en la ecuación (5.17).

Comparando la ecuación (5.21) con (5.23) y (5.24) se llega a que los respectivos elementos de la métrica de los ángulos son

$$g_{\phi\phi} = \gamma \sin^2 \theta; \tag{5.25}$$

$$g_{\theta\theta} = \gamma \tag{5.26}$$

y

$$g_{\phi\theta} = 0, \tag{5.27}$$

donde

$$\gamma = \frac{2 \sinh^2(B\beta\hbar/2)}{1 + 2 \cosh(B\beta\hbar)} = -\frac{\sinh(\beta B\hbar)}{B\hbar} \langle E \rangle.$$

De esto, el tensor métrico se puede escribir como:

$$g = \begin{pmatrix} C_H/4k_B\beta^2 & C_H/4k_B\beta B & 0 & 0 \\ C_H/4k_B\beta B & C_H/4k_B B^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma \sin^2 \theta \end{pmatrix}, \tag{5.28}$$

donde, tal como se mencionó en el capítulo anterior, el elemento de la métrica $g_{\beta\beta}$ está relacionado con el calor específico del sistema, C_v , dado por la ecuación (5.7).

Sí $T \rightarrow 0$, entonces $\beta \rightarrow \infty$, por lo que

$$\lim_{T \rightarrow 0} \gamma = \frac{1}{2}, \tag{5.29}$$

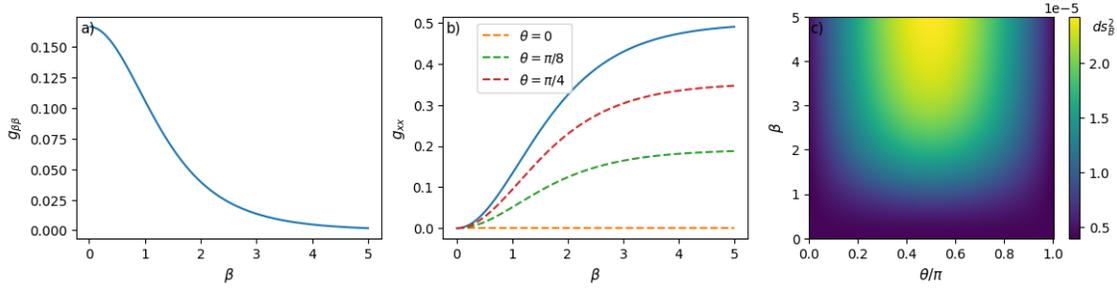


Figura 5.5: Evolución de los elementos de la métrica de Bures. En (a) se presenta la evolución $g_{\beta\beta}$, mientras que en (b) se muestra la evolución de $g_{\theta\theta}$ (línea azul continua) y de $g_{\phi\phi}$, donde se tienen las líneas a trazos: con rojo para $\theta = \pi/4$, con verde el caso para $\theta = \pi/8$ y naranja para $\theta = 0$. En (c) se tiene el elemento diferencial ds_B^2

de donde se ve que la métrica de Bures en este límite se convierte en la métrica de Fubini-Study del estado $|-\rangle$, estado base del sistema.

La semejanza entre los coeficientes $g_{\beta\beta}$, g_{BB} y $g_{\beta B}$ se debe a que las probabilidades son de la forma $p = \exp(-m\beta B\hbar)/Z$, por lo que se muestra únicamente la gráfica de $g_{\beta\beta}$ con $B = 1$, la cual describe un comportamiento decreciente, como se ve en la figura 5.5. En la figura 5.5(b) se ve la evolución de los elementos $g_{\phi\phi}$ y $g_{\theta\theta}$, los cuales son la métrica de una esfera de radio $\sqrt{\gamma(\beta, B)}$. El elemento $g_{\phi\phi}$ al estar pesado por la función $\sin^2 \theta$, por lo que, inicialmente $g_{\phi\phi}(\theta = 0) = 0$ y, conforme θ crece, $g_{\phi\phi}$ es una función creciente que tiende a $\sin^2 \theta/2$, como se ve en las líneas a trazos de la figura. Cuando $\theta = \pi/2$ se tiene que $g_{\phi\phi}(\theta = \pi/2) = g_{\theta\theta}$. Para $\theta > \pi/2$, el valor al que $g_{\phi\phi}$ tiende es menor cumpliéndose que $g_{\phi\phi}(\theta) = g_{\phi\phi}(\pi - \theta)$.

En la figura 5.4 se muestra el elemento diferencial ds_B^2 respecto a β y θ , el cual tiene únicamente valores positivos, con máximos en $\theta = \pi/2$.

5.6. Fase de Uhlmann mediante valores esperados de la base de $SU(3)$

La conexión de Uhlmann está dada por

$$\langle i | A_U | j \rangle = \frac{(\sqrt{p_i} - \sqrt{p_j})^2}{p_i + p_j} \langle i | d | j \rangle, \quad (5.30)$$

donde al sustituir la probabilidad del desarrollo espectral de ρ , $p_n = e^{-\beta E_n} / (\sum_j e^{-\beta E_j})$, se obtiene que el coeficiente de probabilidades de la conexión es

$$\frac{(\sqrt{p_i} - \sqrt{p_j})^2}{p_i + p_j} = 1 - \operatorname{sech} \left[\frac{\beta B \hbar}{2} (m_i - m_j) \right], \quad (5.31)$$

donde se utilizó que los eigenvalores del sistema son $E_i = m_i B \hbar$ con $m_i = -1, 0, +1$.

Por otro lado, usando los eigenkets y sus respectivas derivadas se llega a que, considerando

θ constante,

$$\langle m_i | d_\phi | m_j \rangle | b_i \rangle \langle b_j | = \begin{pmatrix} 2i \sin^2(\theta/2) & ie^{-i\phi} \sin \theta / \sqrt{2} & 0 \\ ie^{i\phi} \sin \theta / \sqrt{2} & 0 & ie^{-i\phi} \sin \theta / \sqrt{2} \\ 0 & ie^{i\phi} \sin \theta / \sqrt{2} & -2i \sin^2(\theta/2) \end{pmatrix} d\phi \quad (5.32)$$

donde $|m_i\rangle$ representan los diferentes eigenkets y $|b_i\rangle$ representa la base computacional $|\hat{b}\rangle = \{(1, 0, 0)^T, (0, 1, 0)^T, (0, 0, 1)^T\}$.

Por lo tanto, la conexión de Uhlmann está dada por

$$\begin{aligned} A &= \sum_{i \neq j} \left\{ 1 - \operatorname{sech} \left[\frac{\beta B \hbar}{2} (m_i - m_j) \right] \right\} \langle m_i | d | m_j \rangle | m_i \rangle \langle m_j | \\ &= -i\eta \begin{pmatrix} \sin \theta & -\frac{e^{-i\phi} \cos \theta}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{e^{i\phi} \cos \theta}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{e^{-i\phi} \cos \theta}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{e^{i\phi} \cos \theta}{\sqrt{2}} & -\sin \theta \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

con $\eta = \sin \theta [1 - \operatorname{sech}(\frac{\beta B \hbar}{2})]$, la cual se puede escribir, usando las matrices de espín-1, como

$$A = -i\eta e^{-i\phi \hat{S}_z / \hbar} \left(\hat{S}_z \sin \theta / \hbar - \cos \theta \hat{S}_x / \hbar \right) e^{i\phi \hat{S}_z / \hbar}. \quad (5.33)$$

De la ecuación (4.54), si se toma la conexión de Uhlmann de manera análoga a un Hamiltoniano $H_A = iA$, tal que

$$i \frac{d}{d\phi} |\psi\rangle = H_A |\psi\rangle, \quad (5.34)$$

donde se puede hacer la transformación lineal $|\psi'\rangle = e^{i(\phi - \phi_0) \hat{S}_z / \hbar} |\psi\rangle$, de tal forma que la ecuación a resolver es

$$i \frac{d}{d\phi} |\psi'(\phi)\rangle = H'_A |\psi'(\phi)\rangle, \quad (5.35)$$

con

$$H'_A = iA' = \left[(\eta \sin \theta - 1) \hat{S}_z / \hbar - \eta \cos \theta e^{-i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} \hat{S}_x / \hbar e^{i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} \right],$$

que es independiente de ϕ . Con esto, la evolución de H_A está dada por la holonomía de Uhlmann \hat{U}' del sistema transformado, con la conexión de Uhlmann A' . La solución general para dicha una ecuación tipo propagador es

$$\begin{aligned} \hat{U}' &= \mathcal{P} e^{\int A'} = \mathcal{P} e^{-i \int \eta (\sin \theta \hat{S}_z / \hbar - e^{-i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} (\hat{S}_x / \hbar) e^{i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} \cos \theta) d\phi} \\ &= e^{-i2\pi [(\eta \sin \theta - 1) \hat{S}_z / \hbar - \eta e^{-i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} \hat{S}_x / \hbar e^{i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar}]} \\ &= e^{-i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} e^{-2\pi i g \hat{R}} e^{i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} \end{aligned} \quad (5.36)$$

donde se define el operador $\hat{R} = \hat{G} / g = \hat{n}' \cdot \vec{S} / g$, con

$$\hat{n}' = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} -\eta \cos \theta \\ 0 \\ \eta \sin \theta - 1 \end{pmatrix}.$$

El operador R cumple con

$$\text{Tr}[\hat{R}] = 0; \quad \det(\hat{R}) = 0; \quad (5.37)$$

$$\hat{R}^\dagger = \hat{R}; \quad (\hat{R}^2)^\dagger = \hat{R}^2, \quad (5.38)$$

mientras que g es tal que $\text{Tr}[\hat{G}^2/g^2] = 2$, esto es,

$$g = \sqrt{1 + \eta^2 - 2\eta \sin \theta} = \sqrt{\cos^2 \theta + \text{sech}^2 \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right) \sin^2 \theta}. \quad (5.39)$$

Partiendo de las características de R se puede utilizar el desarrollo de la exponencial de [73] para el caso $\det(\hat{X}) = 0$, dado como $\exp(i\mu\hat{X}) = \mathcal{I} + i\hat{X} \sin \mu + \hat{X}^2(\cos \mu - 1)$. Con esto \hat{U}' se puede expresar como

$$\hat{U}' = e^{-i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} \left[\mathcal{I} - 2\sin^2(\pi g) \hat{S}^2 - i\sin(2\pi g) \hat{R} \right] e^{i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar}, \quad (5.40)$$

que permite finalmente expresar la fase de Uhlmann como función de los valores esperados⁶ de \hat{R} y \hat{R}^2 , y η ,

$$\begin{aligned} \Phi_U &= \arg \left[\text{Tr} \left(e^{-i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} \hat{\rho}_0 e^{i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} e^{-i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} e^{-2\pi i [(\eta \sin \theta - 1) \hat{S}_z - \eta \cos \theta \hat{S}_x] / \hbar} e^{i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} \right) \right] \\ &= \arg \left[1 - 2\sin^2(\pi g) \langle \hat{R}^2 \rangle - i\sin(2\pi g) \langle \hat{R} \rangle \right], \end{aligned} \quad (5.41)$$

donde $\langle \hat{R} \rangle$ y $\langle \hat{R}^2 \rangle$ quedan a su vez en términos de los valores esperados de los operadores de espín \hat{S}_x y \hat{S}_z , y de los términos cuadrupolares \hat{S}_x^2 , \hat{S}_z^2 y $\{\hat{S}_z, \hat{S}_x\}$, y de η . En la ecuación (5.41) se utilizó que la matriz de densidad del sistema transformado es $\hat{\rho}'_0 = e^{-i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} \hat{\rho}_0 e^{i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar}$.

Los valores esperados $\langle \hat{R} \rangle$ y $\langle \hat{R}^2 \rangle$ están dados por

$$\langle \hat{R} \rangle = (\eta \sin \theta - 1) \frac{\langle \hat{S}_z \rangle}{g \hbar} - \eta \cos \theta \frac{\langle \hat{S}_x \rangle}{g \hbar}; \quad (5.42)$$

$$\langle \hat{R}^2 \rangle = (\eta \sin \theta - 1)^2 \frac{\langle \hat{S}_z^2 \rangle}{g^2 \hbar^2} + \eta^2 \cos^2 \theta \frac{\langle \hat{S}_x^2 \rangle}{g^2 \hbar^2} - (\eta \sin \theta - 1) \eta \cos \theta \frac{\langle \{\hat{S}_z, \hat{S}_x\} \rangle}{g^2 \hbar^2}. \quad (5.43)$$

Ahora, para recuperar el resultado de [40] se substituye en los valores esperados la matriz de densidad $\hat{\rho}_0 = \exp(-i\theta \hat{S}_y / \hbar) \exp(-\beta B \hat{S}_z) \exp(i\theta \hat{S}_y / \hbar) / Z$,

$$\langle \hat{R} \rangle = 2 \cos \theta \sinh(\beta B \hbar) / g Z \quad (5.44)$$

$$\langle \hat{R}^2 \rangle = [\cosh(\beta B \hbar) \lambda_2 / 2 + \lambda_1^2] / g^2 Z \quad (5.45)$$

donde se definió

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \eta - \sin \theta; \\ \lambda_2 &= 3 + \cos 2\theta - 4\eta \sin \theta + 2\eta^2, \end{aligned}$$

⁶Ya que \hat{R} y \hat{R}^2 son operadores hermitianos, $\text{Tr}[\hat{\rho}\hat{R}]$ y $\text{Tr}[\hat{\rho}\hat{R}^2]$ son valores esperados.

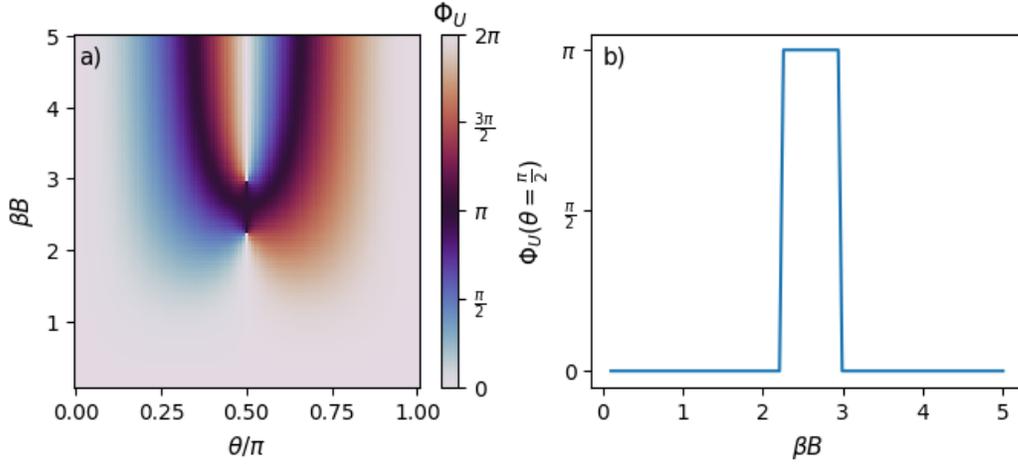


Figura 5.6: Fase de Uhlmann para una partícula de espín $s = 1$ en un campo magnético \vec{B} en contacto con un reservorio térmico a temperatura $\beta = 1/k_B T$. (a) Fase de Uhlmann para diferentes valores de βB y θ . En (b) se presenta el caso $\theta = \pi/2$.

que, sustituyendo en la fase de Uhlmann, se obtiene

$$\Phi_U = \arg \left[Z - \frac{2 \sin^2(\pi g)}{g^2} \left(\cosh(\beta B \hbar) \frac{\lambda_2}{2} + \lambda_1^2 \right) - i \frac{2 \sin(2\pi g)}{g} \cos \theta \sinh(\beta B \hbar) \right], \quad (5.46)$$

donde se consideró que $\arg(Z) = 0$. Esta ecuación, y con ayuda de un poco de álgebra, se puede expresar como

$$\Phi_U = \arg [U_2(z)], \quad (5.47)$$

donde $z = \cosh(\beta B/2) \cos(\pi g) - i \sinh(\beta B/2) \sin(\pi g) \cos(\theta)/g$ y $U_2(x) = 4x^2 - 1$ como el segundo polinomio de Chebyshev de segundo tipo, tal como se describe en [40].

Partiendo de los valores esperados resulta interesante estudiar los límites para altas y bajas temperaturas.

En el límite $T \rightarrow 0$ se tiene que los valores esperados de R están dados por

$$\begin{aligned} \langle \hat{R} \rangle (T \rightarrow 0) &= \cos \theta / g; \\ \langle \hat{R}^2 \rangle (T \rightarrow 0) &= \frac{3 + \cos(2\theta) - 2 \sin^2 \theta}{2g^2}, \end{aligned}$$

donde $\eta_{T \rightarrow 0} = \sin \theta$ y $g_{T \rightarrow 0} = |\cos \theta|$, entonces la fase en este límite se aproxima a

$$\Phi_U(T \rightarrow 0) = \arg \left\{ 1 - \frac{\sin^2(\pi |\cos \theta|)}{\cos^2 \theta} [3 + \cos(2\theta) - 2 \sin^2 \theta] - i \frac{\sin(2\pi |\cos \theta|)}{|\cos \theta|} \cos \theta \right\} \quad (5.48)$$

la cual se aproxima a la fase de Berry (ver ecuación (5.18)) como se ve en la figura 5.7.

Por otro lado, si $T \rightarrow \infty$ entonces $\eta_{T \rightarrow \infty} = 0$ y $g_{T \rightarrow \infty} = 1$. De la ecuación (5.46) se ve

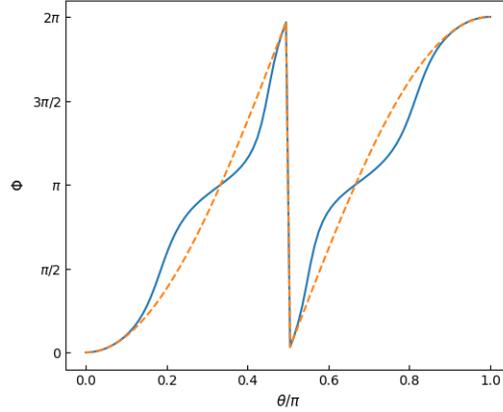


Figura 5.7: Fase de Uhlmann para bajas temperaturas (línea azul continua) comparada con la fase de Berry del estado base $|-\rangle$ (línea naranja a trozos).

que $\sin(\pi) = \sin(2\pi) = 0$, por lo que se obtiene fácilmente que la fase de Uhlmann para cualquiera θ se desvanece,

$$\Phi_U(T \rightarrow \infty) = \arg(1) = 0. \quad (5.49)$$

De la figura 5.6 se puede ver un caso especial en $\theta = \pi/2$, donde la fase presenta un cambio abrupto de 0 a π para una temperatura crítica $T_c^{(\uparrow)}$, mientras que para una segunda temperatura crítica $T_c^{(\downarrow)}$, la fase cambia de π a 0 abruptamente. Para $\theta = \pi/2$ la fase de Uhlmann se reduce a

$$\Phi_U(\theta = \pi/2) = \arg \left[\cosh(\beta B \hbar) + \frac{2 - 4 \sin \left[\pi \operatorname{sech} \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right) \right]^2}{\operatorname{sech}^2 \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right)} \right], \quad (5.50)$$

donde $g = |\operatorname{sech}(\beta B \hbar/2)| = \operatorname{sech}(\beta B \hbar/2)$. Como la expresión dentro de los corchetes es una suma de funciones reales, dicha expresión es real, por lo que, por propiedades de la función $\arg(x)$, la fase es $\Phi_U = \pi$ cuando la expresión dentro de los corchetes es menor a cero, en caso contrario $\Phi_U = 0$. Entonces, el caso donde el sistema tiene fase es cuando

$$\cosh(\beta B \hbar) + \frac{2 - 4 \sin \left[\pi \operatorname{sech} \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right) \right]^2}{\operatorname{sech}^2 \left(\frac{\beta B \hbar}{2} \right)} < 0, \quad (5.51)$$

que, considerando que $\eta(\theta = \pi/2) = 1 - \operatorname{sech}(\beta B \hbar/2)$, se llega a

$$\cos^2[\pi(\eta - 1)] - \frac{(\eta - 1)^2}{4} < 0. \quad (5.52)$$

Ambas condiciones son ecuaciones trascendentales, por lo que, evaluando numéricamente, se llega a que $\Phi_U = \pi$ en el intervalo $\eta \in (0.403617, 0.569119)$, o $\beta B \hbar \in (2.21240, 2.96998)$. Con esto se determina que las temperaturas críticas con $k_B = 1$, $\hbar = 1$ y $B = 1$ son $T_c^{(\uparrow)} \approx 0.3367\ominus$ y $T_c^{(\downarrow)} \approx 0.45199\ominus$, donde \ominus denota la unidad de temperatura en unidades naturales, temperatura de Planck.

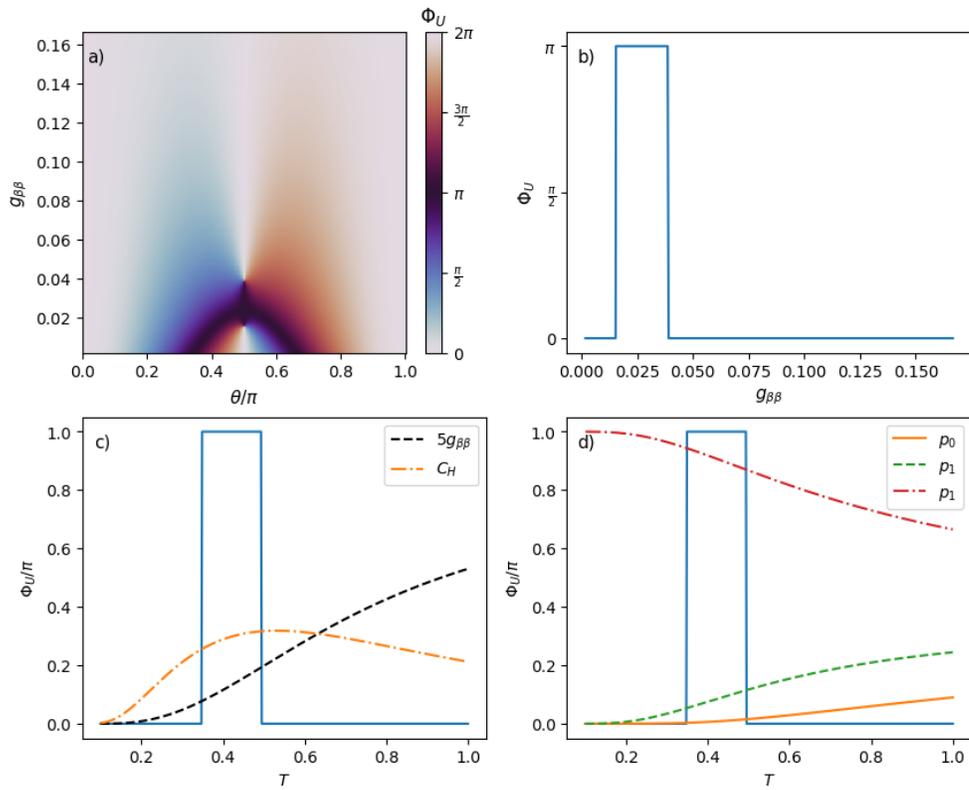


Figura 5.8: (a) Evolución de la fase de Uhlmann respecto al elemento $g_{\beta\beta}$. (b) Fase de Uhlmann con $\theta = \pi/2$ respecto a $g_{\beta\beta}$. En (c) se grafica la fase de Uhlmann respecto a T y se coloca de referencia una línea negra como el elemento $g_{\beta\beta}(T)$ y al calor específico $C_H(T)$. En (d) se presenta también la evolución de las probabilidades, con una línea roja punteada el estado base, la línea verde a trozos el primer estado excitado y la línea naranja sólida el segundo.

Entonces, buscando alguna relación entre la métrica de Bures (ecuación (5.28)) y la fase de Uhlmann (ecuación (5.46)), dos elementos matemáticos que se utilizan para el estudio del espacio de matrices de densidad del sistema, se considera que

$$g_{\beta\beta} = \frac{C_H}{4k_B\beta^2} = \frac{B^2\hbar^2[2 + \cosh(\beta B\hbar)]}{2[1 + 2 \cosh(\beta B\hbar)]^2},$$

lo que permite expresar Φ_U en términos de $g_{\beta\beta}$ como,

$$\eta = \sin \theta \left\{ 1 - \left[\frac{32g_{\beta\beta}}{16g_{\beta\beta} + B^2\hbar^2 + \sqrt{B^4\hbar^4 + 64g_{\beta\beta}}} \right]^{1/2} \right\}. \quad (5.53)$$

De la ecuación (5.46) se puede ver que la fase de Uhlmann puede ser expresada como función de η y θ , únicamente reescribiendo $\cosh(\beta B\hbar)$ y Z en función de estas variables

$$\begin{aligned} \cosh(\beta B\hbar) &= \frac{2 \sin^2 \theta}{(\eta - \sin \theta)^2} - 1 \\ Z &= \frac{4 \sin^2 \theta}{(\eta - \sin \theta)^2} - 1, \end{aligned}$$

con lo que $\Phi_U = \Phi_U(\theta, g_{\beta\beta})$. En la figura 5.8(a), se muestra la evolución de la fase respecto a θ y $g_{\beta\beta}$. En la figura 5.8(b) se graficó el caso $\theta = \pi/2$, donde se presenta la transición de fase en el intervalo aproximado $g_{\beta\beta} \in (0.01394, 0.03154)$.

Si bien se pudo relacionar matemáticamente la fase de Uhlmann con la métrica de Bures, no se encontró que el elemento $g_{\beta\beta}$, ni ningún otro elemento de la métrica de Bures (ver sección 5.) que muestre un comportamiento característico que indique la transición de fase que se tiene en la fase de Uhlmann. Esto se puede ver claramente en la figura 5.8(c) donde se muestra una comparación entre la evolución de $g_{\beta\beta}$ y la fase de Uhlmann para $\theta = \pi/2$. Aunque la métrica y la fase no parecen tener una relación directa, la ventaja de la expresión obtenida $\Phi_U(g_{\beta\beta})$ es que, como $g_{\beta\beta}(C_H)$, entonces se tiene que $\Phi_U(C_H, \beta)$, con C_H el calor específico. En la figura 5.8(c) se muestra la fase de Uhlmann para $\theta = \pi/2$, junto con el elemento $g_{\beta\beta}$ (línea negra a trozos), que no muestra ningún comportamiento particular que señale la transición en Φ_U . También se colocó como referencia él C_H (línea naranja punteada), el cual tiene un máximo en $T_{max} = 0.53172257\ominus$ explicado por la anomalía de Schottky, como se demostró al principio del capítulo. De la figura se puede pensar en una posible relación entre C_H y la transición de fase, aunque las temperaturas críticas respectivas no son iguales. Esta idea es apoyada por el resultado presentado para el espín-1/2 al final del capítulo 4 donde también se presenta que el máximo del C_H está cercano a la temperatura de transición. La misma relación cualitativa se presenta en el sistema compuesto de dos espines $s = 1/2$ con un campo magnético aplicado a uno de los espines, como mostró Villavicencio et al. en [39].

Considerando que la anomalía de Schottky está relacionada con la aparición del primer estado excitado, en la figura 5.8(d) se presentan las probabilidades de cada eigenestado del sistema, donde la probabilidad del estado base $p_0 = e^{\beta B\hbar}/Z$ es la línea roja punteada, el primer estado excitado es $p_1 = 1/Z$ dado por la línea verde discontinúa y el segundo

estado $p_2 = e^{-\beta B}/Z$ la línea naranja sólida. De esto, se puede ver como las probabilidades de los estados excitados dejan de ser despreciables cerca de los valores de la transición. El problema con el análisis entre C_H y Φ_U es que como T_{max} no es igual a las temperaturas de las transiciones, las relaciones entre las cantidades mencionadas son únicamente cualitativas, tal como en los casos de espín-1/2 y el caso presentado en [39].

Capítulo 6

Sistema modificado por un elemento

$$\hat{S}_z^2$$

Del capítulo anterior y de [40; 41] se tiene que los sistemas de espín contienen una transición topológica a ciertas temperaturas críticas cuando $\theta = \pi/2$. Con la intención de estudiar la fase geométrica en un sistema de espín-1 más general se considerarán estados con contribución cuadrupolar. Para ello se propone un Hamiltoniano de espín-1 en un campo magnético anisótropo con preferencia en el plano (*easy-plane anisotropy field*) [55]. Con este sistema propuesto se pretende romper la simetría $SU(2)$ que tiene el Hamiltoniano $\hat{H} = \vec{B} \cdot \vec{S}$. Aunque los estados multipolares están presentes en los sistemas de $s \geq 1$, se ha considerado $s = 1$, donde solo se tienen estados cuadrupolares, por sencillez.

Se trabajará en este capítulo con el Hamiltoniano propuesto al cual se le calculará la fase de Uhlmann para ver si la transición de fase se mantiene y, por comparación, se calcularán las fases de Berry y de Sjöqvist. También se le calcularán las métricas de Bures y de Fubini-Study para ver si en este nuevo sistema se encuentra una relación cuantitativa con las fases geométricas, como se encontró en la fase de Uhlmann.

El capítulo se encuentra dividido en dos partes, en la primera parte se estudiará el caso donde el ángulo polar del campo es $\theta = \pi/2$, donde se obtuvieron expresiones analíticas, mientras que en la segunda se retomará el caso general con resultados numéricos.

Al igual que en el capítulo anterior, las gráficas están en unidades naturales, esto es, $\hbar = 1$ y $k_B = 1$.

6.1. Modelo: Hamiltoniano Cuadrupolar

Como se mencionó en capítulos anteriores, los operadores que actúan sobre un sistema de tres niveles pueden ser desarrollados por una base de ocho matrices, por ejemplo, las matrices de Gell-Mann como se describió en la visualización geométrica. Por otro lado, la base con un significado físico más claro, y la que se utiliza en el desarrollo del Hamiltoniano de un sistema, es la base de matrices de espín-1 ($\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$).

Dado que las matrices de espín-1 son solo tres, las otras cinco se pueden definir mediante

los tensores de rotación irreducibles $\hat{T}_q^{(k)}$ [55; 74], los cuales cumplen con

$$\left[\hat{S}_z, \hat{T}_q^{(k)} \right] = q \hat{T}_q^{(k)} \quad (6.1)$$

$$\left[\hat{S}_\pm, \hat{T}_q^{(k)} \right] = \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} \hat{T}_{q \pm 1}^{(k)} \quad (6.2)$$

donde $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$.

Con esto se llega a que el vector de espín es

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{pmatrix},$$

mientras que los elementos complementarios de la base, dados por las ecuaciones (6.1) y (6.2) (con $k = 2$)¹, forman el vector cuadrupolar

$$\vec{Q} = \begin{pmatrix} \hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} (2\hat{S}_z^2 - \hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \\ \{\hat{S}_x, \hat{S}_y\} \\ \{\hat{S}_y, \hat{S}_z\} \\ \{\hat{S}_z, \hat{S}_x\} \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

con $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$, el anticonmutador.

Los elementos cuadrupolares de la base de espín han sido ampliamente usados para describir diferentes aspectos de un sistema de espín [75–79]. En general, un sistema de espín está descrito por un Hamiltoniano

$$\hat{H}_S = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + H_2 + \dots \quad (6.4)$$

donde H_1 es la interacción del espín con un campo magnético externo (Ver Cap. 5), \hat{H}_1 es la interacción hiperfina, que describe como el campo magnético creado por el movimiento o por partículas externas afectan el sistema, y \hat{H}_2 describe la interacción espín-espín, o como se demostrará en un momento, un segundo orden de la interacción espín-orbita, el cual se vuelve relevante en sistemas de espín $s \geq 1$. Los puntos suspensivos hacen referencia a la existencia de más fenómenos que pueden afectar a un sistema de espín, dependiendo de lo que el autor considere.

En el presente trabajo se considera \hat{H}_1 como despreciable, pero \hat{H}_2 , el cual está dado por elementos cuadrupolares, será tomado en cuenta.

Para obtener un Hamiltoniano efectivo en el cual los momentos cuadrupolares estén presentes, se considera un elemento de perturbación dado por el acoplamiento espín-órbita y el efecto Zeeman

$$V = \lambda \vec{L} \cdot \vec{S} + \vec{B} \cdot (\vec{S} + \vec{L}) \quad (6.5)$$

donde λ es la constante de acoplamiento espín-orbita, \vec{L} y \vec{S} son los vectores de momento angular y espín, respectivamente, mientras que $\vec{B} = B\hat{n}$ es el vector del campo, con $B = q\tilde{B}/2m$, donde q es la carga de la partícula, m su masa y \tilde{B} la magnitud del campo².

¹Con $k = 1$ se obtienen los operadores \hat{S}_+ y \hat{S}_- .

²Se trata a B como la magnitud del campo solo por simplificar notación, ya que q y m se consideran constantes.

Con esto, la primera corrección³ de la energía está dada por

$$\hat{H}_1 = B\hat{n} \cdot \vec{S} \quad (6.6)$$

que es el caso ya tratado. La corrección a segundo orden está dada por

$$\vec{H}_2 = D\hat{S}_z^2 + \frac{E}{2}(\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2) \quad (6.7)$$

donde D y E son llamados anisotropías longitudinal y transversal, respectivamente. Con esto, el Hamiltoniano efectivo es

$$H = B\hat{n} \cdot \vec{S} + DJ\hat{S}_z^2 + \frac{E}{2}(\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2). \quad (6.8)$$

Con esto, en el presente trabajo se propone estudiar las fases y métricas de un sistema de espín longitudinalmente anisótropo, i.e.

$$H = B\hat{n} \cdot \vec{S} + \alpha \frac{B}{\hbar} \hat{S}_z^2, \quad (6.9)$$

donde α podría ser considerado como un valor de comparación entre el término del campo externo $\hat{n} \cdot \vec{S}$ y \hat{S}_z^2 .

A pesar de que el objetivo del término cuadrupolar es el romper la simetría $SU(2)$ del Hamiltoniano para el campo externo, es importante aclarar que, considerando un sistema físico real, el valor de α (D) depende del sistema físico elegido y puede tomar valores [79–81] que hacen al término cuadrupolar comparable a \hat{H}_1 o incluso el dominante. Si $D < 0$ entonces es fácil encontrar el espín en la dirección Z (*easy axis*) y poco probable encontrarlo en el plano $x = y$, pero sí $D > 0$ entonces es más probable encontrar al espín en el plano $x - y$ (*hard axis*).

La ventaja de usar el elemento cuadrupolar \hat{S}_z^2 es el poder expresar la ecuación de Schrödinger de la siguiente forma

$$\hat{H} |n_{z2}\rangle = e^{-i\phi\hat{S}_z/\hbar} \hat{H}_0 e^{i\phi\hat{S}_z/\hbar} |n_{z2}\rangle = E_n^{(z^2)} |n_{z2}\rangle, \quad (6.10)$$

con $\hat{H}_0 = B(\sin\theta\hat{S}_x + \cos\theta\hat{S}_z + \alpha\hat{S}_z^2/\hbar)$, tal que se puede proponer la transformación unitaria $\hat{U} = \exp(i\phi\hat{S}_z)$ con la que se define $|n_{z2}\rangle = \exp(-i\phi\hat{S}_z/\hbar) |\psi_n\rangle$, donde $|\psi_n\rangle$ cumple con

$$\hat{H}_0 |\psi_n\rangle = E_n^{(z^2)} |\psi_n\rangle,$$

por lo que los eigenvectores de \hat{H}_0 cumplen con la ecuación vectorial

$$(\hat{H}_0 - E_n^{z^2}) |\psi_n\rangle = \sin\theta\hat{S}_x + \cos\theta\hat{S}_z + \frac{\alpha}{\hbar}\hat{S}_z^2 - \frac{E_n^{(z^2)}}{B}\mathcal{I} = (0, 0, 0)^T,$$

mientras que los eigenvalores, que son los mismos tanto para \hat{H}_0 como para \hat{H} , y están sujetos a la ecuación de tercer grado

$$y_n^3 - 2\alpha y_n^2 + (\alpha^2 - 1)y_n + \alpha \sin^2\theta = 0,$$

³El desarrollo se puede encontrar en [75; 76].

donde se definió $y_n = E_n^{(z^2)}/B\hbar$. De esta ecuación de y se llega a que la dependencia de los eigenvalores de \hat{H} es de la forma,

$$E_n^{(z^2)}(B, \alpha, \theta) = B\hbar y_n(\alpha, \theta), \quad (6.11)$$

mientras que la dependencia de los eigenvectores, sustituyendo la forma de $E_n^{(z^2)}$, es,

$$|n_{z^2}\rangle = |n_{z^2}(\alpha, \phi, \theta)\rangle = \exp(-i\phi\hat{S}_z/\hbar) |\psi_n(\alpha, \theta)\rangle. \quad (6.12)$$

6.2. Caso con $\theta = \frac{\pi}{2}$

Cuando $\theta = \pi/2$, el Hamiltoniano \hat{H}_0 se simplifica a

$$\hat{H}_0 = B \left[\hat{S}_x + \frac{\alpha}{\hbar^2} \hat{S}_z^2 \right], \quad (6.13)$$

que permite expresar la ecuación de eigenvalores como

$$y_n^3 - 2\alpha y_n^2 + (\alpha^2 - 1)y_n + \alpha = (-y_n + \alpha) [-y_n^2 + \alpha y_n + 1] = 0,$$

con soluciones $y_n = \{\alpha, (\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 4})/2\}$. Por lo tanto, los eigenvalores de $\hat{H}(\theta = \pi/2)$ son

$$E_-^{z^2} \left(\theta = \frac{\pi}{2} \right) = \frac{\alpha - \sqrt{4 + \alpha^2}}{2} B\hbar; \quad (6.14)$$

$$E_0^{z^2} \left(\theta = \frac{\pi}{2} \right) = \alpha B\hbar; \quad (6.15)$$

$$E_+^{z^2} \left(\theta = \frac{\pi}{2} \right) = \frac{\alpha + \sqrt{4 + \alpha^2}}{2} B\hbar. \quad (6.16)$$

Los eigenvectores están dados por

$$|+\frac{\pi}{2}\rangle = c_+^{(\pi/2)} e^{-i\phi\hat{S}_z/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{\alpha - \sqrt{4 + \alpha^2}}{\sqrt{2}} \\ 1 \end{pmatrix} = c_+^{(\pi/2)} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ -\frac{\alpha - \sqrt{4 + \alpha^2}}{\sqrt{2}} \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}; \quad (6.17)$$

$$|0\frac{\pi}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\phi\hat{S}_z/\hbar} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{-i\phi} \\ 0 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}; \quad (6.18)$$

$$|-\frac{\pi}{2}\rangle = c_-^{(\pi/2)} e^{-i\phi\hat{S}_z/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{\alpha + \sqrt{4 + \alpha^2}}{\sqrt{2}} \\ 1 \end{pmatrix} = c_-^{(\pi/2)} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ -\frac{\alpha + \sqrt{4 + \alpha^2}}{\sqrt{2}} \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad (6.19)$$

con $c_{\pm}^{(\pi/2)} = 1/\sqrt{4 + \alpha^2 \mp \alpha\sqrt{4 + \alpha^2}}$.

Ahora, si se considera que el sistema está en contacto con un reservorio a temperatura T , se llega a que el sistema térmico estará representado por la matriz de densidad

$$\hat{\rho}_{\pi/2} = \frac{1}{Z} \left[\exp \left(\frac{\alpha - \sqrt{4 + \alpha^2}}{2} B\hbar \right) |+\frac{\pi}{2}\rangle \langle +\frac{\pi}{2}| + \exp(\alpha B\hbar) |0\frac{\pi}{2}\rangle \langle 0\frac{\pi}{2}| + \right.$$

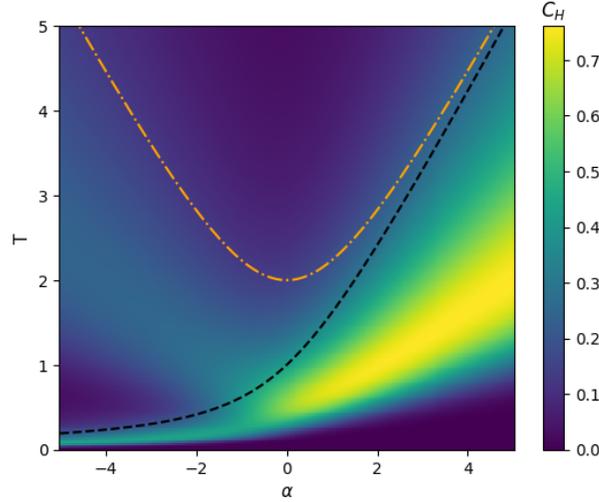


Figura 6.1: Mapa de colores del calor específico donde se coloca de referencia el comportamiento de las diferencias de energía, con color negro discontinuo Δ_1 y de naranja punteado Δ_2 .

$$\exp\left(\frac{\alpha + \sqrt{4 + \alpha^2}}{2} B\hbar\right) \left| -\frac{\pi}{2} \right\rangle \left\langle -\frac{\pi}{2} \right|, \quad (6.20)$$

con la función de partición dada por

$$Z = e^{-\alpha\beta B\hbar} + 2e^{-\alpha\beta B\hbar/2} \cosh \omega,$$

donde se definió $\omega = \frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar$.

Con esto, y usando los resultados del ensamble canónico, se pueden obtener las siguientes variables termodinámicas

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \\ &= \frac{B\hbar}{Z} \left\{ \alpha e^{-\alpha\beta B\hbar} + e^{-\alpha\beta B\hbar/2} \left[\alpha \cosh \omega - \sqrt{\alpha^2 + 4} \sinh \omega \right] \right\}; \end{aligned} \quad (6.21)$$

$$\begin{aligned} C_H &= k_B \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \langle E \rangle = \frac{k_B \beta^2 B^2 \hbar^2}{Z^2} e^{-\alpha\beta B\hbar} \times \\ &\times \left\{ \alpha^2 + 4 + e^{-\alpha\beta B\hbar/2} \left[(\alpha^2 + 2) \cosh \omega + \alpha \sqrt{\alpha^2 + 4} \sinh \omega \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6.22)$$

El calor específico, ecuación (6.22), puede ser escrito en función de las diferencias de energía entre el estado base y el primer estado excitado $\Delta_1 = E_0 - E_- = (\alpha/2 + \sqrt{\alpha^2 + 4}/2)B\hbar$ y el estado base con el segundo estado excitado $\Delta_2 = E_+ - E_- = \sqrt{\alpha^2 + 4}B\hbar$, como,

$$C_H = \frac{\beta^2 B^2 \hbar^2 k_B}{4} \left\{ \frac{(\alpha - \sqrt{\alpha^2 + 4})^2 e^{-\beta\Delta_2} + 4(\alpha^2 + 4)e^{-\beta(\Delta_2 - \Delta_1)} + (\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 4})^2}{[e^{\beta(\Delta_1 - 2\Delta_2)/2} + 2 \cosh(\beta \Delta_1 / 2)]^2} \right\}. \quad (6.23)$$

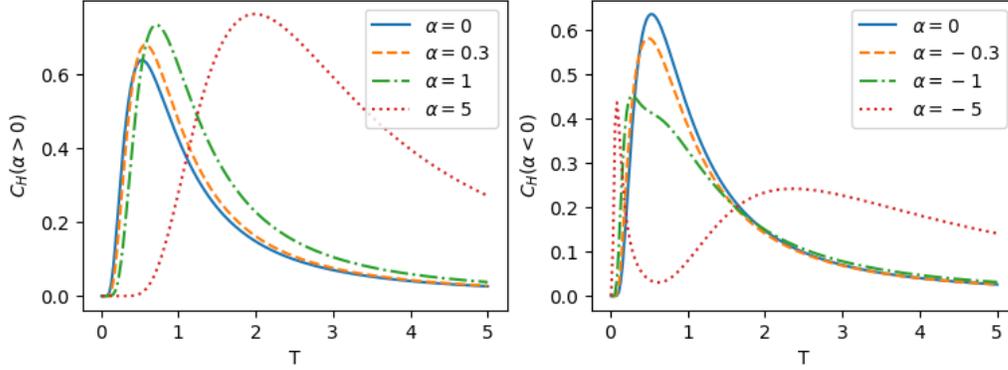


Figura 6.2: (a) Calor específico para valores de α positivos, mientras que en (b) se realiza para α negativos. En ambos casos la línea azul sólida corresponde a $\alpha = 0$, la línea naranja a trazos es para $\alpha = \pm 0.3$, la verde punteada corresponde a $\alpha = \pm 1$ y la roja punetada para $\alpha = \pm 5$.

En la figura 6.1 se muestra un mapa de colores de C_H donde se ven dos comportamientos respecto a α : si $\alpha > 0$, el calor solo muestra un pico, mientras que para $\alpha < 0$, existen dos máximos. Se colocó como referencia la evolución de Δ_1 y Δ_2 .

Si se considera el caso $k_B T \ll \Delta_1$, entonces el calor se aproxima a

$$C_H \approx \frac{\beta^2 B^2 \hbar^2 k_B}{4} \left\{ \frac{4(\alpha^2 + 4)e^{-\beta(\Delta_2 - \Delta_1)} + (\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 4})^2}{[e^{\beta(\Delta_1 - 2\Delta_2)/2} + e^{\beta\Delta_1/2}]^2} \right\},$$

donde, sí $\alpha \gg 1$, entonces $\Delta_1 \approx \Delta_2$, por lo que

$$C_H \approx \frac{\beta^2 B^2 \hbar^2 k_B}{4} \left[4(\alpha^2 + 4) + (\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 4})^2 \right] e^{-\beta\Delta_1}, \quad (6.24)$$

donde la dependencia se da respecto a la diferencia de energía con el primer estado excitado. Entonces, para el caso $k_B T \ll \Delta_1$ y $\alpha \gg 1$, el calor específico aumenta de manera exponencial respecto a Δ_1 , teniendo, por tanto, solo un máximo, como se ve en la figura 6.2(a).

Por otro lado, si $\alpha < 0$ entonces Δ_2 crece mientras Δ_1 tiende a cero, con lo que el cociente $\Delta_2/\Delta_1 > 2$ es creciente respecto a $|\alpha|$. Si $\alpha \ll -1$ se puede considerar que $2\Delta_2 - \Delta_1 \approx 2\Delta_2$, con lo que C_H se puede aproximar a

$$C_H \approx \frac{\beta^2 B^2 \hbar^2 k_B}{4} \left[4(\alpha^2 + 4)e^{-\beta\Delta_2} + (\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 4})^2 e^{-\beta\Delta_1} \right], \quad (6.25)$$

donde existirán dos picos, el primero de ellos aparecerá cuando T es del orden de Δ_1 mientras que el segundo aparecerá cuando T es del orden de Δ_2 (ver figura 6.2(b)). Este segundo pico no será tan pronunciado, ya que se verá amortiguado por la exponencial de Δ_1 .

La existencia de ambos picos conforme el cociente Δ_2/Δ_1 ya fue descrita en [72], donde los autores encontraron que un segundo máximo está relacionado con dicho cociente (el

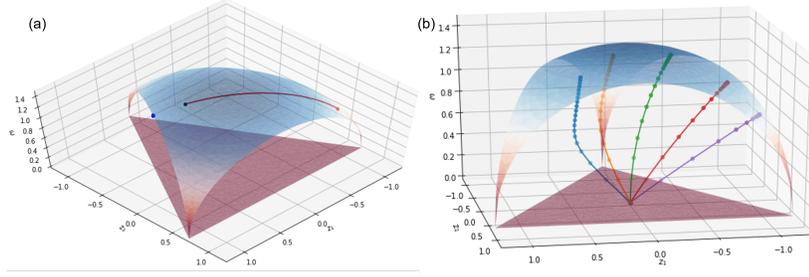


Figura 6.3: (a) Visualización Geométrica de los estados puros del sistema modificado con $\theta = \pi/2$, donde el estado base se representa con negro, el primer estado de color azul y el segundo estado excitado de color rojo. (b) Se presenta los estados térmicos del sistema, donde cada línea corresponde a un valor $\alpha = -2, -1, 0, 1, 2$ de izquierda a derecha, y cada punto representa un valor de βB diferente.

cual, mencionan, debe ser del orden de 10) y la degeneración de las energías del sistema, no presente en el sistema aquí tratado.

Para el otro caso, cuando $k_B T \gg \Delta_2$, el calor se aproxima como

$$C_H = \frac{\beta^2 B^2 \hbar^2 k_B}{36} \left[(\alpha - \sqrt{\alpha^2 + 4})^2 + 4(\alpha^2 + 4) + (\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 4})^2 \right], \quad (6.26)$$

donde no importa si α es positiva o negativa.

6.2.1. Visualización geométrica de los eigenestados y estados térmicos

Para la visualización geométrica de los eigenestados del Hamiltoniano propuesto se utilizará el modelo visto en la sección 2.4 para estudiar cómo se modifica la evolución de los estados mapeados respecto a α , cuando $\theta = \pi/2$. Se hará lo mismo para los estados térmicos. Recordando que cada estado puede ser expresado como

$$\hat{\rho} = \frac{1}{3} \left(\mathbb{I}_3 + \sum_{j=i}^3 x_j X_j + \sum_{k=1}^3 y_k Y_k + \sum_{l=1}^2 z_l Z_l \right), \quad (6.27)$$

donde las matrices X_i , Y_i y Z_j , con $i = 1, 2, 3$ y $j = 1, 2$, son las matrices de Gell-Mann, y $x_i = \text{Tr}[\hat{\rho} X_i]$, $y_i = \text{Tr}[\hat{\rho} Y_i]$ y $z_i = \text{Tr}[\hat{\rho} Z_j]$ los coeficientes del desarrollo. Para la visualización se utilizará z_1 como uno de los ejes, z_2 otro eje y la proyección $\omega = \sqrt{\sum_{j=1}^3 (x_j^2 + y_j^2)}$ como el tercer eje. De esta manera se obtiene la figura 6.3.

En la figura 6.3(a) se muestra la evolución de los eigenestados de H respecto a $\alpha \in [-2, 2]$. En los tres casos, los cambios en ϕ no afectan en la visualización. Se utilizó el color negro para el estado base, el cual inicia ($\alpha = -2$) en el punto negro sobre la malla para seguir hacia derecha, donde $\alpha = 0$ se encuentra en medio de la malla de estados puros. El segundo estado excitado realiza un camino inverso, representado en color rojo, iniciando con el punto rojo de la figura y siguiendo hacia la izquierda. El primer estado excitado para cualquiera α y ϕ es mapeado, como se puede intuir de la forma de $|0 \frac{\pi}{2}\rangle \langle 0 \frac{\pi}{2}|$ que es

independiente de θ y α , al punto $|\psi_4\rangle\langle\psi_4|$ de la malla, definido en el final del segundo capítulo.

Por otro lado, se muestra en la figura 6.3(b) la visualización geométrica de los estados térmicos para cinco valores de $\alpha = -2, -1, 0, 1, 2$ respecto a βB . Cada línea corresponde a diferentes valores de α de izquierda da derecha, donde el color azul es con $\alpha = -2$, el color verde es para $\alpha = 0$ y el color morada para $\alpha = 2$. Cada punto sobre las líneas corresponden a un valor diferente de βB , empezando con $\beta B \rightarrow 0$ (T grandes) en $\hat{\rho} \approx \mathcal{I}/3$, en el centro de triángulo del plano $z_1 - z_2$, y subiendo hacia los estados puros en la superficie de la malla. De esto, comparando con la visualización del espín-1 (que corresponde al color verde) visto en el capítulo anterior, se ve que α modifica el mapeo de los estados, pero el comportamiento de la termalización sigue siendo el mismo.

6.2.2. Métrica de Fubini-Study

Como se vio anteriormente, los eigenestados del sistema propuesto dependen de α y ϕ cuando $\theta = \pi/2$, por lo que los elementos de la métrica de Fubini-Study serán $\{g_{\phi\phi}, g_{\alpha\alpha}, g_{\phi\alpha}\}$, donde cada uno está dado como

$$g_{ij} = \Re [\langle \partial_i \psi | \partial_j \psi \rangle - \langle \partial_i \psi | \psi \rangle \langle \psi | \partial_j \psi \rangle], \quad (6.28)$$

con $i, j = \alpha, \phi$. Sustituyendo en la ecuación (6.19) se llega a que cada elemento está dado como:

- Para el ket $|+\frac{\pi}{2}\rangle$

$$g_{\phi\phi}^{(+)} = \frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2\sqrt{4+\alpha^2}}; \quad g_{\alpha\alpha}^{(+)} = \frac{1}{(4+\alpha^2)^2}; \quad g_{\phi\alpha}^{(+)} = 0. \quad (6.29)$$

- Para $|0\frac{\pi}{2}\rangle$

$$g_{\phi\phi}^{(0)} = 1; \quad g_{\alpha\alpha}^{(0)} = 0; \quad g_{\phi\alpha}^{(0)} = 0. \quad (6.30)$$

- Con $|-\frac{\pi}{2}\rangle$

$$g_{\phi\phi}^{(-)} = \frac{1}{2} - \frac{\alpha}{2\sqrt{4+\alpha^2}}; \quad g_{\alpha\alpha}^{(-)} = \frac{1}{(4+\alpha^2)^2}; \quad g_{\phi\alpha}^{(-)} = 0. \quad (6.31)$$

En la figura 6.4 se muestra la evolución de los elementos de la métrica de F-S no constantes. En (a) se presenta el caso para $g_{\phi\phi}$, que a diferencia del caso $\alpha = 0$ (espín-1), no es constante. El único tensor métrico que queda igual al caso $\alpha = 0$ es el primer estado excitado $|0\frac{\pi}{2}\rangle$, lo que era de esperarse, ya que, para $\theta = \pi/2$, $|0\frac{\pi}{2}\rangle = |0\rangle$, con $|0\rangle$ el primer estado excitado de $\hat{H} = B\hat{n} \cdot \vec{S}$.

Para el caso de $g_{\alpha\alpha}$, el estado base $|-\frac{\pi}{2}\rangle$ y el segundo estado excitado tienen el mismo comportamiento, el cual presenta un máximo en $\alpha = 0$ y decrece rápidamente a cero conforme $|\alpha|$ crece, como se ve en la figura 6.4(b).

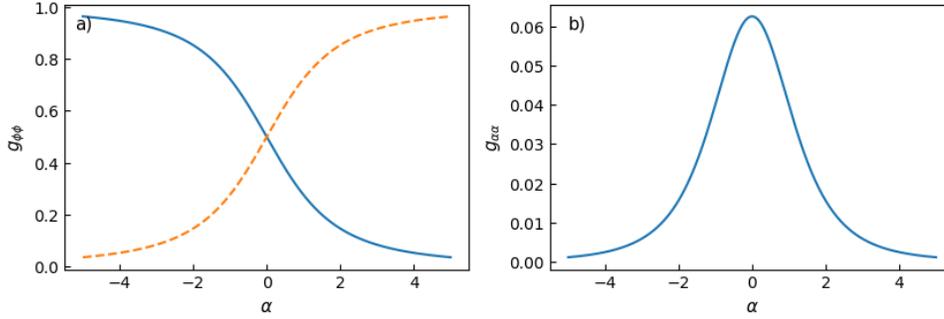


Figura 6.4: Evolución de los términos no constantes de la métrica de Fubini-Study. En (a) se tiene al caso $g_{\phi\phi}$ con la línea azul para $|\frac{-\pi}{2}\rangle$ mientras que la línea naranja a trazos corresponde a $|\frac{+\pi}{2}\rangle$. Para (b) se tiene el término $g_{\alpha\alpha}$ para $|\frac{+\pi}{2}\rangle$, mismo que es para el caso $|\frac{-\pi}{2}\rangle$.

6.2.3. Fase de Berry y Fase de Sjöqvist

Considerando los eigenkets la ecuación (6.19) se tiene que la conexión de Berry del eigenvalor $E_+^{z^2}$ es

$$A_+(\theta = \pi/2) = i \langle \frac{+\pi}{2} | \partial_\phi | \frac{+\pi}{2} \rangle = 0, \quad (6.32)$$

con lo que fase de Berry es $\Phi_B^{(+)}(\theta = \pi/2, \alpha) = 0$. Esta misma situación se da en $E_-^{z^2}$, donde

$$A_-(\theta = \pi/2) = i \langle \frac{-\pi}{2} | \partial_\phi | \frac{-\pi}{2} \rangle = 0, \quad (6.33)$$

con lo que la fase es $\Phi_B^-(\theta = \pi/2, \alpha) = 0$.

Esto parece erróneo porque la fase de Berry para $\alpha = 0$, obtenida en el capítulo anterior, es $\Phi_B^\pm(\theta = \pi/2, \alpha = 0) = -2\pi$. Recordemos que la fase de Berry es un invariante de norma con multiplicidad 2π . Por tanto, si se realiza una transformación de norma, $T_N = \exp(-i\phi)$ se tiene que la conexión de Berry es $\tilde{A} = -1 + A_\pm$ con lo que se llega al resultado deseado $\Phi_B^{(\pm)} = -2\pi$.

Para el eigenvalor $E_0^{z^2}$ se ve de manera más fácil que

$$A_0(\theta = \pi/2) = i \langle 0 | \frac{\pi}{2} | \partial_\phi | 0 \frac{\pi}{2} \rangle = 0, \quad (6.34)$$

por lo que $\Phi_B^0(\theta = \pi/2) = 0$, que es directamente el resultado que se obtiene con $\alpha = 0$.

Con estos resultados se puede obtener fácilmente el resultado para la fase de Sjöqvist

$$\Phi_S(\theta = \pi/2) = \arg [p_+ e^{-i2\pi} + p_0 + p_- e^{i2\pi}] = \arg [p_+ + p_0 + p_-] = 0, \quad (6.35)$$

ya que $p_+ + p_0 + p_- = 1$ y $\arg(1) = 1$.

6.2.4. Métrica de Bures

Los parámetros de evolución del sistema son $\{\beta, B, \phi, \alpha\}$, donde $p_n(\beta, B, \alpha)$ y $|n \frac{\pi}{2}(\phi, \alpha)\rangle$, por lo que el primer elemento de la métrica de Bures está dado por

$$dp_n = \frac{\partial p_n}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial p_n}{\partial B} dB + \frac{\partial p_n}{\partial \alpha} d\alpha$$

$$= -p_n[E_n - \langle E \rangle]d\beta - \frac{\beta}{B}p_n[E_n - \langle E \rangle]dB - \beta p_n \left[\frac{\partial E_n}{\partial \alpha} - \left\langle \frac{\partial E}{\partial \alpha} \right\rangle \right], \quad (6.36)$$

con lo que,

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \sum_n \frac{dp_n^2}{p_n} &= \left(\frac{d\beta^2}{\beta^2} + \frac{dB^2}{B^2} + \frac{2}{\beta B} d\beta dB \right) \frac{C_H}{4k_B} + \frac{\beta^2}{4} \text{Var} \left(\frac{\partial E}{\partial \alpha} \right) d\alpha^2 + \\ &\quad \frac{\beta}{2} g_{\alpha\beta B} \left(d\beta + \frac{dB}{\beta} \right) d\alpha, \end{aligned} \quad (6.37)$$

donde se definió

$$g_{\alpha\beta B} = \sum_n p_n [E_n - \langle E \rangle] \left[\frac{\partial E_n}{\partial \alpha} - \left\langle \frac{\partial E}{\partial \alpha} \right\rangle \right].$$

Por otro lado, para el segundo término se considera que $|n_{\frac{\pi}{2}}\rangle = |n_{\frac{\pi}{2}}(\phi, \alpha)\rangle$, por lo que, el elemento diferencial de los eigenkets es

$$\begin{aligned} |\langle n_{\frac{\pi}{2}} | dm_{\frac{\pi}{2}} \rangle|^2 &= \langle n_{\frac{\pi}{2}} | \left(\frac{\partial}{\partial \phi} d\phi + \frac{\partial}{\partial \alpha} d\alpha \right) | m_{\frac{\pi}{2}} \rangle \langle \left(\frac{\partial}{\partial \phi} d\phi + \frac{\partial}{\partial \alpha} d\alpha \right) m_{\frac{\pi}{2}} | n_{\frac{\pi}{2}} \rangle \\ &= \left| \langle n_{\frac{\pi}{2}} | \partial_\phi m_{\frac{\pi}{2}} \rangle \right|^2 d\phi^2 + \left| \langle n_{\frac{\pi}{2}} | \partial_\alpha m_{\frac{\pi}{2}} \rangle \right|^2 d\alpha^2 + \\ &\quad \left[\langle n_{\frac{\pi}{2}} | \partial_\phi m_{\frac{\pi}{2}} \rangle \langle n_{\frac{\pi}{2}} | \partial_\alpha m_{\frac{\pi}{2}} \rangle^* + \langle n_{\frac{\pi}{2}} | \partial_\alpha m_{\frac{\pi}{2}} \rangle \langle n_{\frac{\pi}{2}} | \partial_\phi m_{\frac{\pi}{2}} \rangle^* \right] d\alpha d\phi \end{aligned}$$

donde se utilizó que $\langle dm | n \rangle = -\langle m | dn \rangle$. Con esto, el segundo término de la métrica queda como

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{(p_n - p_m)^2}{p_n + p_m} \left| \langle n_{\frac{\pi}{2}} | dm_{\frac{\pi}{2}} \rangle \right|^2 &= \\ \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{(p_n - p_m)^2}{p_n + p_m} \left[\left| \langle n_{\frac{\pi}{2}} | \partial_\phi m_{\frac{\pi}{2}} \rangle \right|^2 d\phi^2 + \left| \langle n_{\frac{\pi}{2}} | \partial_\alpha m_{\frac{\pi}{2}} \rangle \right|^2 d\alpha^2 + \right. \\ \left. 2\Re \left(\langle n_{\frac{\pi}{2}} | \partial_\phi m_{\frac{\pi}{2}} \rangle \langle \partial_\alpha m_{\frac{\pi}{2}} | n_{\frac{\pi}{2}} \rangle \right) d\alpha d\phi \right]. \end{aligned} \quad (6.38)$$

De las ecuaciones (6.37) y (6.38) se puede ver que habrá varios elementos de la métrica nulos, como lo son aquellos que relacionan los ángulos θ y ϕ con la temperatura y campo, a saber $\{g_{\beta\phi}, g_{\beta\theta}, g_{B\phi}, g_{B\theta}\}$. Con esto, la métrica de Bures para $\theta = \pi/2$ está dada como

$$\begin{aligned} ds_B &= g_{\beta\beta} d\beta^2 + g_{\beta B} d\beta dB + g_{\beta\alpha} d\beta d\alpha + g_{BB} dB^2 + g_{B\alpha} dB d\alpha \\ &\quad + g_{\phi\phi} d\phi^2 + g_{\phi\alpha} d\phi d\alpha + g_{\alpha\alpha} d\alpha^2 \end{aligned} \quad (6.39)$$

donde,

$$\begin{aligned} g_{\beta\beta} &= \frac{C_H}{4k_B\beta^2} = g_{BB} \frac{B^2}{\beta^2} = g_{\beta B} \frac{2B}{\beta}, \\ g_{\phi\phi} &= \frac{2}{2e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 4\beta B\hbar}\right) + 1} \times \end{aligned} \quad (6.40)$$

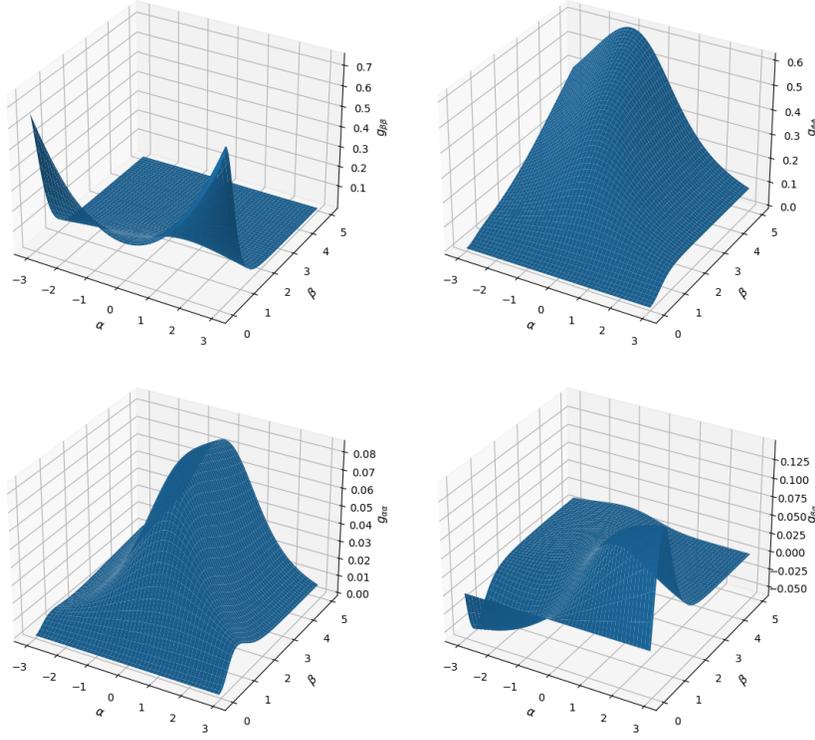


Figura 6.5: (a) Evolución respecto a β y α de $g_{\beta\beta}$. En (b) se muestra $g_{\phi\phi}$, mientras que en (c) se tiene $g_{\alpha\alpha}$ y en (d) $g_{\alpha\beta}$. Se consideró $B = 1$.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\left(e^{\frac{1}{2}(\alpha - \sqrt{\alpha^2 + 4})\beta B h} - 1 \right)^2}{(\alpha^2 - \sqrt{\alpha^2 + 4}\alpha + 4) \left(e^{\frac{1}{2}(\alpha - \sqrt{\alpha^2 + 4})\beta B h} + 1 \right)} + \\ \frac{\left(e^{\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B h} - 1 \right)^2}{(\alpha(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha) + 4) \left(e^{\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B h} + 1 \right)} \end{array} \right\}; \quad (6.41)$$

$$g_{\alpha\phi} = \sum_{n \neq m} \frac{(p_n - p_m)^2}{p_n + p_m} \Re \left(\left\langle n \frac{\pi}{2} \left| \partial_\phi m \frac{\pi}{2} \right\rangle \left\langle \partial_\alpha m \frac{\pi}{2} \left| n \frac{\pi}{2} \right\rangle \right) \right) = 0, \quad (6.42)$$

mientras que el resto de elementos dados por

$$g_{\alpha\alpha} = \frac{\beta^2}{4} \text{Var} \left(\frac{\partial E}{\partial \alpha} \right) + \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{(p_n - p_m)^2}{p_n + p_m} \left| \left\langle n \frac{\pi}{2} \left| \partial_\alpha m \frac{\pi}{2} \right\rangle \right|^2; \quad (6.43)$$

$$g_{\alpha\beta} = \frac{\beta}{2} g_{\alpha\beta B} = \beta g_{\alpha B}, \quad (6.44)$$

se presentan en Apéndice C completamente desarrollados.

En la figura 6.5 se tienen la evolución de algunos de los elementos de la métrica, los restantes no han sido expuestos por ser nulos o proporcionales a los que se muestran, y,

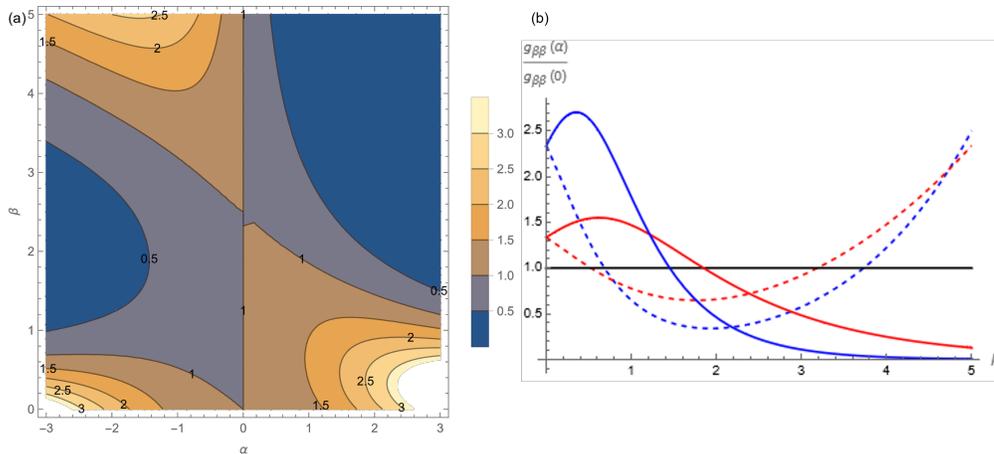


Figura 6.6: (a) Cociente $g_{\beta\beta}(\alpha)/g_{\beta\beta}(0)$. En (b) se tiene el mismo cociente para valores específicos de $\alpha = \{-2, -1, 0, 1, 2\}$, donde los valores negativos son las líneas a trazos. Las líneas azules son $\alpha = \pm 2$ y en rojo $\alpha = \pm 1$. Se tomó $B = 1$.

por tanto, no aportan información relevante.

En $g_{\beta\beta}$ (ver figura 6.5(a)) se muestran algunas zonas cortadas para bajas temperaturas y α grande, dichas zonas no divergen, únicamente presentan un crecimiento rápido y para poder apreciar el comportamiento del resto de la evolución fueron truncadas manualmente al momento de graficar. Como se puede ver, la métrica respecto a la temperatura no muestra un comportamiento irregular, sino que tiene una simetría respecto a $\alpha = 0$.

A diferencia del caso de β , se puede apreciar que para cada valor de β en $g_{\phi\phi}$ (ver figura 6.5(b)) tiene un máximo respecto a α , el cual va creciendo y recorriéndose a valores de $\alpha < 0$ mayores. Algo similar sucede para $g_{\alpha\alpha}$, como se ve en la figura 6.5(c). En la figura 6.5(d) el elemento $g_{\alpha\beta}$ presenta un comportamiento antisimétrico respecto a $\alpha = 0$, donde para $\alpha > 0$ se tiene un máximo para posteriormente disminuir lentamente hacia valores negativos, mientras que para $\alpha < 0$ respecto a β se tiene un mínimo para después crecer lentamente hacia valores positivos.

Como se puede ver en los cuatro casos, el comportamiento de la métrica no tiene algún comportamiento singular que indique la presencia de una transición de fase, tal como sucedió en el caso de espín-1.

Para comparar el comportamiento del elemento $g_{\beta\beta}$ del sistema modificado respecto al caso de espín-1 se realizó el cociente $g_{\beta\beta}(\alpha)/g_{\beta\beta}(0)$ (ver figura 6.6) donde $g_{\beta\beta}(0)$ corresponde al caso de espín-1. Se puede ver fácilmente que dicha operación es básicamente el cociente de calores específicos, $C_H(\alpha)/C_H(0)$. En (a) se muestra el comportamiento del cociente para β y α , con $B = 1$, donde se ve que $\alpha = 0$ divide en dos la gráfica, pero no se tiene algún comportamiento singular.

En la figura 6.6(b) se muestra el cociente para algunos valores de $\alpha = \{-2, -1, 0, 1, 2\}$, donde la línea discontinua es para valores negativos y la continua es para positivos, con el color azul para magnitud $|\alpha| = 2$ y el rojo para $|\alpha| = 1$. Aquí se aprecia la diferencia de comportamientos a bajas temperaturas, donde para valores positivos se tienen máximos para posteriormente tender a cero, mientras que para valores negativos de α se tiene un valor mínimo para posteriormente crecer.

6.2.5. Fase de Uhlmann

Sustituyendo las probabilidades antes encontradas del sistema térmico en la ecuación (4.51), se llega a que la conexión de Uhlmann respecto ϕ está dada por

$$\begin{aligned} A &= \sum_{i \neq j} \frac{(\sqrt{p_i} - \sqrt{p_j})^2}{p_i + p_j} \langle \psi_i | e^{i\phi \hat{S}_z / \hbar} \partial_\phi e^{-i\phi \hat{S}_z / \hbar} | \psi_j \rangle e^{-i\phi \hat{S}_z / \hbar} | \psi_i \rangle \langle \psi_j | e^{i\phi \hat{S}_z / \hbar} \\ &= -ie^{-i\phi \hat{S}_z / \hbar} A_{\pi/2} e^{i\phi \hat{S}_z / \hbar} \end{aligned} \quad (6.45)$$

donde se definió

$$A_{\pi/2} = \sum_{i \neq j} \frac{(\sqrt{p_i} - \sqrt{p_j})^2}{p_i + p_j} \langle \psi_i | \frac{\hat{S}_z}{\hbar} | \psi_j \rangle | \psi_i \rangle \langle \psi_j | = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{12} & 0 & -a_{12} \\ 0 & -a_{12} & -a_{11} \end{pmatrix},$$

con uno de los elementos de la matriz $A_{\pi/2}$ dado por,

$$\begin{aligned} a_{12} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}(\alpha+2\sqrt{\alpha^2+4})\beta B\hbar} \right] \times \\ &\left\{ \frac{(\alpha - \sqrt{\alpha^2 + 4}) \left[\sqrt{\frac{1}{1+2e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \cosh(\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar)}} - \sqrt{\frac{1}{1+e^{\frac{1}{2}(-\alpha+\sqrt{\alpha^2+4})\beta B\hbar} + e^{\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar}}} \right]^2}{(\alpha^2 - \alpha\sqrt{\alpha^2 + 4} + 4) \left(e^{\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \right)} + \right. \\ &\left. \frac{(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha) \left[\sqrt{\frac{e^{\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar}}{1+e^{\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar} + e^{(-\alpha+\sqrt{\alpha^2+4})\beta B\hbar}}} - \sqrt{\frac{1}{1+2e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \cosh(\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar)}} \right]^2}{(\alpha^2 + \alpha\sqrt{\alpha^2 + 4} + 4) \left(e^{\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}(\alpha+2\sqrt{\alpha^2+4})\beta B\hbar} \right)} \right\}, \end{aligned} \quad (6.46)$$

mientras que, por su longitud, el elemento a_{11} se presenta en el apéndice C.

La forma de A permite realizar una transformación unitaria parecida al caso del espín-1 ($\alpha = 0$), $|\sigma\rangle = e^{-i(\phi-\phi_0)\hat{S}_z/\hbar} |\sigma'\rangle$ tal que usando la ecuación de evolución de la conexión de Uhlmann es,

$$i \frac{\partial}{\partial \phi} |\sigma'\rangle = e^{-i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} [A_{\pi/2} - \hat{S}_z / \hbar] e^{i\phi_0 \hat{S}_z / \hbar} |\sigma'\rangle, \quad (6.47)$$

con lo que la evolución se obtiene integrando trivialmente. La holonomía de Uhlmann es

$$\hat{U}' = e^{-i\phi_0 \hat{S}_z} \exp \left[-2\pi i (A_{\pi/2} - \hat{S}_z / \hbar) \right] e^{i\phi_0 \hat{S}_z}. \quad (6.48)$$

Se define el operador $\hat{G} = (A_{\pi/2} - \hat{S}_z / \hbar) / g$, el cual cumple con

$$\text{Tr}[\hat{G}] = 0; \quad \text{Det}[\hat{G}] = \frac{1}{g} [-a_{11}a_{12}^2 + a_{11}a_{12}^2] = 0,$$

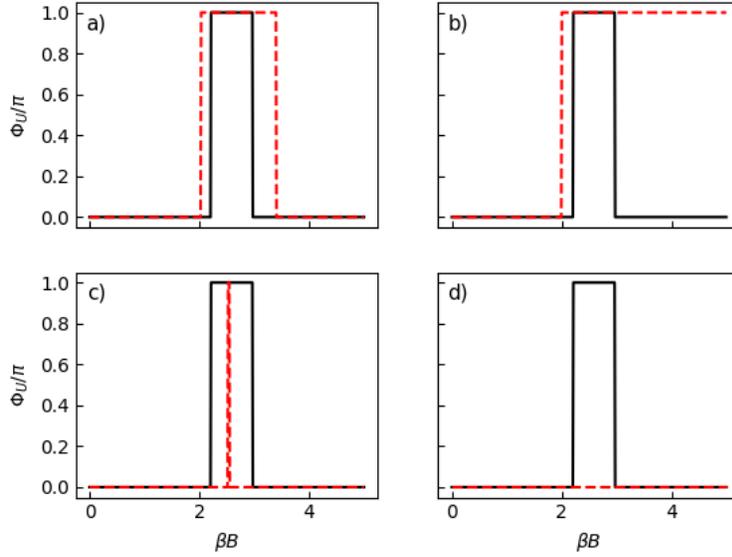


Figura 6.7: Evolución de la fase de Uhlmann del sistema propuesto para diferentes valores de α . Las líneas rojas a trazos pertenecen a los valores de (a) $\alpha = -0.1$, (b) $\alpha = -1$, (c) $\alpha = 0.04435$ y (d) $\alpha = 0.0444$. La línea continua negra se colocó como referencia del caso de espín-1, $\alpha = 0$.

mientras que g se define tal que $\text{Tr}[\hat{G}^2] = 2$, con lo que se llega a que

$$g = \sqrt{2a_{12}^2 + (a_{11} + 1)^2}. \quad (6.49)$$

Usando el resultado de [73] para el caso de $\det[R] = 0$,

$$\exp(i\gamma\hat{R}) = \mathcal{I} + i\hat{R}\sin\gamma + \hat{R}^2(\cos\gamma - 1),$$

se llega a la holonomía

$$\hat{U}' = e^{-i\phi_0\hat{S}_z} \exp[-i\varphi\hat{G}] e^{i\phi_0\hat{S}_z} = e^{-i\phi_0\hat{S}_z} \left[\mathcal{I} + i\sin\varphi\hat{G} + \hat{G}^2(\cos\varphi - 1) \right] e^{i\phi_0\hat{S}_z}, \quad (6.50)$$

con $\varphi = 2\pi\sqrt{2a_{12}^2 + (a_{11} + 1)^2}$.

Substituyendo en la forma de la fase de Uhlmann

$$\begin{aligned} \Phi_U &= \arg \left\{ \text{Tr} \left[\hat{\rho}'_0 e^{-i\phi_0\hat{S}_z} \left(\mathcal{I} + i\sin\varphi\hat{G} + \hat{G}^2(\cos\varphi - 1) \right) e^{i\phi_0\hat{S}_z} \right] \right\} \\ &= \arg \left\{ \text{Tr} \left[e^{-i\phi_0\hat{S}_z} \hat{\rho}_0 e^{i\phi_0\hat{S}_z} e^{-i\phi_0\hat{S}_z} \left(\mathcal{I} + i\sin\varphi\hat{G} + \hat{G}^2(\cos\varphi - 1) \right) e^{i\phi_0\hat{S}_z} \right] \right\} \\ &= \arg \left\{ 1 + i\sin\varphi \text{Tr}[\hat{\rho}_0\hat{G}] + (\cos\varphi - 1)\text{Tr}[\hat{\rho}_0\hat{G}^2] \right\}, \end{aligned}$$

donde $\text{Tr}[\hat{\rho}_0\hat{G}] = [(a_{11}-1)\langle\hat{S}_z\rangle_0 + \sqrt{2}a_{12}\langle\{\hat{S}_x, \hat{S}_z\}\rangle_0/\hbar]/g\hbar = 0$, ya que $\langle\hat{S}_z\rangle_0 = \langle\{\hat{S}_x, \hat{S}_z\}\rangle_0 = 0$, por lo que la fase se reduce a

$$\Phi_U = \arg \left\{ 1 + (\cos\varphi - 1)\text{Tr}[\hat{\rho}_0\hat{G}^2] \right\}. \quad (6.51)$$

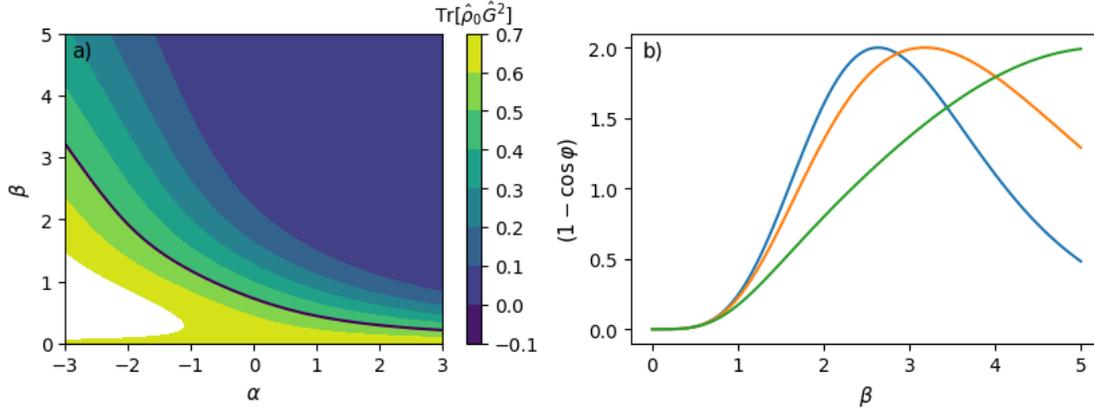


Figura 6.8: Evolución de los elementos dentro de la función *arg*. En (a) se muestra $\text{Tr}[\hat{\rho}_0 \hat{G}^2]$ y en (b) $(1 - \cos \varphi)$ para $\alpha = 0.0445$ en azul, $\alpha = 1$ en naranja y $\alpha = 2$ en verde. Con $B = 1$. La línea negra en (a) es cuando $\text{Tr}[\hat{\rho}_0 \hat{G}^2] = 1/2$.

En la figura 6.7 se muestra el comportamiento de la fase de Uhlmann para diferentes valores α , donde en (a) se considera $\alpha = -0.1$ con la línea roja discontinua, con el caso de $\alpha = 0$ en línea negra continua, donde se puede ver que la fase de Uhlmann no se pierde aun cuando la simetría $SU(2)$ se rompe. Como $\alpha = -0.1$ podría ser considerado como una perturbación del sistema de espín, pudiendo justificar la transición de fase, se tomó $\alpha = -1$ en (b), de tal forma que el término dipolar y el cuadrupolar del Hamiltoniano contribuyan. En ambos casos se presenta la transición de fase, la cual muestra un crecimiento en la longitud de valores de βB con fase, $\Phi_U = \pi$, como se muestra en la figura 6.7(b).

Por otro lado, para α positivos se muestran las figuras (c) y (d). En la primera se consideró $\alpha = 0.04435$, ya que es en este valor en el cual la transición de fase es casi para un solo valor de βB , el cual es, en unidades naturales, $\beta B = B/T \approx 2.53753754$. Los valores $\alpha \in [0, 0.04435]$ presentan una transición con menor longitud que el caso $\alpha = 0$, pero después de $\alpha \gtrsim 0.04435$ la transición desaparece, como se muestra en la figura 6.7(d), donde se usó $\alpha = 0.0444$.

Se analizaron numéricamente los coeficientes a_{11} y a_{12} , y se encontró que tanto para $T \in [0, 10]$ como para $\beta \in [0, 5]$ y $\alpha \in [-10, 10]$, $a_{11}(\alpha) = a_{11}(-\alpha)$ y $a_{12}(-\alpha) = -a_{12}(\alpha)$, con lo que $g(\alpha) = g(-\alpha)$ ($\varphi(\alpha) = \varphi(-\alpha)$). Con esto se llega a que la condición para que la fase no sea cero está dada por

$$(1 - \cos \varphi) \text{Tr}[\hat{\rho}_0 \hat{G}^2] > 1, \quad (6.52)$$

donde $0 < (1 - \cos \varphi) < 2$ para cualquiera φ . $\text{Tr}[\hat{\rho}_0 \hat{G}^2]$ se muestra en la figura 6.8(a), donde se puede ver que disminuye conforme α aumenta. Dado que el elemento con coseno tiene un dominio entre 0 y 2, si $\text{Tr}[\hat{\rho}_0 \hat{G}^2]$ no es mayor a $1/2$ entonces no se cumplirá la condición para la existencia de fase. Esta situación se ve para α positivas, donde solo valores pequeños de β tienen $\text{Tr}[\hat{\rho}_0 \hat{G}^2] > 1/2$ pero $(1 - \cos \varphi) < 1$, como se ve en la figura 6.8(b). Continuando el análisis de la relación entre el calor específico del capítulo anterior, se graficó el comportamiento de la fase de Uhlmann respecto a T , para $B = 1$ y $k_B = 1$, en la figura 6.9. En (a) y (b) se tiene únicamente la fase respecto a T y α , mientras que en

(c) se presenta el calor específico C_H usando los valores críticos de α y β de la transición de la fase de Uhlmann como referencia.

Por otro lado, siguiendo la idea de la anomalía de Schottky, en la figura 6.9(d) se compara la probabilidad del primer estado excitado con el valor de (α, T) en el cual se da la transición de fase. También se coloca la probabilidad del segundo estado excitado. Se puede ver que la probabilidad alcanza el orden de centésimas cercar de la primera transición. Por otro lado, también se puede ver que para $\alpha > 0$ tanto el primer estado excitado como el segundo alcanzan el orden de centésimas casi a la misma temperatura, y es en este caso que la transición de fase desaparece.

Tal como sucede en el caso de espín-1, el máximo de C_H sigue el mismo comportamiento de la primera transición en la fase de Uhlmann, al igual que la probabilidad del primer estado excitado comienza a ser significativa siguiendo la línea de la primera transición. Que tanto C_H como $p_{0\pi/2} = \exp(-\alpha\beta B\hbar)/Z$ presenten una relación cualitativa con la fase resulta interesante, y un posible punto de partida para investigaciones futuras, más cuando dicho comportamiento está presente para el caso de espín-1/2 y en un sistema compuesto de espines-1/2 [39].

Como se puede ver en la figura 6.1, el calor específico para α negativos presenta dos máximos, uno para valores de T pequeños y el otro para valores un poco más grandes. A pesar de que ambos están relacionados con la anomalía de Schottky, solo el primero de ellos se puede relacionar con la fase.

Para α positivos solo se tiene un máximo, el cual se da para T cada vez mayores conforme α crece, siguiendo un crecimiento parecido al segundo máximo del $\alpha < 0$. Del análisis presentado para el calor, las probabilidades del primer y segundo estado excitado comienzan a ser parecidas para α positivas grandes, ya que $E_+^{(z^2)} \approx E_0^{(z^2)}$. Por tanto, el que caso de α positivo no contradice la idea de que la aparición del primer estado excitado parece tener una relación con la transición de la fase de Uhlmann, ya que, para α positivas, el primer y segundo estados excitados intervienen, lo que podría estar relacionado con la desaparición de la transición.

6.3. Caso numérico para $\theta \in [0, \theta]$

Debido a la complejidad que presentan los cálculos de la ecuación de eigenvalores del sistema anisótropo y para no dejar de lado el caso general, para cualquier valor de α y θ se procederá a obtener las fases y métricas de manera numérica.

Ya se ha mostrado las dependencias de los eigenvalores y eigenkets, dadas como

$$E_n^{(z^2)}(B, \alpha, \theta) = y(\alpha, \theta)B\hbar, \quad (6.53)$$

y,

$$|n_{z^2}\rangle = \exp(-i\phi\hat{S}_z/\hbar) |\psi_n(\alpha, \theta)\rangle. \quad (6.54)$$

Sin expresar explícitamente los kets $|\psi_n(\alpha)\rangle$, los elementos de matriz de las derivadas pueden ser expresados, para $n \neq m$, como

$$\langle m_{z^2} | \partial_\lambda | n_{z^2} \rangle = \frac{\langle m_{z^2} | \partial_\lambda \hat{H} | n_{z^2} \rangle}{E_n - E_m} = \frac{\langle \psi_m | \partial_\lambda \hat{H}_0 | \psi_n \rangle}{E_n - E_m}, \quad (6.55)$$

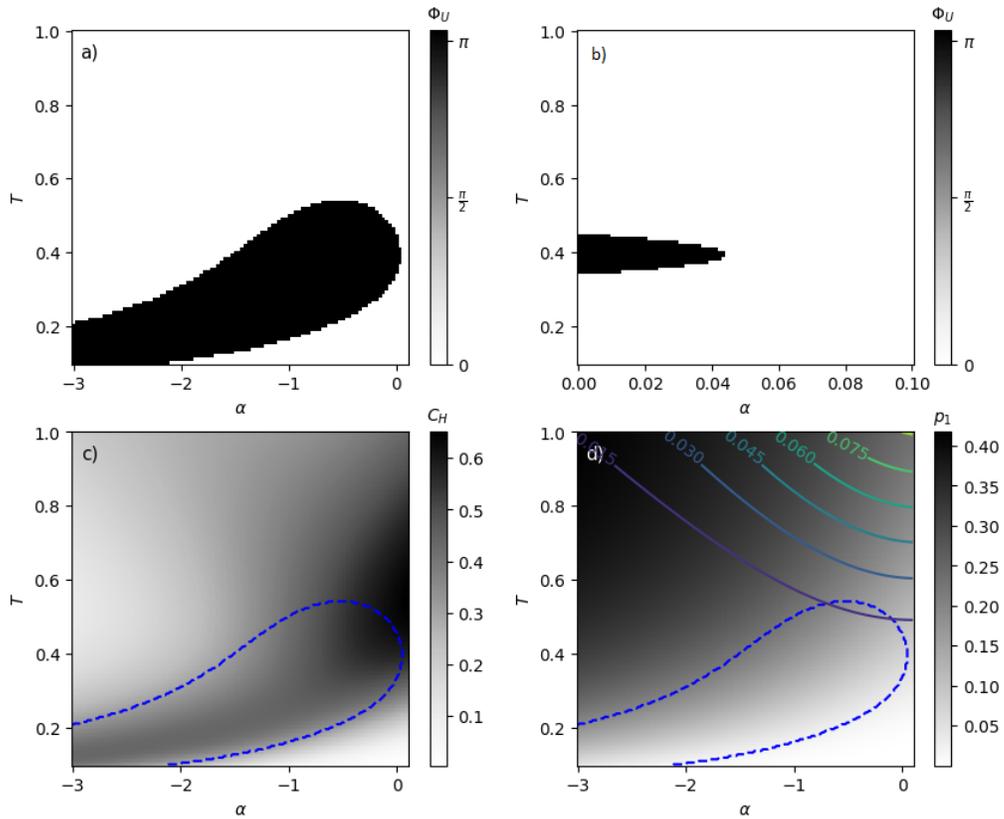


Figura 6.9: En (a) y (b) se tiene la Fase de Uhlmann del sistema modificado respecto a α y T . En (c) se grafica respecto a α y T el calor específico C_H , donde la línea azul corresponde a los valores de $T_c(\alpha)$ donde se registran los cambios de fase. En (d) se muestra un mapa de color de la probabilidad primer estado excitado, líneas sólidas para diferentes valores de la probabilidad del segundo estado excitado y se coloca de referencia $T_c(\alpha)$ con una línea a trazos azul.

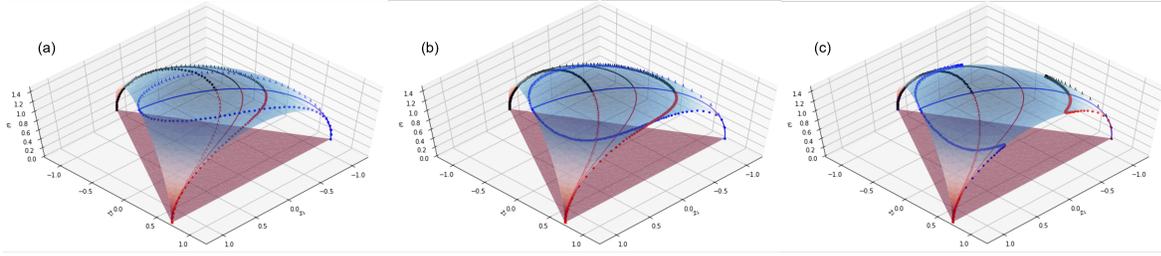


Figura 6.10: Visualización geométrica de los estados puros en función de θ para varias α . En (a) se tiene $\alpha = \pm 0.5$, mientras que en (b) y (c) se tiene $\alpha = \pm 0.9$ y $\alpha = \pm 1.1$, respectivamente, donde los valores negativos de α corresponden a las líneas punteadas y los positivos se usa la forma \curvearrowright . El estado base es color negro, el primer y segundo estado excitado son de color azul y rojo, respectivo.

con $\lambda = \theta, \lambda$. Para $\lambda = \phi$ los elementos se simplifican a

$$\langle m_{z^2} | \partial_\phi | n_{z^2} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \psi_m | \hat{S}_z | \psi_n \rangle. \quad (6.56)$$

Con esto en mente, se procederá a presentar los resultados obtenidos respecto a visualización geométrica, las métricas y fases del sistema propuesto.

6.3.1. Visualización geométrica

En la figura 6.10 se muestra la evolución de los estados puros en función de θ para diferentes valores de α . En (a) se tiene la evolución respecto a θ , con $\alpha = -0.5$, (línea punteada) del estado base, color negro, la cual empieza en el estado $|2\rangle \langle 2|^4$ de la base computacional, para realizar un camino por debajo del caso $\alpha = 0$ (línea sólida negra) hasta $|0_b\rangle \langle 0_b|$, con $|0_b\rangle = (0, 1, 0)^T$. El primer estado excitado, línea azul, comienza en $|1\rangle \langle 1|$ y realiza un camino curvo hacia el estado, definido en la sección 2.4, $|+4\rangle \langle +4|$ para volver formando un tipo elipse con dirección a $|1\rangle \langle 1|$. El segundo estado excitado, de color rojo, comienza en $|0_b\rangle \langle 0_b|$ y sigue una curva que tiende a $|1\rangle \langle 1|$ para llegar a $|2\rangle \langle 2|$.

El caso de $\alpha = 0.5$ (ver figura 6.10(a)) tiene un comportamiento “antisimétrico” al caso de $\alpha = -0.5$, ya que el estado base comienza en $|2\rangle \langle 2|$ pero sigue el camino que tendría el segundo estado excitado del caso positivo (en sentido contrario). A su vez, el segundo estado excitado comienza en $|0\rangle \langle 0|$ y siguen en sentido contrario el camino del estado base de $\alpha = -0.5$ para $|2\rangle \langle 2|$. El primer estado sigue en sentido contrario el camino del primer estado excitado del caso positivo.

En la figura 6.10(b) se tiene la evolución de los estados puros para los casos $\alpha = \pm 0.9$, los cuales tiene el mismo comportamiento del caso (a) solo con las curvas más pronunciadas y alejadas del caso: $\alpha = 0$

En la figura 6.10(c) se puede visualizar el caso de $\alpha = 1.1$ donde el comportamiento de las respectivas evoluciones cambio. En estado base de $\alpha = -1.1$ comienza en $|2\rangle \langle 2|$ para seguir un camino a $|0\rangle \langle 0|$, como se muestra en la figura, en sentido contrario al segundo

⁴Véase la posición de cada estado en la última sección del segundo capítulo.

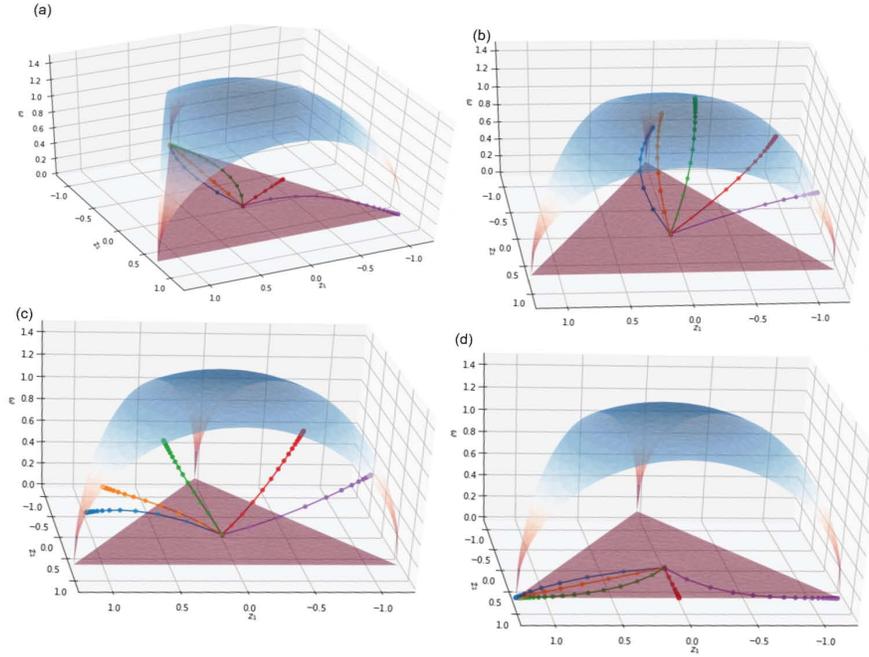


Figura 6.11: Visualización Geométrica de los estados térmicos para diferentes valores de θ . En (a) se tiene $\theta = 0$, mientras que en (b) se tiene $\theta = \pi/4$, en (c) $\theta = 3\pi/4$ y en (d) $\theta = \pi$. Cada línea representa un valor de α diferente con la secuencia (azul-2, naranja-1, verde-0, rojo-1, magenta-2), mientras que cada punto sobre las líneas es un diferente valor de βB .

estado excitado del caso $\alpha = 1.1$. A diferencia de los dos casos anteriores, el primer estado excitado del caso negativo comienza en $|0\rangle\langle 0|$ y aumenta por la pared de la malla hasta un cierto estado de la forma

$$|+'_2\rangle = c_2(|0\rangle + |1\rangle),$$

para posteriormente evolucionar hasta el estado $|+4\rangle\langle +4|$, y seguir hasta un estado de la forma

$$|+'_3\rangle = c_3(|1\rangle + |2\rangle)$$

para finalizar en $|2\rangle\langle 2|$. El caso positivo realiza este mismo camino en sentido inverso.

El segundo estado excitado para $\alpha = -1.1$ comienza en $|1\rangle\langle 1|$ y sigue por estados de la forma $|+'_2\rangle\langle +'_2|$, para después volver por estados $|+'_3\rangle$'s. Nuevamente, el caso positivo realiza un camino invertido.

Los caso (a) y (b) se asemejan al caso con $\alpha = 0$, y conforme la perturbación del Hamiltoniano de espín-1 crece, i.e α crece, los caminos de la evolución se ven más afectados. El punto de inflexión sucede cuando α es lo suficientemente grande para que el elemento agregado al Hamiltoniano deje de ser una perturbación, esto suceden, en la visualización geométrica, al menos, en $|\alpha| > 1$. A partir de este valor de α los estados iniciales y la forma de la evolución cambia, como se ve en la figura 6.10(c).

Si bien resulta interesante tener una visualización geométrica, el modelo propuesto no ha mostrado algún comportamiento de interés.

Por otro lado, en la figura 6.11 se presenta el mapeo de los estados térmicos del sistema.

Cada figura corresponde a un valor diferente de θ , y se sigue la convención usada para el caso de $\theta = \pi/2$, a saber, cada línea corresponde a un valor diferente de α , donde el color azul es para $\alpha = -2$, el naranja para $\alpha = -1$, verde para $\alpha = 0$, rojo para $\alpha = 1$ y el magenta con $\alpha = 2$. Cada punto sobre las líneas es para un valor diferente de βB , donde el límite $\beta B \gg 1$, que corresponde a $T \rightarrow \infty$, es mapeado en todos los casos a la coordenada $(0, 0, 0)$ con $\hat{\rho} = \mathcal{I}/3$, el estado máximamente mezclado. Para temperaturas bajas, los estados son mapeados cerca de la malla, formada por los estados puros.

En la figura 6.11 (a) se presenta el caso de $\theta = 0$, en el cual se tiene que para cualquiera α los estados quedan el plano $z_1 - z_2$. Para (b) se consideró $\theta = \pi/4$ donde se puede ver que los estados evolucionan hacia el lado de estados puros que consisten en una combinación entre los estados de la base computacional $|1\rangle$ y $|2\rangle$. Para $\theta = \pi/2$ se tenía una evolución más céntrica, para pasar hacia los estados puros $|0\rangle$ y $|1\rangle$ en $\theta = 3\pi/4$, mostrada en (c). En (d) se tiene el caso límite $\theta = \pi$, donde los estados vuelven a estar en el plano $z_1 - z_2$, pero con tendencia hacia la combinación $a|0\rangle + b|1\rangle$.

En ambos caso se puede ver que la modificación del Hamiltoniano de espín-1 con el elemento \hat{S}_z^2 no resulta trivial respecto a la visualización geométrica considerada. Esto era de esperarse, ya que la modificación propuesta se da en los elementos H_{11} y H_{33} , esto es, en la diagonal, por lo tanto, el cambio no será “absorbido” por la proyección en ω .

6.3.2. Métrica de Fubini-Study

Se tiene que los eigenket's del sistema tiene la forma $|n_{z^2}\rangle = e^{-i\phi\hat{S}_z/\hbar} |\psi_n(\alpha, \theta)\rangle$, con lo que los elementos de la métrica de F-S serán de los parámetros α, θ y ϕ . El más sencillo de todos es respecto a ϕ , dado como

$$g_{\phi\phi}^{(n)} = \frac{1}{\hbar^2} \Re \left[\langle \hat{S}_z^2 \rangle_n - \langle \hat{S}_z \rangle_n^2 \right]; \quad (6.57)$$

donde se usó que $\sum_m |m_{z^2}\rangle \langle m_{z^2}| = \mathcal{I}$ y $\langle \partial \psi_n | \psi_n \rangle = - \langle \psi_n | \partial \psi_n \rangle$, con $\langle A \rangle_n = \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle$. Para los casos restantes, buscando eliminar la derivada de los ket's, se tiene que cada elemento de la métrica puede ser escrito usando la relación de completez como,

$$\begin{aligned} g_{ij}^{(n)} &= \Re \left[\sum_m \langle \partial_i \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_j \psi_n \rangle - \langle \partial_i \psi_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \partial_j \psi_n \rangle \right] \\ &= \Re \left[\sum_{m \neq n} \langle \partial_i \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_j \psi_n \rangle + \langle \partial_i \psi_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \partial_j \psi_n \rangle - \langle \partial_i \psi_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \partial_j \psi_n \rangle \right] \\ &= \Re \left[\sum_{m \neq n} \langle \partial_i \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_j \psi_n \rangle \right] = -\Re \left[\sum_{m \neq n} \langle \psi_n | \partial_i \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_j \psi_n \rangle \right], \end{aligned} \quad (6.58)$$

por lo que,

$$g_{\alpha\alpha}^{(n)} = -\Re \left[\sum_{m \neq n} \langle \psi_n | \partial_\alpha \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_\alpha \psi_n \rangle \right] = \Re \left[\sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n | \partial_\alpha \hat{H}_0 | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_\alpha \hat{H}_0 | \psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \right]; \quad (6.59)$$

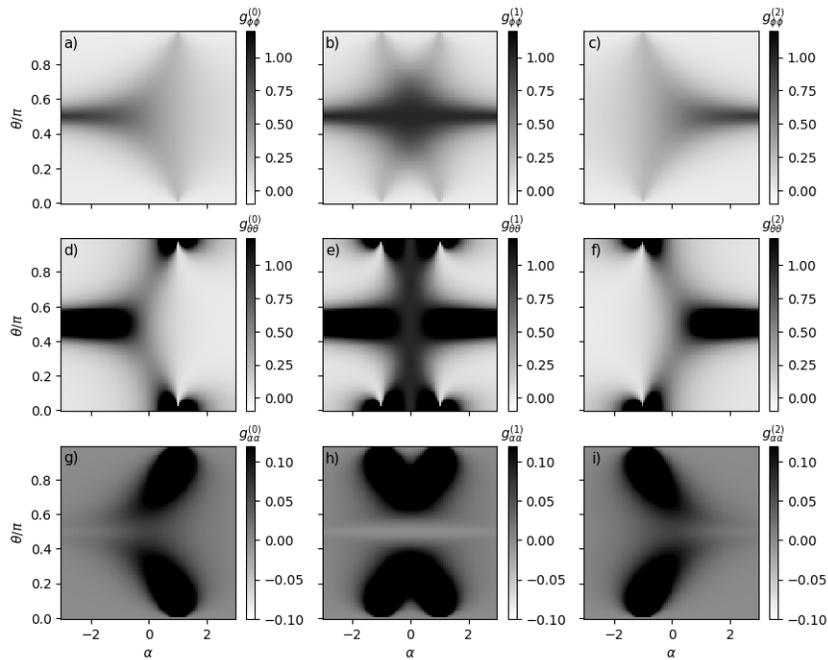


Figura 6.12: Evolución respecto a θ y α de los elementos de la $g_{\phi\phi}$ (fila superior, (a)-(c)), $g_{\theta\theta}$ (segunda fila, (d)-(f)) y $g_{\alpha\alpha}^{(n)}$ (fila inferior, (g)-(i)). La primera columna ((a), (d) y (g)) corresponde al estado base $|0_{z2}\rangle$, mientras que la segunda y tercera al primer y segundo estado excitado, respectivamente.

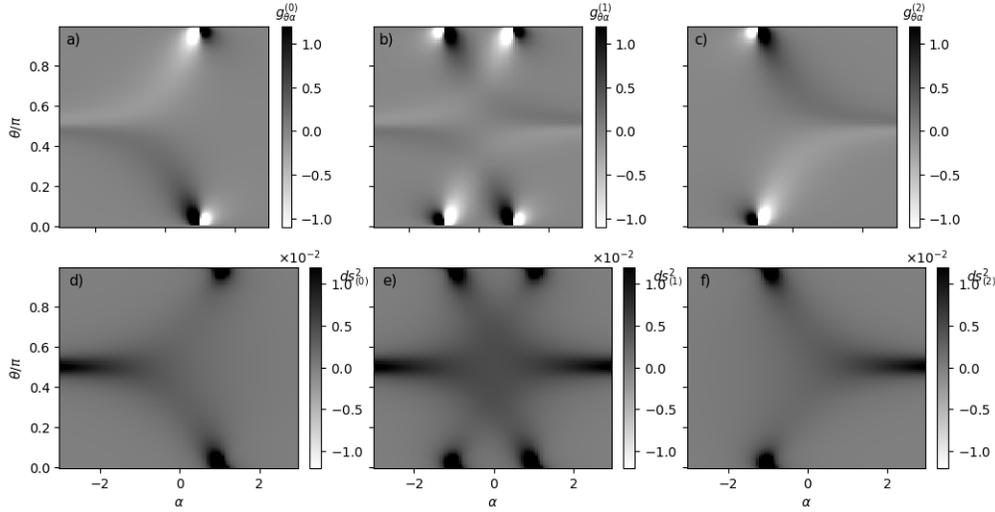


Figura 6.13: Elemento $g_{\theta\alpha}^{(n)}$ para el estado $|0_{z^2}\rangle$ (a), el estado $|1_{z^2}\rangle$ (b) y $|2_{z^2}\rangle$ (c). De (d)-(f) se tienen los elementos diferenciales de la métrica, en el mismo orden.

$$g_{\theta\theta}^{(n)} = -\Re \left[\sum_{m \neq n} \langle \psi_n | \partial_\theta \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_\theta \psi_n \rangle \right] = \Re \left[\sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n | \partial_\theta \hat{H}_0 | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_\theta \hat{H}_0 | \psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \right]. \quad (6.60)$$

Los tres elementos de la métrica mostrados en la figura 6.12 muestran un comportamiento espejo respecto a α entre los estados $|0_{z^2}\rangle$ y $|2_{z^2}\rangle$, y entre ellos mismos respecto a $\theta = \pi/2$. El primer estado excitado tiene dicho comportamiento espejo con el mismo respecto $\theta = \pi/2$ y $\alpha = 0$. Es importante notar que la barra de color de las figuras no tiene un valor final, esto se debe a que las zonas negras de las figuras son para valores de varios órdenes de magnitud mayor, pero fueron truncados para poder ver el comportamiento completo de los elementos. Aunque los valores en dichas zonas son grandes, el elemento de la métrica correspondiente no es divergente.

Para los elementos cruzados se tiene que cuando uno de los parámetros es ϕ se llega a

$$g_{\phi\theta}^{(n)} = -\Re \left[\sum_{m \neq n} \langle \psi_n | \partial_\phi \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_\theta \psi_n \rangle \right] = \frac{1}{\hbar} \Re \left[i \sum_{m \neq n} \langle \psi_n | \hat{S}_z | \psi_m \rangle \frac{\langle \psi_m | \partial_\theta \hat{H}_0 | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} \right]; \quad (6.61)$$

$$g_{\phi\alpha}^{(n)} = -\Re \left[\sum_{m \neq n} \langle \psi_n | \partial_\phi \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_\alpha \psi_n \rangle \right] = \frac{1}{\hbar} \Re \left[i \sum_{m \neq n} \langle \psi_n | \hat{S}_z | \psi_m \rangle \frac{\langle \psi_m | \partial_\alpha \hat{H}_0 | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} \right], \quad (6.62)$$

donde se tiene que $\langle \hat{S}_z \rangle_\psi = \langle \psi_n | \partial_\phi \psi_m \rangle \in \Re$. De igual forma, se puede comprobar que $\langle \psi_m | \partial_i \hat{H}_0 | \psi_n \rangle \in \Re$, para $i = \theta, \alpha$, por lo que, al obtener la parte real de la suma dentro de los corchetes se llega a que $g_{\phi\theta}^{(n)} = g_{\phi\alpha}^{(n)} = 0$.

El elemento restante está dado por

$$g_{\theta\alpha}^{(n)} = -\Re \left[\sum_{m \neq n} \langle \psi_n | \partial_\theta \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_\alpha \psi_n \rangle \right] = \Re \left[\sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n | \partial_\alpha \hat{H}_0 | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_\theta \hat{H}_0 | \psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \right], \quad (6.63)$$

el cual no será necesariamente cero, como se muestra en la figura 6.13(a)-(c). En dicha figura se puede notar que nuevamente el estado base y el segundo estado muestran un comportamiento espejo respecto a α . También el primer estado excitado sigue manteniendo simetría respecto $\alpha = 0$ y $\theta = \pi/2$.

Al igual que en los primeros elementos mostrados, los valores graficados fueron truncados. En este caso, y como es el único elemento que tiene valores negativos, las áreas negras tienden a valores de varios órdenes de magnitud mayor, mientras que las áreas blancas corresponden a valores negativos de varios órdenes de magnitud mayor a los que tiene la barra de color.

De las gráficas de los elementos de la métrica, los eigenestados no muestran la métrica de un espacio esférico, tal como se tiene en el caso de $\hat{H} = \vec{B} \cdot \vec{S}$. También se tiene que el espacio del estado base y el segundo estado excitado muestran un comportamiento antisimétrico, a diferencia del caso isotrópico donde ambos espacios eran iguales. Esto se puede ver claramente en la figura 6.13 donde se muestra el elemento diferencial de la métrica. El primer estado excitado tiene las propiedades de la métrica tanto del estado base como del segundo estado.

6.3.3. Fase de Berry y Fase de Sjöqvist

Considerando que θ y α son constantes, la conexión de Berry estará descrita por

$$A_B = i \langle n_{z^2} | \partial_\phi | n_{z^2} \rangle = \frac{\langle \psi_n | \hat{S}_z | \psi_n \rangle}{\hbar}, \quad (6.64)$$

donde se usó (6.56). Con esto, la conexión de Berry es independiente de ϕ , por lo que la fase de Berry se obtiene integrando trivialmente sobre ϕ , esto es,

$$\Phi_B^{(n)} = \frac{2\pi}{\hbar} \langle \psi_n | \hat{S}_z | \psi_n \rangle. \quad (6.65)$$

Dado que no se tienen los eigenkets de manera analítica, la figura 6.14 fue obtenida de manera numérica, la cual está dividida por columnas y filas, donde cada columna corresponde a un diferente estado, el estado base, el primer estado excitado y el segundo estado respectivamente. La fila superior corresponde a valores de α positivos, mientras que la inferior a α negativos.

Como se puede ver en las figuras mostradas, la fase de Berry de todos los casos dependen de α de manera antisimétrica. La evolución respecto a α del estado $|0_{z^2}\rangle$ para α 's positivos tiene un efecto espejo respecto al caso del $|2_{z^2}\rangle$ para α 's negativos, de la misma forma que $|0_{z^2}\rangle$ para α 's negativos lo tiene para con $|2_{z^2}\rangle$ con α 's positivos. Lo mismo se ve para $|1_{z^2}\rangle$ para α 's positivos y negativos. Este comportamiento se debe a la simetría que tiene el Hamiltoniano respecto a α , el cual puede ser visto en los eigenkets mostrados para el caso de $\pi/2$, donde el coeficiente de normalización cumple con $c_+^{(\pi/2)}(\alpha > 0) = c_-^{(\pi/2)}(\alpha < 0)$.

Usando la ecuación (6.65) en la fase de Sjöqvist como un primer acercamiento a la fase geométrica de los estados mixtos, se tiene simplemente que,

$$\Phi_S = \arg \left\{ \frac{e^{-\beta E_0^2}}{Z} \exp \left[i \frac{2\pi}{\hbar} \langle \psi_0 | \hat{S}_z | \psi_0 \rangle \right] + \frac{e^{-\beta E_1^2}}{Z} \exp \left[i \frac{2\pi}{\hbar} \langle \psi_1 | \hat{S}_z | \psi_1 \rangle \right] \right\} +$$

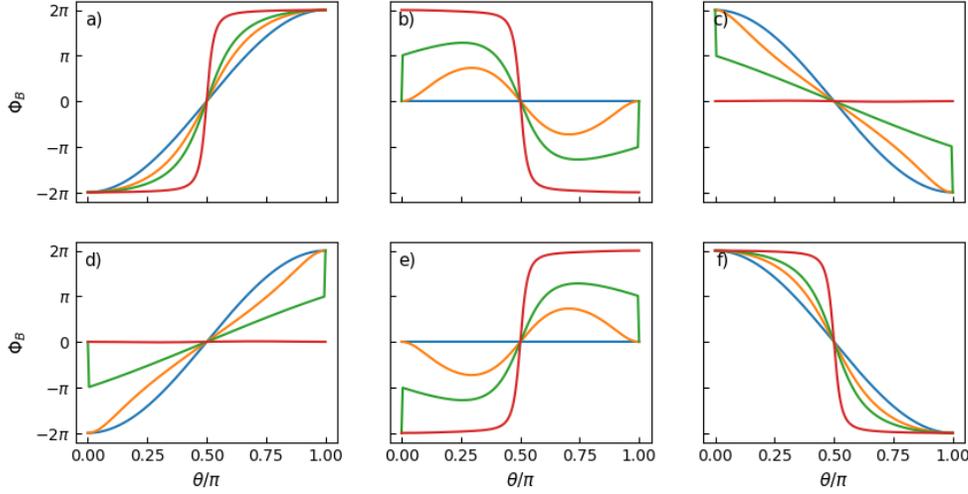


Figura 6.14: Se muestran la evolución de la fase de Berry para el sistema modificado con diferentes magnitudes de α : en (a)-(c) se tiene la configuración $\{\text{azul} \rightarrow 0, \text{naranja} \rightarrow -0.5, \text{verde} \rightarrow -1, \text{rojo} \rightarrow -5\}$ respectivamente y en (d)-(f) se tiene $\{\text{azul} \rightarrow 0, \text{naranja} \rightarrow 0.5, \text{verde} \rightarrow 1, \text{rojo} \rightarrow 5\}$. (a) y (d) corresponden al eigenvalor $|0_{z^2}\rangle$, (b) y (e) a $|1_{z^2}\rangle$, y las dos restantes a $|2_{z^2}\rangle$.

$$\begin{aligned}
 & \left. \frac{e^{-\beta E_2^{z^2}}}{Z} \exp \left[i \frac{2\pi}{\hbar} \langle \psi_2 | \hat{S}_z | \psi_2 \rangle \right] \right\} \\
 = & \arg \left\{ \exp \left[-\beta E_0^{z^2} + i \frac{2\pi}{\hbar} \langle \psi_0 | \hat{S}_z | \psi_0 \rangle \right] + \exp \left[-\beta E_1^{z^2} + i \frac{2\pi}{\hbar} \langle \psi_1 | \hat{S}_z | \psi_1 \rangle \right] + \right. \\
 & \left. \exp \left[-\beta E_2^{z^2} + i \frac{2\pi}{\hbar} \langle \psi_2 | \hat{S}_z | \psi_2 \rangle \right] \right\} \quad (6.66)
 \end{aligned}$$

Las cuatro gráficas de la figura 6.15 se dividen en columnas, la columna de la izquierda corresponde al caso de α 's negativos, mientras que la de la derecha es para los valores positivos. En los cuatro casos el comportamiento es semejante, al menos por encima de un valor βB crítico, donde la fase sube suavemente. Alrededor de $(\beta B)_c$, para $\alpha < 0$, la fase tiene una subida rápida para un valor de $\theta_c^{(i)}$, para posteriormente subir suavemente y en $\theta = \pi/2$ bajar a $\Phi_S = 0$ y luego subir suavemente hasta un valor de $\theta_c^{(f)}$ donde sube rápidamente a 2π . Para $\alpha < 0$, el comportamiento es inverso, como se puede ver en las líneas naranjas discontinuas en la figura 6.16.

Debajo de $(\beta B)_c$ y $\alpha < 0$, la fase tiene un comportamiento suave, como se ve en la línea azul en las figuras 6.16. Por arriba de $(\beta B)_c$ y $\alpha < 0$ la fase aumenta monótonamente de 0 a 2π .

Para el caso presentado en la figura 6.15(a) se tiene que, con $\hbar = 1$, $(\beta B) \approx 0.25$ con $\theta_c^{(i)} \approx 0.4\pi$ y $\theta_c^{(f)} = 0.6\pi$, mientras que en (b) $(\beta B) \approx 0.3141$ con $\theta_c^{(i)} \approx 0.25$ y $\theta_c^{(f)} = 0.75$. Para $\alpha = \pm 0.5$, en la figura 6.15(c) $(\beta B) \approx 0.44$ con $\theta_c^{(i)} \approx 0.48\pi$ y $\theta_c^{(f)} = 0.88\pi$, y en (d) se tiene $(\beta B) \approx 0.37$ con $\theta_c^{(i)} \approx 0.17\pi$ y $\theta_c^{(f)} = 0.83\pi$.

Nuevamente, la fase de Sjöqvist no tiene una transición de fase y en $\theta = \pi/2$ no muestra

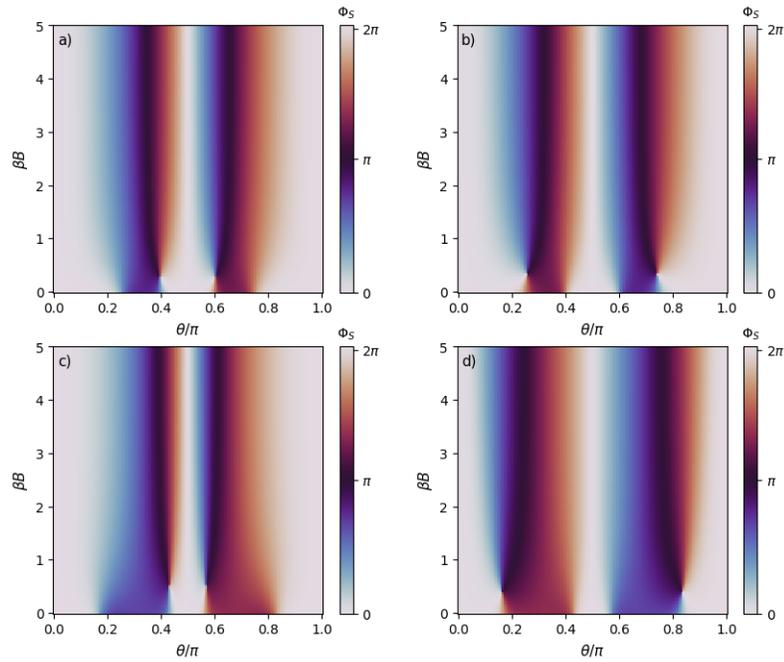


Figura 6.15: Se tiene la fase de Sjöqvist para el sistema modificado, donde (a) corresponde a un valor de $\alpha = -0.1$ y (b) a un valor $\alpha = 0.1$, mientras que en (c) se tiene un valor $\alpha = -0.5$ y en (d) $\alpha = 0.5$.

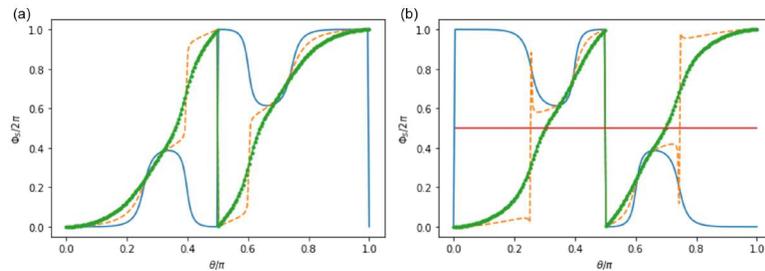


Figura 6.16: Fase de Sjöqvist para $\alpha = \pm 0.1$ en (a) y (b), respectivamente. La línea sólida azul corresponde al caso de $\beta B = 0.0001$, mientras que la línea naranja a trazos es con $\beta B = 0.3141$ y la línea verde punteada es para $\beta B = 1$.

ningún comportamiento que permita relacionar la transición en la fase de Uhlmann.

6.3.4. Métrica de Bures

Ya que $E_n^{z^2} = B\hbar y(\alpha, \theta)$, se tiene que

$$p_n = \frac{e^{-\beta B\hbar y(\alpha, \theta)}}{\text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}}]} = \frac{e^{-\beta B\hbar y(\alpha, \theta)}}{\text{Tr}[e^{-\beta e^{-i\phi \hat{S}_z} \hat{H}_0 e^{i\phi \hat{S}_z}]} = \frac{e^{-\beta B\hbar y(\alpha, \theta)}}{\text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}_0}]} \quad (6.67)$$

donde se utilizó que $e^{YXY^{-1}} = Ye^XY^{-1}$, con lo que

$$dp_n = \frac{\partial p_n}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial p_n}{\partial B} dB + \frac{\partial p_n}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial p_n}{\partial \alpha} d\alpha. \quad (6.68)$$

Por otro lado, dado que $|n_{z^2}(\phi, \theta, \alpha)\rangle$, de la ecuación (6.56) para ϕ y (6.55) para $\lambda = \theta$, α se llega a

$$\begin{aligned} & |\langle m_{z^2} | dn_{z^2} \rangle|^2 = \\ & \frac{1}{\hbar} |\langle \psi_m | \hat{S}_z | \psi_n \rangle|^2 d\phi^2 + \frac{|\langle \psi_m | (\partial_\theta \hat{H}_0) | \psi_n \rangle|^2}{(E_n^{z^2} - E_m^{z^2})^2} d\theta^2 + \frac{|\langle \psi_m | (\partial_\alpha \hat{H}_0) | \psi_n \rangle|^2}{(E_n^{z^2} - E_m^{z^2})^2} d\alpha^2 + \\ & 2 \left\{ \Re \left[\frac{i \langle \psi_m | \hat{S}_z | \psi_n \rangle \langle \psi_n | (\partial_\theta \hat{H}_0) | \psi_m \rangle}{\hbar (E_n^{z^2} - E_m^{z^2})} \right] d\phi d\theta + \Re \left[\frac{i \langle \psi_m | \hat{S}_z | \psi_n \rangle \langle \psi_n | (\partial_\alpha \hat{H}_0) | \psi_m \rangle}{\hbar (E_n^{z^2} - E_m^{z^2})} \right] d\phi d\alpha + \right. \\ & \left. \Re \left[\frac{\langle \psi_m | (\partial_\theta \hat{H}_0) | \psi_n \rangle \langle \psi_n | (\partial_\alpha \hat{H}_0) | \psi_m \rangle}{(E_n^{z^2} - E_m^{z^2})^2} \right] d\theta d\alpha \right\}. \quad (6.69) \end{aligned}$$

donde se tiene que $(\partial_\alpha \hat{H}_0) = BJ\hat{S}_z^2/\hbar$ y $(\partial_\theta \hat{H}_0) = B(\cos \theta \hat{S}_x - \sin \theta \hat{S}_z)$. Con esto, la métrica queda como

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \sum_n \frac{dp_n^2}{p_n} + \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{(p_m - p_n)^2}{p_n + p_m} |\langle m_{z^2} | dn_{z^2} \rangle|^2 = \frac{1}{4} \sum_n \frac{1}{p_n} \left[\left(\frac{\partial p_n}{\partial \beta} \right)^2 d\beta^2 + \right. \\ & 2 \left(\frac{\partial p_n}{\partial \beta} \right) \left(\frac{\partial p_n}{\partial B} \right) d\beta dB + 2 \left(\frac{\partial p_n}{\partial \beta} \right) \left(\frac{\partial p_n}{\partial \theta} \right) d\beta d\theta + 2 \left(\frac{\partial p_n}{\partial \beta} \right) \left(\frac{\partial p_n}{\partial \alpha} \right) d\beta d\alpha + \\ & \left. \left(\frac{\partial p_n}{\partial B} \right)^2 dB^2 + 2 \left(\frac{\partial p_n}{\partial B} \right) \left(\frac{\partial p_n}{\partial \theta} \right) dB d\theta + 2 \left(\frac{\partial p_n}{\partial B} \right) \left(\frac{\partial p_n}{\partial \alpha} \right) dB d\alpha \right] + \\ & \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{(p_m - p_n)^2}{p_n + p_m} \left[\frac{1}{\hbar} |\langle \psi_m | \hat{S}_z | \psi_n \rangle|^2 d\phi^2 + 2 \Re \left(\frac{i \langle \psi_m | \hat{S}_z | \psi_n \rangle \langle \psi_n | (\partial_\theta \hat{H}_0) | \psi_m \rangle}{\hbar (E_m^{z^2} - E_n^{z^2})} \right) d\phi d\theta + \right. \\ & \left. 2 \Re \left(\frac{i \langle \psi_m | \hat{S}_z | \psi_n \rangle \langle \psi_n | (\partial_\alpha \hat{H}_0) | \psi_m \rangle}{\hbar (E_m^{z^2} - E_n^{z^2})} \right) d\phi d\alpha \right] + \\ & \left[\frac{1}{4} \sum_n \frac{1}{p_n} \left(\frac{\partial p_n}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{(p_m - p_n)^2}{p_n + p_m} \frac{|\langle \psi_m | (\partial_\theta \hat{H}_0) | \psi_n \rangle|^2}{(E_n^{z^2} - E_m^{z^2})^2} \right] d\theta^2 + \end{aligned}$$

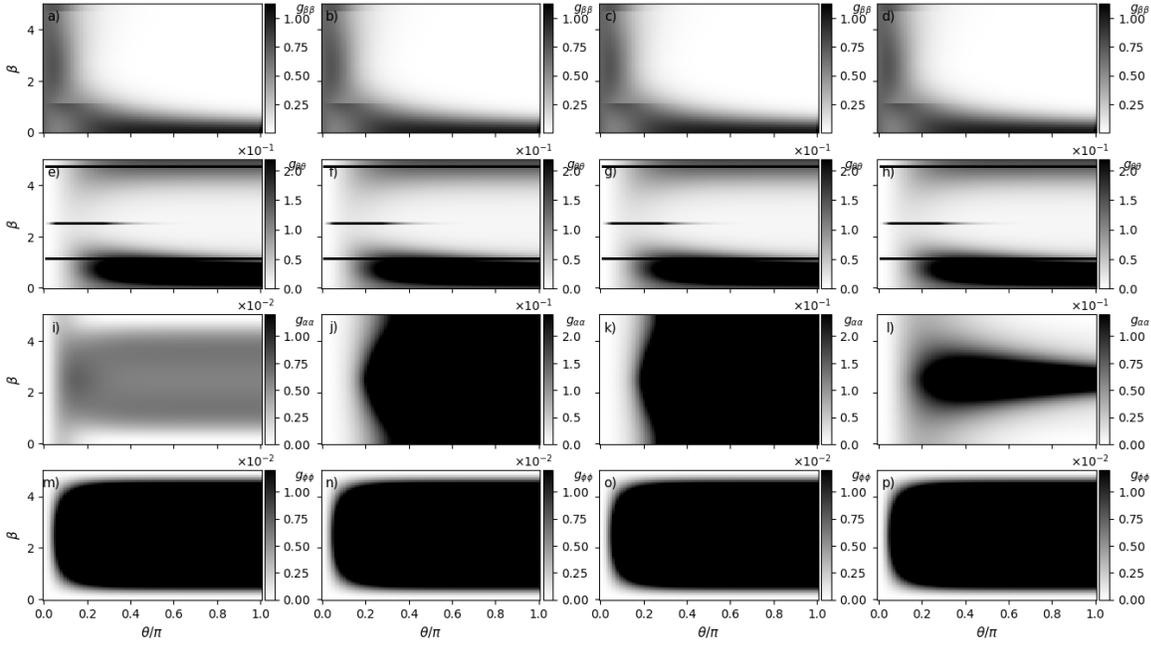


Figura 6.17: Evolución de los elementos de la métrica de Bures ordenados por filas. La primera fila es para $g_{\beta\beta}$, la segunda $g_{\theta\theta}$, la tercera corresponde a $g_{\alpha\alpha}$ y la cuarta es con $g_{\phi\phi}$. Cada columna es un valor de α diferente ordenado como $[-3, -0.12, 0.12, 3]$.

$$\begin{aligned}
 & \left[\frac{1}{4} \sum_n \frac{1}{p_n} \left(\frac{\partial p_n}{\partial \alpha} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{(p_m - p_n)^2}{p_n + p_m} \frac{|\langle \psi_m | (\partial_\alpha \hat{H}_0) | \psi_n \rangle|^2}{(E_n^{z^2} - E_m^{z^2})^2} \right] d\alpha^2 + \\
 & \left[\frac{1}{2} \sum_n \frac{1}{p_n} \left(\frac{\partial p_n}{\partial \theta} \right) \left(\frac{\partial p_n}{\partial \alpha} \right) + \sum_{n \neq m} \frac{(p_m - p_n)^2}{p_n + p_m} \Re \left(\frac{\langle \psi_m | (\partial_\theta \hat{H}_0) | \psi_n \rangle \langle \psi_n | (\partial_\alpha \hat{H}_0) | \psi_m \rangle}{(E_n^{z^2} - E_m^{z^2})^2} \right) \right] \times \\
 & \times d\theta d\alpha.
 \end{aligned} \tag{6.70}$$

Al calcular de manera numérica las expresiones para cada elemento de la métrica se obtuvo que, al igual que los casos anteriores, $g_{\phi\lambda} = 0$, para $\lambda = \theta, \alpha$.

En la figura 6.17 se muestra los elementos de la métrica de un solo parámetro respecto a diferentes valores de α . Los elementos $g_{\beta\beta}$, $g_{\theta\theta}$ y $g_{\phi\phi}$ parecen no cambiar mucho respecto a los valores α elegidos. En cambio, $g_{\alpha\alpha}$ muestra una similitud para α pequeños, mientras que su comportamiento cambia para valores $|\alpha| > 1$, donde el elemento anisotrópico domina, dependiendo de si α es positivo o negativo.

Los elementos de la métrica con parámetros cruzados, que son diferentes de cero, se muestran en la figura 6.19 para varios valores de α . Dichos términos parecen tener simetría respecto a α , donde $g_{\beta\theta}$ no muestra cambios respecto α .

De esto, se encontró que el término anisotrópico cambia algunos de los elementos, haciendo que el espacio deje de tener una simetría esférica, con radio dependiente de la temperatura, como se tiene en el caso isotrópico. A pesar de esto, los elementos de la métrica no muestran comportamientos singulares que se puedan identificar con alguna transición, topológica o cuántica.

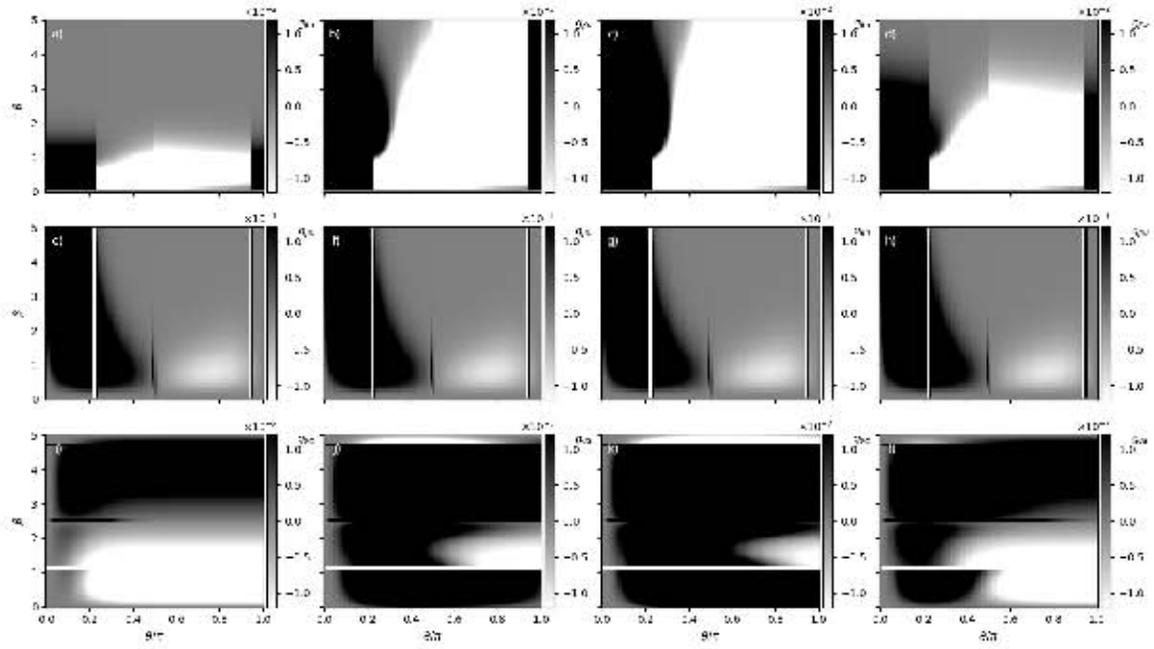


Figura 6.18: Evolución de los elementos de la métrica de Bures cruzados. Por filas es $[g_{\beta\alpha}, g_{\beta\theta}, g_{\theta,\alpha}]$, mientras que cada columna corresponde a un diferente α ordenado como $[-3, -0.12, 0.12, 3]$.

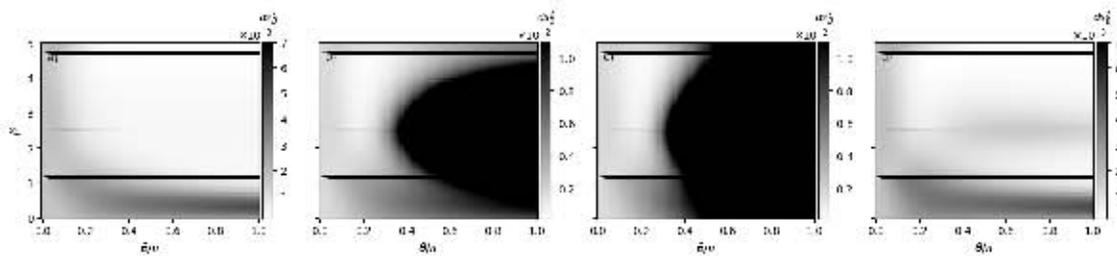


Figura 6.19: Elemento diferencial de la métrica de Bures para diferentes valores de α , ordenado como $[-3, -0.12, 0.12, 3]$.

Por último, en la figura 6.18 se tiene el elemento diferencial de la métrica para diferentes valores de α . Se muestra que α modifica el espacio de parámetros del sistema, con ciertas similitudes respecto a α positivo y negativo.

6.3.5. Fase de Uhlmann

Como se mostró anteriormente, usando la ecuación (6.56) y $|n_{z^2}\rangle = \exp(-i\phi\hat{S}_z/\hbar)|\psi_n\rangle$ la conexión de Uhlmann se puede escribir como

$$A = \frac{-i}{\hbar} e^{-i\phi\hat{S}_z/\hbar} A_0 e^{i\phi\hat{S}_z/\hbar} \quad (6.71)$$

con

$$A_0 = \sum_{n \neq m} \frac{(\sqrt{p_n} - \sqrt{p_m})^2}{p_n + p_m} \langle \psi_m | \hat{S}_z | \psi_n \rangle | \psi_m \rangle \langle \psi_n |.$$

Se tiene que la holonomía de Uhlmann U puede ser expresada sin dependencia de ϕ usando la transformación lineal $|\sigma\rangle = e^{-i(\phi-\phi_0)\hat{S}_z/\hbar} |\sigma'\rangle$ en la ecuación (4.54),

$$\frac{\hat{S}_z}{\hbar} |\sigma'\rangle + i \frac{\partial}{\partial \phi} |\sigma'\rangle = i e^{i(\phi-\phi_0)} \left(\frac{-i}{\hbar} e^{-i\phi\hat{S}_z/\hbar} A_0 e^{i\phi\hat{S}_z/\hbar} \right) e^{-i(\phi-\phi_0)} |\sigma'\rangle = \frac{1}{\hbar} e^{-i\phi_0\hat{S}_z/\hbar} A_0 e^{i\phi_0\hat{S}_z/\hbar} |\sigma'\rangle. \quad (6.72)$$

Con esto, y como A_0 es independiente de ϕ , la fase de Uhlmann es,

$$\Phi_U = \arg \left\{ \text{Tr} \left[\hat{\rho}_0 \exp \left[\frac{-2\pi i}{\hbar} (A_0 - \hat{S}_z) \right] \right] \right\}. \quad (6.73)$$

donde se puede definir el operador

$$\hat{R} = \frac{A_0 - \hat{S}_z}{r}, \quad (6.74)$$

tal que cumple con

$$\begin{aligned} \text{Tr} [A_0 - \hat{S}_z] &= \text{Tr}[A_0] - \text{Tr}[\hat{S}_z] = \text{Tr}[A_0] \\ &= \sum_{n \neq m} \frac{(\sqrt{p_n} + \sqrt{p_m})^2}{p_n + p_m} \langle \psi_m | \hat{S}_z | \psi_n \rangle \langle k_{z^2} | \psi_m \rangle \langle \psi_n | k_{z^2} \rangle = 0, \end{aligned} \quad (6.75)$$

donde r funciona como un factor tal que

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[\frac{(A_0 - \hat{S}_z)^2}{r^2 \hbar^2} \right] &= \frac{2}{r^2} \left\{ 1 + \text{Tr} \left[\frac{A_0^2}{2\hbar^2} \right] - \text{Tr} \left[\frac{A_0 \hat{S}_z}{\hbar^2} \right] \right\} = 2 \\ \therefore r &= \sqrt{1 + \text{Tr} \left[\frac{A_0^2}{2\hbar^2} \right] - \text{Tr} \left[\frac{A_0 \hat{S}_z}{\hbar^2} \right]} \end{aligned} \quad (6.76)$$

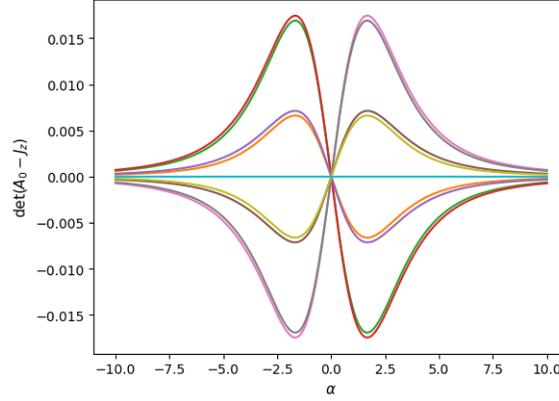


Figura 6.20: Valor numérico del determinante de A_0 para diferentes valores de θ , donde se tiene que $\det(A_0) = 0$, para cualquiera α , solo con $\theta = \{0, \pi/2, \pi\}$.

Desarrollando $\text{Tr}[A_0^2]$ en r se llega a,

$$r = \sqrt{1 - \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{n \neq m} \frac{(\sqrt{p_n} - \sqrt{p_m})^2}{p_n + p_m} \left[1 + \frac{2\sqrt{p_n p_m}}{p_n + p_m} \right] |\langle \psi_m | \hat{S}_z | \psi_n \rangle|^2}. \quad (6.77)$$

Para expresar la holonomía de Uhlmann como un desarrollo de las potencias de R se obtuvo el determinante de R de manera numérica, mostrado en la figura 6.20, de donde se tiene que $\det = 0$ solo cuando $\alpha = 0$ o para cualquiera α cuando $\theta = \{0, \pi/2, \pi\}$. Por lo tanto, del resultado obtenido por Curtright y Zhadachos [73], la holonomía de Uhlmann puede ser escrita como

$$\begin{aligned} & \exp \left[-2i\pi r \frac{A_0 - \hat{S}_z}{r\hbar} \right] \\ &= \sum_{k=0,1,2} \left\{ \frac{(A_0 - \hat{S}_z)^2}{r^2\hbar^2} + \frac{2}{\sqrt{3}} \sin \left(\gamma + \frac{2\pi k}{3} \right) \frac{A_0 - \hat{S}_z}{r\hbar} - \frac{1 + 2 \cos \left(2(\gamma + \frac{2\pi k}{3}) \right)}{3} \mathcal{I} \right\} \times \\ & \times \frac{\exp \left[-\frac{4}{\sqrt{3}} i\pi r \sin \left(\gamma + \frac{2\pi k}{3} \right) \right]}{1 - 2 \cos \left(2(\gamma + \frac{2\pi k}{3}) \right)} \end{aligned} \quad (6.78)$$

con $\gamma = \{\arccos[3\sqrt{3}\det(A_0/r\hbar - \hat{S}_z/r\hbar)] - \pi/2\}/3$.

De esto,

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_0 \exp \left[\frac{-2i\pi r (A_0 - \hat{S}_z)}{r\hbar} \right] \right\} = \\ & \sum_{k=0,1,2} \left\{ \frac{\text{Tr}[\hat{\rho}_0 (A_0 - \hat{S}_z)^2]}{r^2\hbar^2} + \frac{2}{\sqrt{3}} \sin \left(\gamma + \frac{2\pi k}{3} \right) \frac{\text{Tr}[\hat{\rho}_0 (A_0 - \hat{S}_z)]}{r\hbar} - \right. \\ & \left. \frac{1 + 2 \cos \left(2(\gamma + \frac{2\pi k}{3}) \right)}{3} \right\} \frac{\exp \left[-\frac{4}{\sqrt{3}} i\pi r \sin \left(\gamma + \frac{2\pi k}{3} \right) \right]}{1 - 2 \cos \left(2(\gamma + \frac{2\pi k}{3}) \right)}. \end{aligned} \quad (6.79)$$

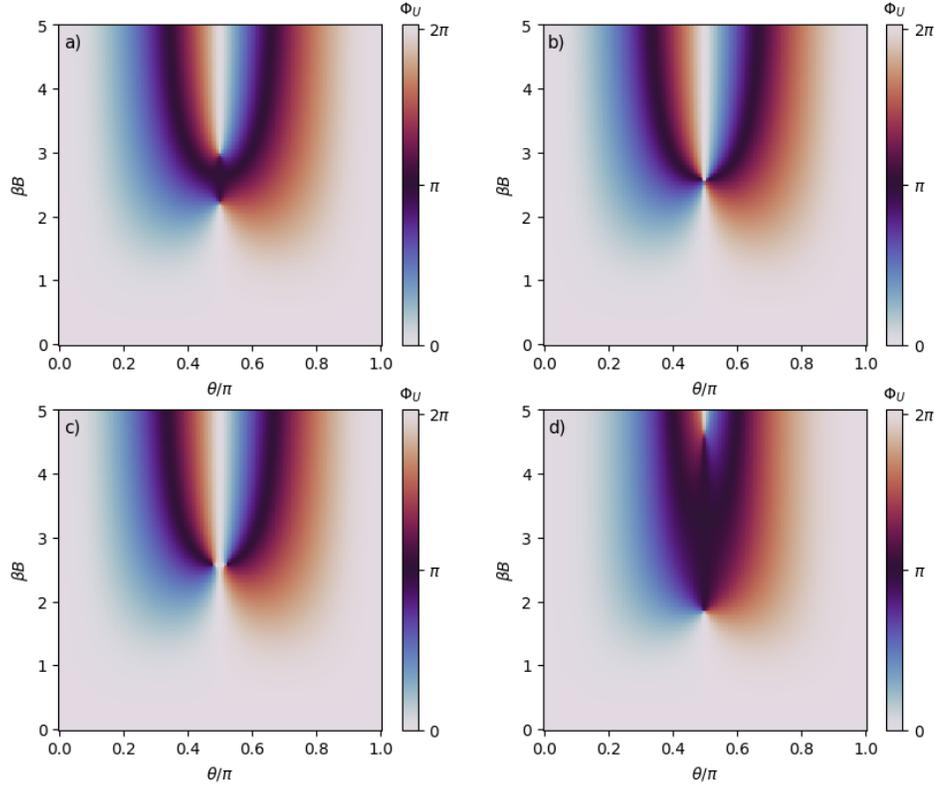


Figura 6.21: Fase de Uhlmann para el sistema de espín $s = 1$ modificado por un término $\alpha \hat{S}_z^2$ donde en (a) $\alpha = 0$, agregada solo por comparación, mientras que en (b) $\alpha = 0.044399$ y en (c) $\alpha = 0.05$. También se considera valores negativos en (d), con $\alpha = -0.5$.

De la forma de A_0 , se tiene que

$$A_0^\dagger = A_0, \quad (6.80)$$

por lo que $(A_0 - \hat{S}_z)$ es hermitiano. Con esto, la fase de Uhlmann puede ser expresada como

$$\Phi_U = \sum_{k=0,1,2} \arg \left\{ \left[\frac{\langle (A_0 - \hat{S}_z)^2 \rangle}{r^2 \hbar^2} + \frac{2 \sin(\gamma + \frac{2\pi k}{3}) \langle A_0 - \hat{S}_z \rangle}{\sqrt{3} r \hbar} - \frac{1 + 2 \cos(2(\gamma + \frac{2\pi k}{3}))}{3} \right] \frac{\exp \left[-\frac{4}{\sqrt{3}} i \pi r \sin(\gamma + \frac{2\pi k}{3}) \right]}{1 - 2 \cos(2(\gamma + \frac{2\pi k}{3}))} \right\} \quad (6.81)$$

donde $\langle \hat{C} \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho}_0 \hat{C}]$ es el valor esperado de \hat{C} respecto a $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}(\phi = 0)$.

En la figura 6.21 se expone la fase de Uhlmann para diferentes α 's. En (a) se presenta el caso de espín-1 de referencia, mientras que en (b) se tiene $\alpha = 0.0443$, que es el valor crítico de α encontrado en el caso $\theta = \pi/2$ (Ver sección anterior) donde la transición se da aproximadamente en un punto. (c) y (d) corresponden a los casos de α positivo y α negativos, respectivamente.

La fase de Uhlmann para valores negativos de α presentan un engrosamiento de la zona

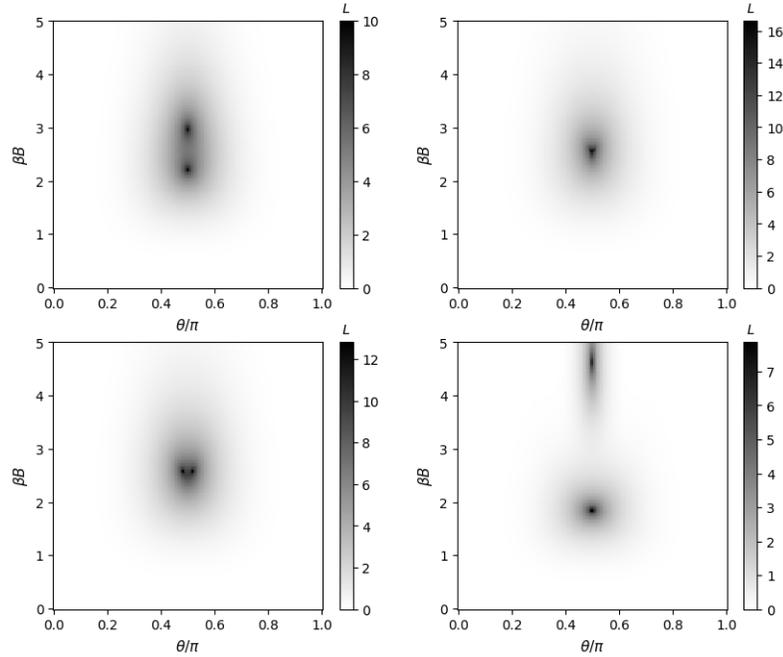


Figura 6.22: Longitud de Loschmidt para (a) $\alpha = 0$, (b) $\alpha = 0.0443$, (c) $\alpha = 0.05$ y (d) $\alpha = -0.5$.

para la cual $\Phi_U = 2\pi$, comportamiento ya esperado de lo que se sabe por el caso ya visto con $\theta = \pi/2$. Por esto, el caso en el que se centra la discusión en esta sección es para el caso de α positivos, en donde se puede ver en la figura 6.21 que fuera de $\theta = \pi/2$ la fase tiene un comportamiento peculiar.

Para continuar el análisis se obtuvo la longitud de Loschmidt del número complejo al que se le calcula su argumento en la fase de Uhlmann, la cual consiste en obtener la magnitud de dicho número complejo. Esto se hizo siguiendo la idea de [41], obteniendo así la figura 6.22, donde se muestran los mismos casos que en la figura 6.21. En cada caso se puede ver que la longitud de Loschmidt presenta picos donde se da la transición de fase. Resulta interesante que para el caso de $\alpha = 0.05$, donde ya no se tiene transición de fase, la longitud de Loschmidt sigue indicando los puntos donde la fase de Uhlmann cambia.

Para ver que es el comportamiento de la fase cerca de los puntos indicados por la longitud de Loschmidt se obtuvo la figura 6.23. En (a) se muestra el comportamiento de la fase para $\alpha = 2$, tal que el elemento cuadrupolar agregado domina sobre el Hamiltoniano de espín-1 ($\hat{n} \cdot \vec{S}$, con \hat{n} unitario). En este caso se puede ver que la fase ha casi desaparecido. En (b) se expone la longitud de Loschmidt para el mismo valor de α , el cual no presenta un pico, sino una zona con valor máximo de 0.047661, el cual es chico comparado con los picos mostrados en las anteriores gráficas.

Por otro lado, en la figura 6.23(c), con $\hbar = 1$, se muestra la fase de Uhlmann con $\alpha = 0.1$ donde la longitud de Loschmidt presenta picos, con el pico izquierdo en $\beta B \approx 2.575757$ y $\theta \approx 1.745329$. Usando el valor de βB se obtuvo la fase de Uhlmann respecto a θ (ver figura 6.23(d)) donde se ve que la fase no muestra un cambio de fase abrupto $0 \rightarrow \pi$, como lo hace para $\alpha \leq 0$, sino que el aumento es únicamente muy rápido.

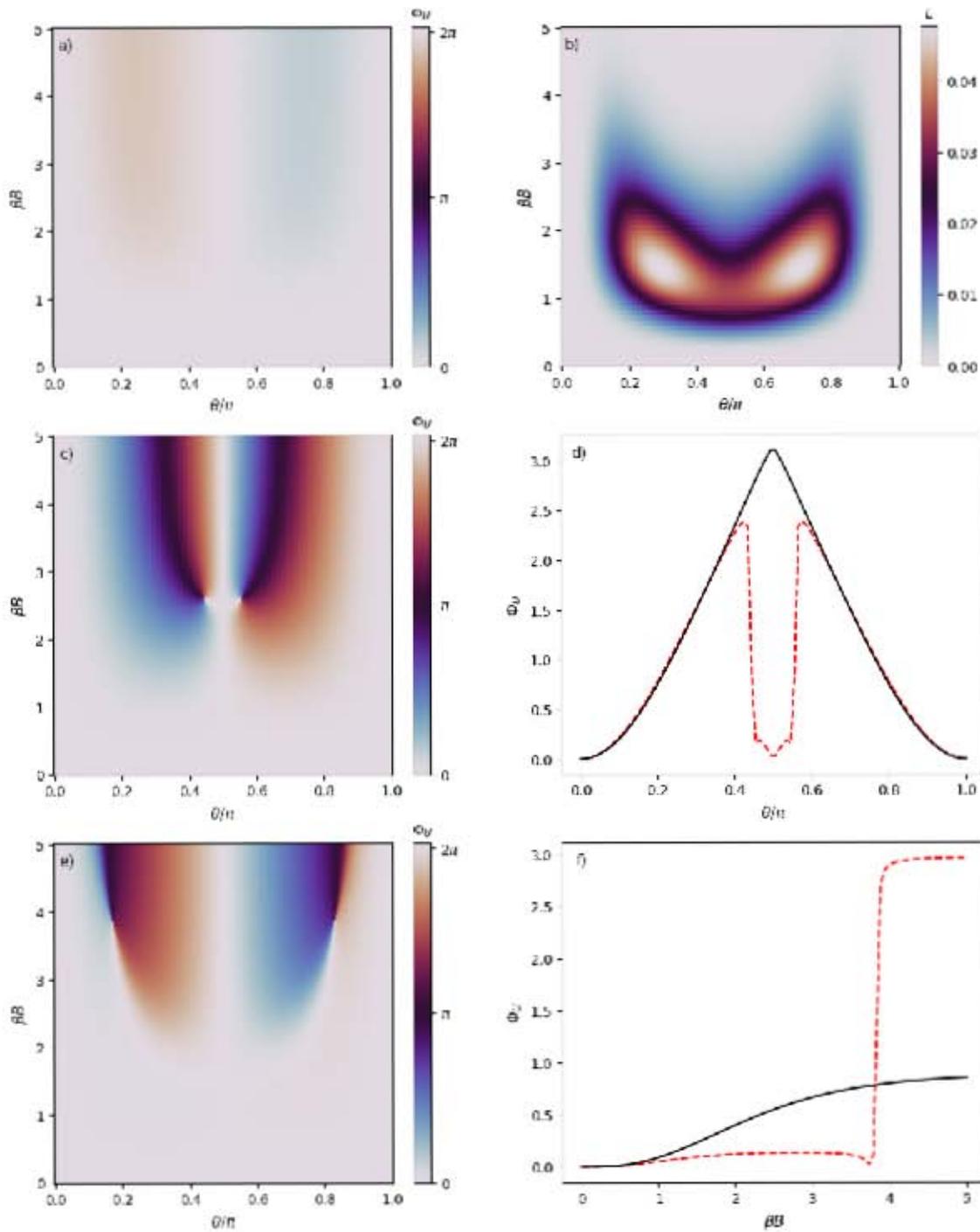


Figura 6.23: (a) y (b) representan el caso $\alpha = 2$ para la fase de Uhlmann y la longitud de Loschmidt, respectivamente. (c) y (d) es la fase de Uhlmann para $\alpha = 0.1$, donde en (d) se tiene para un βB fijo. (e) y (f) son la fase de Uhlmann para $\alpha = 0.8$, con el segundo para un θ fijo.

En la figura 6.23(e) se tiene la fase de Uhlmann para $\alpha = 0.8$, con un acercamiento al caso de la fase de Uhlmann para $\theta/\pi = 0.828282$ respecto a βB en (f), donde nuevamente se puede observar que el aumento de la fase es rápido, pero no existe un βB crítico.

Por lo tanto, los puntos mostrados por la longitud de Loschmidt para $\alpha > 0.0443$ no representan una transición de fase, ya que la fase únicamente sube de manera monótona y conforme $\alpha > 0.0443$ aumenta, la subida es más suave, hasta que el efecto se pierde para α grande, como se ve en la figura 6.23(a).

Capítulo 7

Conclusiones y Trabajo Futuro

El primer objetivo del presente trabajo fue el estudiar tres tipos de fases geométricas para una evolución adiabática de un sistema de espín-1 y para un modelo propuesto que rompa la simetría $SU(2)$ del Hamiltoniano de espín-1. Para esto, se consideró el Hamiltoniano de espín más un elemento cuadrupolar $\alpha\hat{S}_z^2$, esto es, un sistema en un campo anisótropo respecto a z .

Para estados puros se obtiene la fase de Berry y para el caso mixto la fase de Sjöqvist y la fase de Uhlmann.

En el presente trabajo, se demuestra que las transiciones de fase en la fase de Uhlmann para un sistema de espín-1 no tiene una correspondencia con las fases de Sjöqvist y de Berry¹.

Como se mencionó, en un inicio se pensó que el romper la simetría $SU(2)$ eliminaría la transición en la fase de Uhlmann; sin embargo, lo que se encontró es que la transición sigue existiendo cuando $\alpha \leq 0.0445$, aun cuando el término dominante del modelo propuesto es el cuadrupolar, lo que indica que la simetría $SU(2)$ no es responsable de la transición de fase. Por otro lado, cuando $\alpha > 0.0445$ la transición de fase en $\theta = \pi/2$ desaparece y conforme α crece, la fase de Uhlmann se vuelve cero para cualquier valor de θ y βB . En ambos casos se encontró una relación cualitativa con la aparición del primer y segundo estado excitado al aumentar la temperatura.

Durante el proceso de obtener la fase de Uhlmann en ambos sistemas, se logró expresar la fase en función de los valores esperados de $\hat{S}_x, \hat{S}_z, \hat{S}_x^2, \hat{S}_z^2, \{\hat{S}_x, \hat{S}_z\}$, donde para el caso $\theta = \pi/2$ se encontró que la transición de fase en ambos sistemas dependen únicamente de los valores esperados de $\hat{S}_x^2, \hat{S}_z^2, \{\hat{S}_x, \hat{S}_z\}$. Esto es de interés, ya que, aparte de que todos son observables, podría ser de ayuda en computación cuántica para obtener la fase de Uhlmann.

Por otro lado, se obtuvo la métrica de los estados puros (métrica de Fubini-Study) y la métrica de los estados mixtos (métrica de Bures) de ambos sistemas. Esto ya que la métrica describe la forma del espacio de parámetros alrededor de algún punto de dicho espacio,

¹De la relación de la anomalía de Schottky, o más específicamente de la aparición del primer estado excitado, con la primera transición se podría pensar en algún proceso de interferencia en las fases de Berry del estado base y el primer estado excitado, pero esta idea se viene abajo, ya que el mismo fenómeno ocurre en el caso espín-1/2, obligando a pensar en que cada caso tiene diferente tipo de interferencia, para lo cual no hay justificación.

por lo que se propuso como hipótesis que se podría encontrar una relación con la fase. Se logró expresar la fase de Uhlmann para espín-1 en función del elemento $g_{\beta\beta}$ de la métrica de Bures, que a su vez permitió relacionar el calor específico C_H con la transición de fase para $\theta = \pi/2$. Dicha relación se calificó como cualitativa, ya que el calor específico, proporcional al elemento de la métrica de Bures $g_{\beta\beta}$, tiene en ambos sistemas un máximo a temperaturas bajas, y lo más que se pudo hacer es relacionar el comportamiento de dicho máximo de C_H con la primera transición de fase que se tiene. A pesar de esto, no se encontró que ninguna de las métricas mostrara algún vínculo con las fases correspondientes. Esta última relación cualitativa resulta de importancia, ya que el máximo del calor específico se da gracias a lo que se conoce como anomalía de Schottky, la cual involucra la aparición del primer estado excitado como estado disponible conforme T aumenta. Con esto, y al analizar la evolución de dicho primer estado, se encontró que la primera transición está ligada a la aparición del primer estado excitado.

Trabajo Futuro

A partir de los resultados encontrados se pueden tomar varios caminos a seguir, uno de ellos es el seguir analizando las transiciones de fase en diferentes sistemas térmicos desde el punto de vista del calor específico y más concretamente como cambia dicha fase dependiendo de las probabilidades de los estados excitados del sistema.

También se podría insistir en el camino de la métrica al pensar en una métrica de un orden mayor² para incluir elementos que dependan de la segunda derivada de los parámetros del Hamiltoniano, lo que permitiría tener, por ejemplo, la derivada respecto a β de C_H .

Por otro lado, sería interesante analizar la desaparición de la transición para α positivo, tomando en cuenta que el coeficiente de anisotropía en z , D , permite dividir el tipo de anisotropía en dos. Si $D < 0$ ($\alpha < 0$), entonces es fácil encontrar al espín en dirección \hat{S}_z , y si $D > 0$ es más probable encontrar al espín en el plano $x - y$.

²Al obtener ambas métricas (FS y Bures) se realizó un desarrollo a primer orden.

Apéndices

Apéndice A

Fase de Uhlmann en su forma integral

Del artículo de Viyuela se tiene que

$$\frac{d\hat{V}(t)}{dt} = A[r(t)]V(t) \quad (\text{A.1})$$

donde $V = \mathbb{P} \exp[\int_{r_0}^r A(r')dr']$, con la conexión de Uhlmann dada por

$$A = d\hat{V}\hat{V}^\dagger = \left[\frac{d}{ds} \left(\sqrt{\hat{\rho}} + sd\sqrt{\hat{\rho}} \right)^{-1} \right] \Big|_{s=0} \sqrt{\hat{\rho}} + \hat{\rho}^{-1} \left[\frac{d}{ds} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\rho} + sd\hat{\rho})\sqrt{\hat{\rho}}} \right] \Big|_{s=0}; \quad (\text{A.2})$$

donde el primer término estará dado por

$$\left[\frac{d}{ds} \left(\sqrt{\hat{\rho}} + sd\sqrt{\hat{\rho}} \right)^{-1} \right] \Big|_{s=0} \sqrt{\hat{\rho}} = -\sqrt{\hat{\rho}^{-1}}d\sqrt{\hat{\rho}}, \quad (\text{A.3})$$

y el segundo término estrada dado por la derivada de $K(s) = \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\rho} + sd\hat{\rho})\sqrt{\hat{\rho}}}$ evaluada en $s = 0$, lo cual estará dada por

$$K'(0)K(0) + K(0)K'(0) = K'(0)\hat{\rho} + \hat{\rho}K'(0) = \sqrt{\hat{\rho}}d\hat{\rho}\sqrt{\hat{\rho}} \quad (\text{A.4})$$

que tiene la forma de una ecuación de Lyapunov, por lo que el segundo término estará dado por

$$K'(0) = \left[\frac{d}{ds} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\rho} + sd\hat{\rho})\sqrt{\hat{\rho}}} \right] \Big|_{s=0} = \int_0^\infty e^{-\hat{\rho}\tau} \sqrt{\hat{\rho}}d\hat{\rho}\sqrt{\hat{\rho}}e^{-\hat{\rho}\tau} d\tau. \quad (\text{A.5})$$

Por lo tanto, la conexión de Uhlmann estará dada por

$$A = -\sqrt{\hat{\rho}^{-1}}d\sqrt{\hat{\rho}} + \hat{\rho}^{-1} \int_0^\infty e^{-\hat{\rho}\tau} \sqrt{\hat{\rho}}d\hat{\rho}\sqrt{\hat{\rho}}e^{-\hat{\rho}\tau} d\tau \quad (\text{A.6})$$

que al proyectar en la base de $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$, y $f(\hat{\rho}) = \sum_i f(p_i) |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$, se llega a que

$$\langle \psi_i | A | \psi_j \rangle = \frac{-1}{\sqrt{p_i}} \langle \psi_i | d\sqrt{\hat{\rho}} | \psi_j \rangle + \frac{1}{p_i} \int_0^\infty e^{-p_i\tau} \sqrt{p_i} \langle \psi_i | d\hat{\rho} | \psi_j \rangle \sqrt{p_j} e^{-p_j\tau} d\tau$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{-1}{\sqrt{p_i}} \langle \psi_i | d\sqrt{\hat{\rho}} | \psi_j \rangle + \frac{\sqrt{p_j}}{\sqrt{p_i}} \langle \psi_i | d\hat{\rho} | \psi_j \rangle \sqrt{p_j} \int_0^\infty e^{-(p_i+p_j)\tau} d\tau \\
 &= \left(-1 + \frac{\sqrt{p_j}(\sqrt{p_i} + \sqrt{p_j})}{p_i + p_j} \right) \frac{1}{\sqrt{p_i}} \langle \psi_i | d\sqrt{\hat{\rho}} | \psi_j \rangle = \left(\frac{\sqrt{p_i} - \sqrt{p_j}}{p_i + p_j} \right) \langle \psi_i | d\sqrt{\hat{\rho}} | \psi_j \rangle,
 \end{aligned}$$

que es el resultado obtenido por Viyuela, el cual se puede reescribir como,

$$A = \sum_{ij} |\psi_i\rangle \frac{\langle \psi_i | [d\sqrt{\hat{\rho}}, \sqrt{\hat{\rho}}] | \psi_j \rangle}{p_i + p_j} \langle \psi_j |. \quad (\text{A.7})$$

Apéndice B

Fase de Uhlmann para espín s mediante valores esperados

De [82] se tiene que una matriz exponencial donde su argumento matricial tiene la forma $\hat{n} \cdot \vec{S}$, con $|\hat{n}| = 1$ y $\vec{S} = \{\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z\}$ las matrices de espín s , se puede expresar como un polinomio matricial de orden s dado por

$$e^{i\gamma\hat{n}\cdot\vec{S}} = \sum_{k=0}^{2j} \frac{c_k(\gamma)}{k!} \left[2i\hat{n} \cdot \vec{S} \sin(\gamma/2) \right]^k, \quad (\text{B.1})$$

donde se definió usando la función piso

$$c_k(\gamma) = [\cos(\theta/2)]^{\epsilon_k} \text{Trunc}_{\lfloor s-k/2 \rfloor} \left\{ \frac{[\arcsin(\sqrt{x})/\sqrt{x}]^k}{(\sqrt{1-x})^{\epsilon_k}} \right\},$$

con $x = \sin^2(\theta/2)$, y $\epsilon_k = [1 - (-1)^{2s-k}]/2$. Aquí la función Trunc_n se refiere a truncar el desarrollo de Taylor a orden n .

Tomando la Fase de Uhlmann obtenida por Diego *et al.* en [40] para una partícula de espín j en un campo magnético B , donde $\Phi_U = \arg\{\text{Tr}[\hat{\rho}_0 \hat{U}]\}$ con

$$\hat{U} = (-1)^{2j} \exp \left[-2\pi i R \hat{n}' \cdot \vec{S} \right], \quad (\text{B.2})$$

para $R = \sqrt{1 + \eta^2 - 2\eta \sin \theta}$ y un vector

$$\hat{n}' = \frac{1}{R} \begin{pmatrix} -\eta \cos \theta \\ 0 \\ \eta \sin \theta - 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

el cual cumple con $|\hat{n}'| = 1$, y de igual manera $\eta = \sin \theta [1 - \text{sech}(\beta B \hbar / 2)]$. Dicha expresión puede ser expresada mediante el desarrollo propuesto como

$$\hat{U} = (-1)^{2j} \sum_{k=0}^{2j} \frac{c_k(-2\pi R)}{k!} \left[-2i\hat{n}' \cdot \vec{S} \sin(\pi R) \right]^k, \quad (\text{B.4})$$

con

$$c_k(-2\pi R) = [\cos(\pi R)]^{\epsilon_k} \text{Trunc}_{\lfloor j-k/2 \rfloor} \left\{ \frac{[\arcsin(\sqrt{x})/\sqrt{x}]^k}{(\sqrt{1-x})^{\epsilon_k}} \right\}$$

y $x = \sin^2(\pi R)$, por lo que la fase de Uhlmann puede ser escrita, considerando que $(\hat{n}' \cdot \vec{S})^\dagger = \hat{n}' \cdot \vec{S}^1$, como

$$\Phi_U = \arg \left\{ \sum_{k=0}^{2j} (-1)^{2j+k} [2i \sin(\pi R)]^k \frac{c_k(-2\pi R)}{k!} \langle (\hat{n}' \cdot \vec{S})^k \rangle \right\}. \quad (\text{B.5})$$

Escribir la fase de Uhlmann como en la ecuación (B.5), permite eliminar casi por completo la dependencia de la temperatura substituyéndola por una combinación lineal de valores esperados de observables, concretamente diferentes combinaciones de productos de \hat{S}_x y \hat{S}_z . La única dependencia explícita de T queda expresada en R , pero tal como se vio en el caso $s = 1/2$ y $s = 1$, se podría buscar la forma de expresar $\text{sech}(x)$ en términos de $\text{Var}(M)$ y, por tanto, expresar a R en función de la variación de la capacidad calorífica. En el límite $T \rightarrow \infty$ se tiene que $R = 1$ y, por tanto, $\sin(\pi R) = 0$ así como $\cos(\pi R) = -1$, por lo que (B.5) se reduce a

$$\Phi_U(T \rightarrow \infty) = \arg \{ (-1)^{2j} c_0(-2\pi) \} = \arg \{ (-1)^{2j+\epsilon_0} \} = 0, \quad (\text{B.6})$$

donde se consideró que al evaluar $\sin^2(\pi \cdot 1) = 0$ en la expansión de Taylor truncada resultante en $c_0(-2\pi)$ entonces, para cualquiera s , la función truncada es $\text{Trunc}_{\lfloor s \rfloor} (1/\sqrt{1-x}^\epsilon = 1$. También se tomó en cuenta que si $s = 1/2, 3/2, \dots$ entonces $\epsilon_0 = 1$ mientras que para $s = 1, 2, \dots$ se tiene que $\epsilon_0 = 0$.

En el otro extremo se tiene que $T \rightarrow 0$, por lo que $\eta = \sin \theta$ y $R = |\cos \theta|$, con lo que

$$\Phi_U(T \rightarrow 0) = \arg \left\{ \sum_{k=0}^{2j} (-1)^{2j+k} [2i \sin(\pi |\cos \theta|)]^k \frac{c_k(-2\pi |\cos \theta|)}{k!} \langle (\hat{n}' \cdot \vec{S})^k \rangle \right\}, \quad (\text{B.7})$$

que para el caso específico $\theta = \pi/2$, se tiene que $\sin(\pi |\cos(\pi/2)|) = 0$ por lo que

$$\Phi_U(T = 0) = \arg \{ (-1)^{2j} c_0(0) \} = \begin{cases} \pi & \text{si } s = 1/2, 3/2, \dots \\ 0 & \text{si } s = 1, 2, \dots \end{cases}, \quad (\text{B.8})$$

ya que $c_0(0) = 1$.

¹Como se vio para espín $s = 1$ $\{R|R \in \mathcal{R} \forall \theta \in [0, 2\pi] \text{ y } \beta B \hbar \in \mathcal{R}\}$.

Apéndice C

Elementos de la métrica de Bures y fase de Uhlmann del sistema modificado con $\theta = \pi/2$

Las expresiones faltantes respecto a la métrica están dadas como

$$g_{\alpha\alpha} = \frac{e^{\frac{1}{2}(\alpha - \sqrt{\alpha^2 + 4})\beta B\hbar}}{8(\alpha^2 + 4)^2 \left(2e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar\right) + 1\right)^2} \times \left\{ \left[\alpha^2 - \sqrt{\alpha^2 + 4}\alpha + 2\alpha^2 e^{\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar} + (\alpha^2 + \sqrt{\alpha^2 + 4}\alpha + 2) e^{\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar} + 2 \right] \times \left(\alpha^2 + 4 \right) \beta^2 B^2 \hbar^2 + \frac{8 \left(e^{\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar} - 1 \right)^2 \left(2e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar\right) + 1 \right)}{e^{\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar} + 1} \right\}$$

$$g_{\alpha\beta B} = \frac{B^2 \hbar^2 e^{\frac{1}{2}(\alpha - 2\sqrt{\alpha^2 + 4})\beta B\hbar}}{2\sqrt{\alpha^2 + 4} \left(2e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar\right) + 1\right)^3} \times \left\{ e^{\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}(2\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \right\} \times \left\{ -\alpha^2 + \sqrt{\alpha^2 + 4}\alpha + 2\sqrt{\alpha^2 + 4}\alpha e^{\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar} + (\alpha^2 + \sqrt{\alpha^2 + 4}\alpha + 2) e^{\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar} - 2 \right\}.$$

Por otro lado, el elemento de la fase de Uhlmann está dado por la expresión,

$$a_{11} = \left[\frac{e^{-\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar}}{2(\alpha^2 + 4) \left(e^{\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}(2\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \right)} \right] \times \left[\frac{1}{\left(e^{\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \right) \left(e^{\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar} + 1 \right)} \right] \times \left\{ \left[e^{\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar} + e^{(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar} + e^{\alpha\beta B\hbar} \right] \left[\alpha \left(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha \right) + 4 \right] \times \left[e^{\sqrt{\alpha^2 + 4}\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar} + e^{(\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar} + e^{(2\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar} + 2e^{\frac{1}{2}(3\sqrt{\alpha^2 + 4} + \alpha)\beta B\hbar} \right] \right\} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \left[\sqrt{\frac{e^{\alpha\beta B\hbar}}{e^{\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2+4}+\alpha)\beta B\hbar} + e^{(\sqrt{\alpha^2+4}+\alpha)\beta B\hbar} + e^{\alpha\beta B\hbar}}} - \sqrt{\frac{1}{2e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar\right) + 1}} \right]^2 - \\
 & \left[e^{\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2+4}-\alpha)\beta B\hbar} + 1 \right] \left[\alpha \left(\sqrt{\alpha^2+4} - \alpha \right) - 4 \right] \times \\
 & \left[e^{(\sqrt{\alpha^2+4}+\alpha)\beta B\hbar} + e^{\frac{3}{2}(\sqrt{\alpha^2+4}+\alpha)\beta B\hbar} + e^{(\sqrt{\alpha^2+4}+2\alpha)\beta B\hbar} + 2e^{\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2+4}+3\alpha)\beta B\hbar} + e^{2\alpha\beta B\hbar} \right] \times \\
 & \left. \left[\sqrt{\frac{e^{\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar}}{e^{\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar} + e^{\frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2+4}-\alpha)\beta B\hbar} + 1}} - \sqrt{\frac{1}{2e^{\frac{1}{2}\alpha\beta B\hbar} \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2+4}\beta B\hbar\right) + 1}} \right]^2 \right\} \quad (C.1)
 \end{aligned}$$

Bibliografía

- [1] Michael Victor Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 392(1802):45–57, 1984.
- [2] Frank Wilczek y A. Zee. Appearance of gauge structure in simple dynamical systems. *Phys. Rev. Lett.*, 52:2111–2114, Jun 1984.
- [3] Y. Aharonov y J. Anandan. Phase change during a cyclic quantum evolution. *Phys. Rev. Lett.*, 58:1593–1596, Abr 1987.
- [4] Eliahu Cohen, Hugo Larocque, Frédéric Bouchard, Farshad Nejdassattari, Yuval Gefen, y Ebrahim Karimi. Geometric phase from aharonov–bohm to pancharatnam–berry and beyond. *Nature Reviews Physics*, 1(7):437–449, Jul 2019.
- [5] Erik Sjöqvist, Arun K. Pati, Artur Ekert, Jeeva S. Anandan, Marie Ericsson, Daniel K. L. Oi, y Vlatko Vedral. Geometric phases for mixed states in interferometry. *Phys. Rev. Lett.*, 85:2845–2849, Oct 2000.
- [6] Armin Uhlmann. Parallel transport and “quantum holonomy” along density operators. *Reports on Mathematical Physics*, 24(2):229–240, 1986.
- [7] D. Vanderbilt. *Berry Phases in Electronic Structure Theory: Electric Polarization, Orbital Magnetization and Topological Insulators*. Título collana. Cambridge University Press, 2018.
- [8] M. Z. Hasan y C. L. Kane. Colloquium: Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, 82:3045–3067, nov 2010.
- [9] Xiao-Liang Qi y Shou-Cheng Zhang. Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 83:1057–1110, Oct 2011.
- [10] Erik Sjöqvist. Geometric phases in quantum information. *International Journal of Quantum Chemistry*, 115(19):1311–1326, 2015.
- [11] Paolo Zanardi y Mario Rasetti. Holonomic quantum computation. *Physics Letters A*, 264(2):94–99, 1999.
- [12] Shi-Liang Zhu y Z. D. Wang. Implementation of universal quantum gates based on nonadiabatic geometric phases. *Phys. Rev. Lett.*, 89:097902, Ago 2002.
- [13] VLATKO VEDRAL. Geometric phases and topological quantum computation. *International Journal of Quantum Information*, 01(01):1–23, 2003.

- [14] Jonathan A. Jones, Vlatko Vedral, Artur Ekert, y Giuseppe Castagnoli. Geometric quantum computation using nuclear magnetic resonance. *Nature*, 403(6772):869–871, Feb 2000.
- [15] S.C. Tiwari. Geometric phase in optics. *Journal of Modern Optics*, 39(5):1097–1105, 1992.
- [16] Chandroth Pannian Jisha, Stefan Nolte, y Alessandro Alberucci. Geometric phase in optics: From wavefront manipulation to waveguiding. *Laser & Photonics Reviews*, 15(10):2100003, 2021.
- [17] Xin Wang, Xu-Yang Hou, Zheng Zhou, Hao Guo, y Chih-Chun Chien. Uhlmann phase of coherent states and the uhlmann-berry correspondence. *arXiv*, 2022.
- [18] O. Viyuela, A. Rivas, y M. A. Martin-Delgado. Two-dimensional density-matrix topological fermionic phases: Topological uhlmann numbers. *Phys. Rev. Lett.*, 113:076408, Ago 2014.
- [19] Ye Zhang, Aixin Pi, Yan He, y Chih-Chun Chien. Comparison of finite-temperature topological indicators based on uhlmann connection. *Phys. Rev. B*, 104:165417, Oct 2021.
- [20] Hao Guo, Xu-Yang Hou, Yan He, y Chih-Chun Chien. Dynamic process and uhlmann process: Incompatibility and dynamic phase of mixed quantum states. *Phys. Rev. B*, 101:104310, Mar 2020.
- [21] J. Villavicencio, E. Cota, F. Rojas, Jesús A. Maytorena, y D. Morachis Galindo. Uhlmann phase in composite systems with entanglement. *Phys. Rev. A*, 104:042204, Oct 2021.
- [22] W. P. Su, J. R. Schrieffer, y A. J. Heeger. Solitons in polyacetylene. *Phys. Rev. Lett.*, 42:1698–1701, Jun 1979.
- [23] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, y M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49:405–408, ago 1982.
- [24] B. Andrei Bernevig y Shou-Cheng Zhang. Quantum spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 96:106802, Mar 2006.
- [25] Leonardo A. Navarro-Labastida, Francisco A. Domínguez-Serna, y F. Rojas. Geometrical phases and entanglement in real space for 1d ssh topological insulator: effects of first and second neighbor-hoppings interaction. *arXiv*, 2021.
- [26] A. F. Morpurgo, J. P. Heida, T. M. Klapwijk, B. J. van Wees, y G. Borghs. Ensemble-average spectrum of aharonov-bohm conductance oscillations: Evidence for spin-orbit-induced berry's phase. *Phys. Rev. Lett.*, 80:1050–1053, Feb 1998.
- [27] Alioscia Hamma. Berry phases and quantum phase transitions, 2006.
- [28] Angelo Carollo, Davide Valenti, y Bernardo Spagnolo. Geometry of quantum phase transitions. *Physics Reports*, 838:1–72, ene 2020.
- [29] Chandroth Pannian Jisha, Stefan Nolte, y Alessandro Alberucci. Geometric phase in optics: From wavefront manipulation to waveguiding. *Laser & Photonics Reviews*, 15(10):2100003, 2021.
- [30] Barry Bradlyn y Mikel Iraola. Lecture notes on berry phases and topology. *SciPost Physics Lecture Notes*, may 2022.

- [31] Di Xiao, Ming-Che Chang, y Qian Niu. Berry phase effects on electronic properties. *Rev. Mod. Phys.*, 82:1959–2007, Jul 2010.
- [32] Marie Ericsson, Erik Sjöqvist, Johan Brännlund, Daniel K. L. Oi, y Arun K. Pati. Generalization of the geometric phase to completely positive maps. *Phys. Rev. A*, 67:020101, feb 2003.
- [33] J. G. Peixoto de Faria, A. F. R. de Toledo Piza, y M. C. Nemes. Phases of quantum states in completely positive non-unitary evolution. *iopscience*, 62(6):782, jun 2003.
- [34] Ole Andersson, Ingemar Bengtsson, Marie Ericsson, y Erik Sjöqvist. Geometric phases for mixed states of the kitaev chain. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 374(2068):20150231, 2016.
- [35] Jiangfeng Du, Ping Zou, Mingjun Shi, Leong Chuan Kwek, Jian-Wei Pan, C. H. Oh, Artur Ekert, Daniel K. L. Oi, y Marie Ericsson. Observation of geometric phases for mixed states using nmr interferometry. *Phys. Rev. Lett.*, 91:100403, Sep 2003.
- [36] Jürgen Klepp, Stephan Sponar, Stefan Filipp, Matthias Lettner, Gerald Badurek, y Yuji Hasegawa. Observation of nonadditive mixed-state phases with polarized neutrons. *Phys. Rev. Lett.*, 101:150404, Oct 2008.
- [37] O. Viyuela, A. Rivas, S. Gasparinetti, A. Wallraff, S. Filipp, y M. A. Martin-Delgado. Observation of topological uhlmann phases with superconducting qubits. *npj Quantum Information*, 4(1):10, Feb 2018.
- [38] O. Viyuela, A. Rivas, y M. A. Martin-Delgado. Symmetry-protected topological phases at finite temperature. *2D Materials*, 2(3), 2015.
- [39] J. Villavicencio, E. Cota, F. Rojas, J. A. Maytorena, D. Morachis Galindo, y F. Nieto-Guadarrama. Thermal uhlmann phase in a locally driven two-spin system. *arXiv*, 2023.
- [40] D. Morachis Galindo, F. Rojas, y Jesús A. Maytorena. Topological Uhlmann phase transitions for a spin- j particle in a magnetic field. *Physical Review A*, 103(4):1–6, 2021.
- [41] Xu Yang Hou, Hao Guo, y Chih Chun Chien. Finite-temperature topological phase transitions of spin- systems in Uhlmann processes: General formalism and experimental protocols. *Physical Review A*, 104(2):1–14, 2021.
- [42] Xu-Yang Hou, Xin Wang, Zheng Zhou, Hao Guo, y Chih-Chun Chien. Geometric phases of mixed quantum states: A comparative study of interferometric and uhlmann phases, 2023.
- [43] G. Fubini. *Sulle metriche definite da una forma hermitiana: nota*. Office graf. C. Ferrari, 1904.
- [44] E. Study. Kürzeste wege im komplexen gebiet. *SpringerLink*, 1905.
- [45] Donald Bures. An extension of kakutani's theorem on infinite product measures to the tensor product of semifinite w^* -algebras. *Trans. Amer. Math. Soc*, 135:199–212, 1969.
- [46] Paolo Facchi, Ravi Kulkarni, V.I. Man'ko, Giuseppe Marmo, E.C.G. Sudarshan, y Franco Ventriglia. Classical and quantum fisher information in the geometrical formulation of quantum mechanics. *Physics Letters A*, 374(48):4801–4803, nov 2010.

- [47] Dominik Šafránek. Discontinuities of the quantum fisher information and the bures metric. *Physical Review A*, 95(5), may 2017.
- [48] Samuel L. Braunstein y Carlton M. Caves. Statistical distance and the geometry of quantum states. *Phys. Rev. Lett.*, 72:3439–3443, May 1994.
- [49] J Dittmann. Explicit formulae for the bures metric. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 32(14):2663, abr 1999.
- [50] Weimin Peng, Huifang Deng, y Aihong Chen. Using hellinger and bures metrics to construct two-dimensional quantum metric space for weather data fusion. *Information Fusion*, 55:199–206, 2020.
- [51] P. Zanardi, P. Giorda, y M. Cozzini. The differential information-geometry of quantum phase transitions, 2007.
- [52] Paolo Zanardi, Lorenzo Campos Venuti, y Paolo Giorda. Bures metric over thermal state manifolds and quantum criticality. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 76(6):1–9, 2007.
- [53] Armin Uhlmann. *The Metric of Bures and the Geometric Phase*, pages 267–274. Springer Netherlands, Dordrecht, 1992.
- [54] Lorenzo Campos Venuti y Paolo Zanardi. Quantum critical scaling of the geometric tensors. *Phys. Rev. Lett.*, 99:095701, Aug 2007.
- [55] Tamás Tóth. Quadrupolar ordering in two-dimensional spin-one systems. 01 2011.
- [56] Dariusz Chruściński y Andrzej Jamiołkowski. *Geometric Phases in Classical and Quantum Mechanics*. Birkhäuser Boston, MA, 2004.
- [57] Hoshang Heydari. Geometric formulation of quantum mechanics. *arXiv*, 2015.
- [58] R.K. Pathria y P.D. Beale. *Statistical Mechanics*. Academic Press. Butterworth-Heinemann, 2011.
- [59] Christopher Eltschka, Marcus Huber, Simon Morelli, y Jens Siewert. The shape of higher-dimensional state space: Bloch-ball analog for a qutrit. *Quantum*, 5:485, jun 2021.
- [60] Wikipedia. Bloch sphere — Wikipedia, the free encyclopedia, 2022. [Online; accessed 16-December-2022].
- [61] Paweł Kurzyński, Adrian Kołodziejcki, Wiesław Laskowski, y Marcin Markiewicz. Three-dimensional visualization of a qutrit. *Physical Review A*, 93(6), jun 2016.
- [62] Murray Gell-Mann. Symmetries of baryons and mesons. *Phys. Rev.*, 125:1067–1084, Feb 1962.
- [63] Swapan Rana, Preeti Parashar, y Maciej Lewenstein. Trace-distance measure of coherence. *Phys. Rev. A*, 93:012110, ene 2016.
- [64] Karol Zyczkowski y Hans-Jürgen Sommers. Hilbert–schmidt volume of the set of mixed quantum states. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(39):10115, sep 2003.

- [65] Ming-Liang Hu, Xueyuan Hu, Jieci Wang, Yi Peng, Yu-Ran Zhang, y Heng Fan. Quantum coherence and geometric quantum discord. *Physics Reports*, 762-764:1–100, nov 2018.
- [66] Ran Cheng. Quantum geometric tensor (fubini-study metric) in simple quantum system: A pedagogical introduction. *arXiv*, 2013.
- [67] Jurgen Audretsch. *Entangled Systems-New Directions in Quantum Physics*. Wiley-VCH, 2006.
- [68] B. Andrei Bernevig. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, Princeton, 2013.
- [69] Ole Andersson, Ingemar Bengtsson, Marie Ericsson, y Erik Sjöqvist. Geometric phases for mixed states of the kitaev chain. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 374(2068):20150231, 2016.
- [70] Nicola Manini. Berry's geometric phase: a review, Abr 2019. (Accessed on 05/29/2023).
- [71] A Tari. *The Specific Heat of Matter at Low Temperatures*. PUBLISHED BY IMPERIAL COLLEGE PRESS AND DISTRIBUTED BY WORLD SCIENTIFIC PUBLISHING CO., 2003.
- [72] Mariano de Souza, Ricardo Paupitz, Antonio Seridonio, y Roberto E. Lagos. Specific heat anomalies in solids described by a multilevel model. *Brazilian Journal of Physics*, 46(2):206–212, Abr 2016.
- [73] Thomas L. Curtright y Cosmas K. Zachos. Elementary results for the fundamental representation of $su(3)$. *Reports on Mathematical Physics*, 76(3):401–404, 2015.
- [74] Albert Messiah. *Quantum Mechanics*. Dover Publications, Mineola, New York, 2014.
- [75] Hadeel Moustafa. Single-ion magnetic anisotropy. 07 2016.
- [76] N.M. Atherton. *Principles of Electron Spin Resonance*. Ellis Horwood PTR Prentice Hall physical chemistry series. Ellis Horwood, 1993.
- [77] M.S. de Groot y J.H. van der Waals. Paramagnetic resonance in phosphorescent aromatic hydrocarbons. *Molecular Physics*, 3(2):190–200, 1960.
- [78] J. A. R. Coope, J. B. Farmer, C. L. Gardner, y C. A. McDowell. Zero-Field Splittings and Spin Densities in Ground-State Triplet Aromatic Nitrenes. *The Journal of Chemical Physics*, 42(1):54–59, 07 2004.
- [79] Yuhei Sekiguchi, Yusuke Komura, Shota Mishima, Touta Tanaka, Naeko Niikura, y Hideo Kosaka. Geometric spin echo under zero field. *Nature Communications*, 7(1):11668, Mayo 2016.
- [80] W. Wernsdorfer y R. Sessoli. Quantum phase interference and parity effects in magnetic molecular clusters. *Science*, 284(5411):133–135, 1999.
- [81] Hans-Benjamin Braun y Daniel Loss. Berry's phase and quantum dynamics of ferromagnetic solitons. *Phys. Rev. B*, 53:3237–3255, Feb 1996.

- [82] Thomas L. Curtright. A compact formula for rotations as spin matrix polynomials. *Symmetry, Integrability and Geometry: Methods and Applications*, ago 2014.
- [83] Masahiro Kitagawa y Masahito Ueda. Squeezed spin states. *Phys. Rev. A*, 47:5138–5143, jun 1993.
- [84] Tuguldur Kh. Begzjav y Girish S. Agarwal. Squeezing of spin-1 quantum states via a one-axis twisting hamiltonian. *Phys. Rev. A*, 104:023706, Ago 2021.
- [85] Carlton M. Caves y Gerard J. Milburn. Qutrit entanglement. *Optics Communications*, 179(1):439–446, 2000.
- [86] Hans Jürgen Sommers y Karol Zyczkowski. Bures volume of the set of mixed quantum states. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(39):10083–10100, 2003.
- [87] Andrei B. Klimov, Luis L. Sánchez-Soto, Hubert De Guise, y Gunnar Björk. Quantum phases of a qutrit. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 37(13):4097–4106, 2004.
- [88] Yao Zhong Zhang. ZN symmetric chiral Rabi model: A new N-level system. *Annals of Physics*, 347:122–129, 2014.
- [89] T. S. Van Kortryk. Matrix exponentials, $su(n)$ group elements, and real polynomial roots. *Journal of Mathematical Physics*, 57(2):021701, 2016.
- [90] Leslie E Ballentine. *Quantum Mechanics: A Modern Development*. WORLD SCIENTIFIC, 2nd edición, 2014.
- [91] Xu-Yang Hou, Hao Guo, y Chih-Chun Chien. Finite-temperature topological phase transitions of spin- j systems in uhlmann processes: General formalism and experimental protocols. *Phys. Rev. A*, 104:023303, Aug 2021.
- [92] Ching-Kai Chiu, Jeffrey C. Y. Teo, Andreas P. Schnyder, y Shinsei Ryu. Classification of topological quantum matter with symmetries. *Rev. Mod. Phys.*, 88:035005, Ago 2016.
- [93] Marie Ericsson, Arun K. Pati, Erik Sjöqvist, Johan Brännlund, y Daniel K. L. Oi. Mixed state geometric phases, entangled systems, and local unitary transformations. *Phys. Rev. Lett.*, 91:090405, Ago 2003.
- [94] Johan Åberg, David Kult, Erik Sjöqvist, y Daniel K. L. Oi. Operational approach to the uhlmann holonomy. *Phys. Rev. A*, 75:032106, Mar 2007.
- [95] A. Uhlmann. The transition probability in the state space of a $*$ -algebra. *Reports on Mathematical Physics*, 9(2):273–279, 1976.
- [96] Shi-Liang Zhu. Scaling of geometric phases close to the quantum phase transition in the xy spin chain. *Phys. Rev. Lett.*, 96:077206, Feb 2006.
- [97] Alioscia Hamma. Berry phases and quantum phase transitions, 2006.
- [98] D. M. Tong, E. Sjöqvist, L. C. Kwek, y C. H. Oh. Kinematic approach to the mixed state geometric phase in nonunitary evolution. *Phys. Rev. Lett.*, 93:080405, Ago 2004.

- [99] N. Papanicolaou. Unusual phases in quantum spin-1 systems. *Nuclear Physics B*, 305(3):367–395, 1988.