



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA I

MÁSTER EN FÍSICA FUNDAMENTAL

Cadenas cuánticas con acoplos espín-bosón: aplicaciones en simulación cuántica

Quantum chains with spin-boson couplings: applications in quantum
simulation

Autor:

Pedro Nevado Serrano
pnevado@estumail.ucm.es

Tutor:

Diego Porras Torre
diego.porras@fis.ucm.es

Trabajo Fin de Máster
Convocatoria Junio 2012
Calificación: Sobresaliente (9,5)

Resumen

En este trabajo pretendemos estudiar modelos colectivos de espines acoplados a bosones para ser implementados en sistemas de iones atrapados o *cavity/circuit QED*. El problema que vamos a tratar podría servir para generar estados entrelazados de fotones, lo cual tiene especial utilidad en cualquier realización práctica de información o computación cuántica. Existen modelos relacionados que se han introducido en física del estado sólido para el estudio de acoplos Jahn-Teller entre estados electrónicos orbitales y fonones.

Palabras clave: *simulación cuántica, iones atrapados, c.QED, acoplos de Jahn-Teller, computación cuántica, información cuántica*

Abstract

In this work we study collective models of spins coupled to bosons to be implemented in systems of trapped ions or circuit/cavity QED. In this last setting our study could be useful for experimental realizations of quantum information and quantum computation. There are several models related to this one which have been introduced in solid state physics in order to study Jahn-Teller couplings between orbital electrons and phonons.

Keywords: *quantum simulation, trapped ions, c.QED, Jahn-Teller couplings, quantum computation, quantum information*

Índice

1. Introducción
2. Modos normales
3. Teoría de campo medio
4. Fluctuaciones gaussianas
5. Conclusiones

Bibliografía

I. INTRODUCCIÓN

A. Motivación: simulación cuántica analógica

Habitualmente en la física del estado sólido se encuentran que fenómenos complejos y con un gran potencial de aplicación tecnológica son consecuencia de interacciones de largo alcance entre el inmenso número de componentes del sistema, pero la dificultad computacional asociada a estos problemas que involucran muchos cuerpos obstaculiza la comprensión de los mismos. Sin embargo, los avances experimentales en óptica cuántica y física atómica permiten actualmente emular los anteriores sistemas fabricando las interacciones deseadas, además de preparar y medir eficientemente estados cuánticos, de forma que se pueden estudiar las correlaciones controlando casi a voluntad los parámetros de los mismos, algo que es imposible en el estado sólido. Esta idea es la base del marco experimental conocido como simulación cuántica analógica, la cual se está realizando con éxito en redes ópticas y sistemas de iones atrapados. Este último montaje tiene la ventaja de que los estados cuánticos se pueden preparar y medir al nivel de partícula individual con una alta eficiencia [1, 2].

Por otro lado, en sistemas como iones atrapados o átomos en cavidades surgen de forma natural acoplos entre grados de libertad internos como el espín y las vibraciones de los componentes del sistema, que al estar cuantizadas se modelizan como una colectividad de bosones, los fonones. Este hecho se revela de gran utilidad para el estudio de sistemas de estado sólido con este tipo de interacciones: por ejemplo, los acoplos colectivos de Jahn-Teller, que son una generalización a la situación de muchos cuerpos de los modelos del mismo nombre, que genéricamente describen moléculas en las que los orbitales electrónicos se acoplan a modos vibracionales de forma que la energía del sistema se minimice al romperse alguna de las simetrías espaciales. Si concebimos un sistema de física atómica cuyo hamiltoniano efectivo presente las interacciones anteriores tendremos entonces el simulador cuántico que permite predecir las fases del modelo de materia condensada [3]. El objeto del presente estudio se enmarca dentro de este tipo de acoplos e interacciones.



Figura 1. Cadena de iones atrapados en una trampa, con un campo externo \mathbf{B} aplicado.

Concretamente, este trabajo se centra en el análisis de una cadena de N espines acoplados a bosones. Dicho sistema puede representar dos situaciones físicas bien definidas, a saber: la descripción de una cadena de iones en

una trampa de Pauli o en *arrays* de microtrampas, o el caso de un conjunto de cavidades entre las cuales pueden tunear fotones y que contienen cada una un espín que se acopla a la radiación. Este último tipo de montajes se incluye dentro de las técnicas conocidas como *cavity/circuit QED* o c.QED, que consisten genéricamente en acoplar un conjunto de *qubits* (análogos cuánticos de los *bits* de un ordenador clásico) superconductores –que a efectos prácticos equivalen a dipolos– a un sistema de cavidades.



Figura 2. Montaje de c.QED: la cavidad está diseñada para seleccionar un único modo de radiación, habitualmente en el rango de las microondas, cuya frecuencia coincide con la de excitación del *qubit* superconductor, que consta a efectos prácticos de dos niveles ya que su espectro energético es inhomogéneo.

Si aplicamos al sistema un campo magnético como consecuencia los espines tienden a alinearse. Sin embargo, la presencia de un acoplo de éstos con los bosones, bien sean las vibraciones cuantizadas de la cadena –los fonones– o los fotones con los que interactúan los iones en c.QED, va a inducir una fase en la que la acción del campo magnético externo compite con una interacción efectiva que va a intentar alinear los espines en una dirección perpendicular a éste. El objetivo principal del presente trabajo va ser la exploración de las fases del sistema y su caracterización.

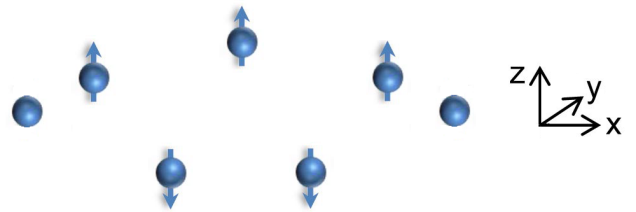


Figura 3. Transición de fase inducida por el acoplo espín-bosón.

De lo anterior se sigue que una posible aplicación, que no exploraremos aquí, sería la utilización de este sistema en la generación de estados entrelazados de *qubits*. Una idea podría consistir en introducir los átomos en un baño de radiación de forma que las correlaciones se traspasen a estados de fotón. Esto es muy importante debido a que uno de los grandes retos de la implementación experimental de la computación cuántica es conseguir un número de elementos correlacionados lo más alto posible.

B. Modelo de Jahn-Teller cooperativo

El objeto de nuestro estudio está descrito por el hamiltoniano $H = H_s + H_b + H_{sb}$, donde:

$$\begin{aligned} H_s &= \sum_j \frac{\Omega}{2} \sigma_j^x, \\ H_b &= \sum_j \omega_j a_j^\dagger a_j + \sum_{j,l} t_{jl} a_j^\dagger a_l, \\ H_{sb} &= g \sum_j \sigma_j^z (a_j + a_j^\dagger). \end{aligned} \quad (1)$$

Vemos que los bosones pueden saltar entre diferentes sitios de la cadena con términos de *hopping* t_{jk} . En concreto, nosotros vamos a estudiar los supuestos en que $t_{jk} = -t(\delta_{kj+1} + \delta_{kj-1})$, $t > 0$ (c.QED), y $t_{jk} = (-1)^{j-k} \frac{t}{|j-k|^3}$ (fonones radiales de una cadena de iones atrapados). En ambos casos, gracias a la simetría de los coeficientes de los operadores número en el hamiltoniano H_b , sabemos que se puede diagonalizar la parte bosónica del problema mediante una transformación ortogonal $MM^T = I$ y expresarla en función de modos normales (unos nuevos operadores bosónicos que denotaremos por a_n):

$$H_b = \sum_{n,m} \omega_{nm} a_m^\dagger a_n = \sum_{n,m} \omega_n \delta_{nm} a_m^\dagger a_n = \sum_n \omega_n a_n^\dagger a_n, \quad (2)$$

siendo $\omega_{nm} := \sum_{j,l} M_{nl} M_{mj} (t_{jl} + \omega_j \delta_{jl})$ una matriz diagonal y $a_n := \sum_j M_{nj} a_j$.

Por otro lado, la parte del acoplo en función de los modos normales queda:

$$H_{sb} = g \sum_{j,n} \sigma_j^z M_{nj} (a_n + a_n^\dagger). \quad (3)$$

Consideremos ahora la transformación canónica $U = e^{-S}$ con:

$$S = \sum_{j,n} \frac{g}{\omega_n} M_{nj} \sigma_j^z (a_n - a_n^\dagger). \quad (4)$$

Esta transformación tiene como efecto un desplazamiento de los operadores bosónicos:

$$e^{-S} a_n e^S = a_n - \sum_j \frac{g}{\omega_n} M_{nj} \sigma_j^z, \quad (5)$$

a partir de lo cual se concluye que los hamiltonianos H_b y H_{sb} bajo U quedan:

$$\bar{H}_b + \bar{H}_{sb} = \sum_n \omega_n a_n^\dagger a_n - \sum_{j,l,n} \frac{g^2}{\omega_n} M_{nj} \sigma_j^z \sigma_l^z M_{nl}. \quad (6)$$

Lo anterior indica que a partir del acoplo espín-bosón ha surgido una interacción efectiva espín-espín mediada por:

$$J_{jl} = -g^2 \sum_n M_{nj} \frac{1}{\omega_n} M_{nl}. \quad (7)$$

Finalmente, con respecto al último término es sencillo ver que $[S, \sigma_j^+] = \sum_n \frac{g}{\omega_n} M_{nj} (a_n - a_n^\dagger) 2\sigma_j^+$, siendo $\sigma^+ := \frac{1}{2}(\sigma^x + i\sigma^y)$. Dado que $\sigma_x \equiv \sigma^+ + (\sigma^+)^\dagger$ tenemos que:

$$\bar{H}_s = \frac{\Omega}{2} \sum_j \left(\sigma_j^+ e^{-2 \sum_n M_{nj} \frac{g}{\omega_n} (a_n - a_n^\dagger)} + \text{H.c.} \right). \quad (8)$$

Este último término se puede interpretar como una interacción debida al acoplo residual entre espines y bosones. Dicha corrección aparece en forma de exponenciales de los operadores bosónicos (factores de Franck-Condon). Si $g \ll \omega_n$ las correcciones pueden ignorarse puesto que las exponenciales quedan aproximadas por la unidad. En este régimen de acoplo espín-bosón débil tendremos una interacción efectiva tipo Ising entre espines.

C. Implementación física con iones atrapados

Vamos a considerar sistemas unidimensionales de iones atrapados cuya implementación física corresponde a cadenas de Coulomb en trampas de Paul o *arrays* de microtrampas de iones [4]. La cadena de iones sigue el eje \mathbf{x} y pueden oscilar en la dirección del eje \mathbf{z} , con lo que tenemos el sistema en el plano \mathbf{xz} . El potencial al que están sometidos queda determinado por las frecuencias de atrapamiento ω_t , ω_x y la repulsión culombiana, luego el hamiltoniano del sistema es:

$$H = \frac{\sum_j \mathbf{p}_j^2}{2m} + \frac{m}{2} \sum_j (\omega_{x,j}^2 x_j^2 + \omega_{t,j}^2 z_j^2) + \sum_{j \neq k} \frac{e^2/2}{\sqrt{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)^2}}. \quad (9)$$

Hay que indicar que debido a la interacción culombiana los iones se van a distribuir a lo largo de la cadena de forma inhomogénea, estando más juntos en el centro de la misma y más separados en los extremos. En lo que sigue sin embargo vamos a suponer la situación en que los iones presentan una separación constante. Esto no es una simplificación sin contenido físico, ya que en el caso de microtrampas de iones que utilizan campos eléctricos individuales para situar cada ion en la cadena la descripción adecuada es suponer que la cadena es homogénea ya que es así como se construye.

En la aproximación armónica expresamos $V_{Coulomb}$ como una función de los desplazamientos alrededor de las posiciones de equilibrio, $\mathbf{r}_j = r_{x,j}^{(0)} \hat{\mathbf{x}} + \delta z_j \hat{\mathbf{z}}$, hasta orden cuadrático:

$$V_{Coulomb} = \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} \frac{e^2}{\sqrt{(r_{x,j}^{(0)} - r_{x,k}^{(0)})^2 + (\delta z_j - \delta z_k)^2}} \\ \simeq \sum_{j \neq k} \frac{e^2}{2} \left\{ \frac{1}{|r_{x,j}^{(0)} - r_{x,k}^{(0)}|} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{(\delta z_j - \delta z_k)^2}{|r_{x,j}^{(0)} - r_{x,k}^{(0)}|^2} \right) \right\}. \quad (10)$$

Cuantizamos el sistema sustituyendo la posición y el momento conjugado por sus operadores correspondientes en función de los creadores y destructores, en la forma (nótese que trabajamos en unidades de $\hbar = 1$):

$$p_j = i\sqrt{\frac{m\omega_t}{2}}(a_j^\dagger - a_j), \quad \delta z_j = \frac{1}{\sqrt{2m\omega_t}}(a_j + a_j^\dagger). \quad (11)$$

Sustituimos en el hamiltoniano e ignoramos los términos constantes –ya que no contribuyen a la dinámica– y los de la forma $(a_j)^2$ y $(a_j^\dagger)^2$. Esto último es lo que se conoce como aproximación de onda rotatoria (R.W.A. por sus siglas en inglés) que consiste en suponer que al alcanzar el estado estacionario los términos presentes en el hamiltoniano sólo pueden ser aquellos que no portan ninguna fase, ya que en promedio cualquier término de la forma $e^{i\omega t}$ se anula si $\omega \gg t$. Tenemos entonces que:

$$H_b = \sum_j \omega_{t,j} a_j^\dagger a_j + \sum_{j,l} t_{jl} a_j^\dagger a_l, \quad (12)$$

siendo:

$$\omega_{t,j} = \omega_t - \sum_{p \neq j} \frac{e^2}{2m\omega_t |r_{x,j}^{(0)} - r_{x,p}^{(0)}|^3}, \quad (13)$$

y:

$$t_{jl} = \frac{e^2}{2m\omega_t |r_{x,j}^{(0)} - r_{x,l}^{(0)}|^3}. \quad (14)$$

El *hopping* que habíamos enunciado para iones atrapados difiere de este por un factor $(-1)^{j-l}$. Esto es debido a que por simplicidad en el análisis posterior se introduce la llamada *staggered basis*:

$$a_j \rightarrow (-1)^j a_j, \quad \sigma_j^z \rightarrow (-1)^j \sigma_j^z. \quad (15)$$

Lo anterior garantiza que el término de acoplo quede invariante con el cambio (de hecho, nuestro hamiltoniano presenta una simetría \mathbb{Z}_2) pero que el *hopping* sea el que se había indicado en primer lugar: $t_{jk} \rightarrow (-1)^{j-k} t_{jk}$.

Con respecto al término del acoplo, la interacción de los iones con el campo eléctrico producido por los láseres del experimento induce un acoplo dipolar:

$$H_{\text{int}} = - \sum_j \mathbf{d}_j \mathbf{E} \stackrel{R.W.A.}{\simeq} \sum_j \frac{\Omega_L}{2} (e^{i\mathbf{k}_j \mathbf{x}_j - i\omega_L t} \sigma_j^+ + \text{H.c.}). \quad (16)$$

Ahí el subíndice L hace referencia a las magnitudes asociadas al láser. Concretamente la Ω_L , que marca el acoplo con el campo por parte de los iones, es lo que posteriormente dará lugar al acoplo espín-bosón g .

Si en la anterior expresión realizamos la aproximación dipolar se llega a un acoplo de la forma $\delta z_j \sigma^x$. Como ya hemos comprobado al hacer la transformación canónica para obtener el acoplo efectivo espín-espín de tipo Ising, es conveniente que el acoplo anterior dependa de σ^z en vez de σ^x . Para ello, podemos simplemente hacer una rotación de los operadores de espín $\sigma^x \leftrightarrow \sigma^z$, llegando así a reproducir el acoplo de nuestro sistema, $\sigma^z (a_j + a_j^\dagger)$.

Finalmente, si además del campo necesario para crear la trampa se aplica un \mathbf{B} en \mathbf{z} , los espines tenderán a orientarse en dicha dirección, pero como hemos hecho el cambio $\sigma^x \leftrightarrow \sigma^z$ el hamiltoniano tendrá la forma:

$$H_s = - \sum_j \mathbf{s}_j \mathbf{B} = \sum_j \frac{\Omega}{2} \sigma_j^x, \quad (17)$$

siendo $\Omega = -\gamma B_z$ con γ la constante giromagnética.

II. MODOS NORMALES

Los modos normales de la parte bosónica son expresables de forma analítica para $D = 1$ en los dos casos que estamos considerando: c.QED e iones atrapados. Vamos a centrarnos en c.QED donde los resultados analíticos son inmediatos de encontrar. Empecemos viendo cómo se resuelve el problema con condiciones de contorno periódicas (en adelante PBC). En realidad las condiciones de contorno realistas para este caso son las abiertas pero encontrar para las mismas una expresión cerrada es más complicado. Sin embargo, podemos esperar que las frecuencias obtenidas para PBC no difieran mucho de las que se obtendrían con condiciones abiertas.

Supondremos que $\omega_j \equiv \omega$ para explotar la invariancia traslacional del problema en este caso, ya que la dependencia de ω con el sitio tiene como consecuencia que –independientemente de las condiciones de contorno– los autoestados tomen valores apreciables solamente para las frecuencias más bajas.

La invariancia anterior sugiere que un *ansatz* de onda plana puede dar la relación de dispersión correcta, luego por el momento trabajaremos con matrices unitarias M y M^\dagger , siendo $M_{nj} = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp(-i\frac{2\pi}{N}nj)$, en vez de con ortogonales:

$$\begin{aligned}
\omega_{nm} &= \frac{1}{N} \sum_{j,l} e^{-i\frac{2\pi}{N}nl} e^{i\frac{2\pi}{N}mj} \overbrace{(t_{jl} + \omega_l \delta_{jl})}^{:=A_{jl}} \\
&= \frac{1}{N} \sum_{j,l} e^{i\frac{2\pi}{N}\frac{j-l}{2}(m+n)} A_{jl} e^{i\frac{2\pi}{N}\frac{j+l}{2}(m-n)} \\
&= \frac{1}{N} \sum_{j+l, j-l} e^{i\frac{2\pi}{N}\frac{j-l}{2}(m+n)} A_{j-l} e^{i\frac{2\pi}{N}\frac{j+l}{2}(m-n)} \\
&= \sum_{j-l} e^{i\frac{2\pi}{N}n(j-l)} A_{j-l} = \omega - t(e^{i\frac{2\pi}{N}} + e^{-i\frac{2\pi}{N}} e^{i2\pi n}) \\
&= \omega - 2t \cos\left(\frac{2\pi n}{N}\right). \tag{18}
\end{aligned}$$

Ahí hemos utilizado la propiedad de invariancia traslacional de $A_{jl} \equiv A_{j-l}$, que las condiciones de contorno son PBC ($A_{N1} = A_{1N} = -t$) y la relación de cierre de las ondas planas:

$$\sum_{j+l} e^{i\frac{2\pi}{N}\frac{j+l}{2}(m-n)} = N\delta_{mn}. \tag{19}$$

La expresión obtenida para ω_{nm} etiqueta los autovalores del problema. Los modos normales que consideraremos sin embargo serán las combinaciones reales de las ondas planas M_{jn} , $\{R_{jn}, I_{jn}\}$, definidas a partir de $M_{jn} = \frac{1}{\sqrt{2}}(R_{jn} + iI_{jn})$ y $M_{jn}^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(R_{jn} - iI_{jn})$:

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{N}}, \sqrt{\frac{2}{N}} \cos\left(\frac{2\pi jn}{N}\right), \sqrt{\frac{2}{N}} \sin\left(\frac{2\pi jn}{N}\right) \right\}. \tag{20}$$

Extraemos entonces que la frecuencia fundamental es del orden $\omega_0 \simeq \omega - 2t$ y que la separación entre niveles es $\omega_1 - \omega_0 \simeq 4t \left(\frac{\pi}{N}\right)^2$, es decir, es proporcional a t .

Si introducimos los anteriores resultados en la expresión del acoplo efectivo (7), vemos que en el límite del continuo:

$$\begin{aligned}
J_{jj'} &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \sim \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{i\frac{2\pi}{N}x(j-j')}}{\omega - 2t \cos\left(\frac{2\pi x}{N}\right)} \\
&\propto \begin{cases} e^{-\sqrt{\frac{\omega-2t}{2t}}(j-j')}, & \text{si } \omega - 2t > 0, \\ \text{sen}\left(\sqrt{\frac{|\omega-2t|}{2t}}(j-j')\right), & \text{si } \omega - 2t < 0. \end{cases} \tag{21}
\end{aligned}$$

A partir de lo anterior, podemos comprobar ahora que en el supuesto de $t \ll \omega$, que se engloba en el caso del resultado anterior en que J_{jl} decae exponencialmente con la distancia entre vecinos, se obtiene una expresión coherente para el caso de sistema finito:

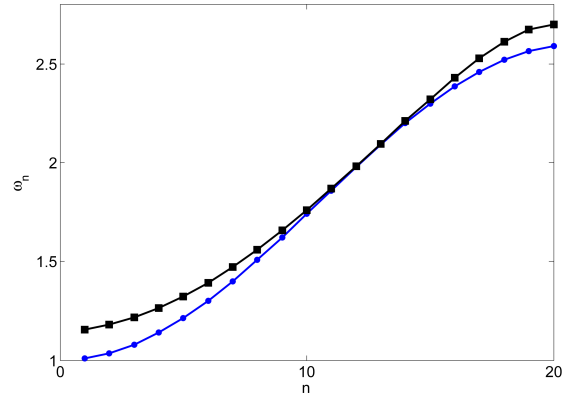


Figura 4. Relación de dispersión para los casos de *hopping* $t_{jk} = 0,4$ a primeros vecinos (línea azul) y de *hopping* culombiano, con $\omega = 2,7$ y $t_{jk} = 0,4$ (línea negra). Dado que experimentalmente existe gran libertad a la hora de fijar el valor de los parámetros, aquí hemos elegido arbitrariamente como escala $\omega_0 := \omega - 2t = 1$, la energía del fundamental para *hopping* a primeros vecinos igual a la unidad. Para el caso culombiano los parámetros se han escogido de forma que la escala del resultado coincida con el análogo para *hopping* a primeros vecinos.

$$\begin{aligned}
J_{jl} &= - \sum_n g^2 M_{nj} \frac{1}{\omega_n} M_{nl} = - \frac{g^2}{N} \sum_n \frac{e^{i\frac{2\pi n}{N}(j-l)}}{\omega - 2t \cos\left(\frac{2\pi n}{N}\right)} \\
&\simeq - \frac{g^2}{\omega N} \sum_n e^{i\frac{2\pi n}{N}(j-l)} \left(1 + \frac{t}{\omega} \cos\left(\frac{2\pi n}{N}\right)\right) \\
&= - \frac{g^2}{\omega N} \sum_n \left[e^{i\frac{2\pi n}{N}(j-l)} + \frac{t}{\omega} \left(e^{i\frac{2\pi n}{N}(j-l+1)} + e^{i\frac{2\pi n}{N}(j-l-1)} \right) \right] \\
&= - \frac{g^2}{\omega N} \left(N\delta_{jl} + N\frac{t}{\omega} (\delta_{j,l-1} + \delta_{j,l+1}) \right). \tag{22}
\end{aligned}$$

Notar que dado que $t > 0$, el fundamental del sistema de espines será ferromagnético.

Como aplicación de los cálculos anteriores podemos ver la desviación de los iones de sus posiciones de equilibrio en el estado estacionario del sistema. Si, como hemos venido haciendo hasta ahora, suponemos que la interacción entre espines es de tipo ferromagnética, e ignoramos la corrección que introduce el factor de Franck-Condon, el estado fundamental será el que tenga todos los espines alineados en la dirección \mathbf{z} , luego:

$$\begin{aligned}
\langle z_j \rangle &= \sum_{n,l} M_{jn} \frac{1}{\omega_n} M_{ln} \langle \sigma_j^z \rangle = \sum_n M_{jn} \frac{1}{\omega_n} \delta_{n0} (\pm 1) \\
&= \pm \frac{1}{\omega - 2t}. \tag{23}
\end{aligned}$$

III. TEORÍA DE CAMPO MEDIO

En este apartado vamos a plantear un *ansatz* para el estado fundamental de nuestro problema y mediante la condición de minimización de la energía determinaremos los parámetros de dicha solución. Llamaremos a este estudio teoría colectiva de campo medio, ya que nuestro *ansatz* describe una colectividad de bosones, como un estado coherente de fotones, por ejemplo, y un estado en que los espines apuntan en una dirección concreta dependiente del sitio:

$$|\Psi_{\text{MF}}\rangle = \bigotimes_j (|\theta_j, \phi_j\rangle) \otimes e^{-\sum_n (\alpha_n^* a_n - \alpha_n a_n^\dagger)} |0\rangle_b, \quad (24)$$

siendo $|\theta_j, \phi_j\rangle = \cos(\theta_j/2)|0\rangle_j + e^{-i\phi_j} \sin(\theta_j/2)|1\rangle_j$. Calculemos la energía de dicho estado:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\text{MF}} | H | \Psi_{\text{MF}} \rangle &= \langle \Psi_{\text{MF}} | \sum_n \omega_n a_n^\dagger a_n + \frac{\Omega}{2} \sum_j \sigma_j^x \\ &+ g \sum_{j,n} \sigma_j^z M_{nj} (a_n^\dagger + a_n) | \Psi_{\text{MF}} \rangle. \end{aligned} \quad (25)$$

De manera natural la expresión anterior se parte en tres trozos: el primero se simplifica si vemos que $|\Psi_{\text{MF}}\rangle = U|0\rangle_b$, donde $U := e^{-\sum_n (\alpha_n^* a_n - \alpha_n a_n^\dagger)}$, de forma que:

$$\begin{aligned} \begin{cases} U^\dagger a_n U = a_n + \alpha_n, \\ U^\dagger a_n^\dagger U = a_n^\dagger + \alpha_n^*, \end{cases} &\Rightarrow \sum_n \omega_n \langle \Psi_{\text{MF}} | a_n^\dagger a_n | \Psi_{\text{MF}} \rangle \\ &= \sum_n \omega_n \langle 0 | U^\dagger a_n^\dagger U U^\dagger a_n U | 0 \rangle = \sum_n \omega_n |\alpha_n|^2. \end{aligned} \quad (26)$$

El siguiente término se calcula como el anterior y viendo que $\langle \Psi_{\text{MF}} | \sigma_j^z | \Psi_{\text{MF}} \rangle = -\cos^2(\theta_j/2) + \sin^2(\theta_j/2) = -\cos\theta_j$, luego:

$$g \sum_{j,n} M_{nj} \langle \sigma_j^z \rangle (\alpha_n^* + \alpha_n) = g \sum_{j,n} M_{nj} (-\cos\theta_j) (\alpha_n^* + \alpha_n). \quad (27)$$

Finalmente, dado que $\sigma_j^x |\theta_j, \phi_j\rangle = \cos(\theta/2)|1\rangle_j + e^{-i\phi_j} \sin(\theta_j/2)|0\rangle_j$ y, por tanto, $\langle \theta_j, \phi_j | \sigma_j^x | \theta_j, \phi_j \rangle = \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) (e^{-i\phi_j} + e^{i\phi_j}) = \sin\theta_j \cos\phi_j$, llegamos a que:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \sum_n \omega_n \alpha_n^* \alpha_n + g \sum_{j,n} M_{nj} (-\cos\theta_j) (\alpha_n^* + \alpha_n) \\ &+ \frac{\Omega}{2} \sum_j \sin\theta_j \cos\phi_j. \end{aligned} \quad (28)$$

Procedemos entonces a minimizar. Hay que hacer notar que vamos considerar α_n^* y α_n grados de libertad independientes en principio por lo que tendremos una ecuación para cada una:

$$\begin{cases} \frac{\partial H}{\partial \alpha_n} = \omega_n \alpha_n^* - g \sum_j M_{nj} \cos\theta_j = 0, \\ \frac{\partial H}{\partial \alpha_n^*} = \omega_n \alpha_n - g \sum_j M_{nj} \cos\theta_j = 0, \\ \frac{\partial H}{\partial \theta_j} = g \sum_n M_{nj} \sin\theta_j (\alpha_n^* + \alpha_n) + \frac{\Omega}{2} \cos\theta_j \cos\phi_j = 0, \\ \frac{\partial H}{\partial \phi_j} = -\frac{\Omega}{2} \sin\theta_j/2 \sin\phi_j/2 = 0. \end{cases} \quad (29)$$

Lo primero que notamos es que $\alpha_n^* = \alpha_n$, es decir, que es real. Por otro lado, $\phi_j = \{0, \pi\}$; tomaremos $\phi_j = \{0\}$ sin pérdida de generalidad, $\forall j$. Llegamos entonces a las dos ligaduras siguientes:

$$\begin{cases} \alpha_n = \frac{g}{\omega_n} \sum_j M_{nj} \cos\theta_j, \\ g \sum_n M_{nj} \sin\theta_j \left(2 \frac{g}{\omega_n} \sum_{j'} M_{nj'} \cos\theta_{j'} \right) = \mp \frac{\Omega}{2} \cos\theta_j. \end{cases} \quad (30)$$

Las anteriores ecuaciones se resuelven numéricamente pero podemos predecir su resultado haciendo algunas aproximaciones. Sea:

$$J_{jj'} := 2g^2 \sum_n M_{nj} \frac{1}{\omega_n} M_{nj'}. \quad (31)$$

Bajo condiciones de contorno periódicas $\cos\theta_j = cte.$, por lo que podemos hacer $J := \sum_{j'} J_{jj'}$ obteniendo que para toda j la segunda ecuación de ligadura se reduce a:

$$J \sin\theta \cos\theta = \mp \frac{\Omega}{2} \cos\theta \Rightarrow \sin\theta = \mp \frac{\Omega}{2J}. \quad (32)$$

El anterior resultado constituye uno de los más importantes del trabajo: dado que cabe esperar homogeneidad en el sistema al tomar el límite termodinámico, la ecuación (32) marca el punto de aparición de la transición de fase del sistema. Nótese que así como para valores cada vez más altos de elementos en el sistema cabe esperar que el valor del punto crítico se estabilice en torno al que proporciona la fórmula de arriba, la dependencia del mismo con el valor de J es sensible a la interacción que se considere. Como se deduce de los cálculos numéricos presentados a continuación, el valor de g_c para el caso de *hopping* a primeros vecinos es $\sim 0,5$ mientras que para el caso culombiano se encuentra en $\sim 0,69$.

Qué características presenta el sistema en cada una de las dos fases lo podemos ver sustituyendo la anterior condición en (30) para los dos límites naturales que las definen:

$$\begin{cases} \Omega \gg J \Rightarrow \cos\theta = 0 \rightarrow |\theta, \phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \pm |1\rangle), \\ \Omega \ll J \Rightarrow \sin\theta = 0 \rightarrow |\theta, \phi\rangle = \{|0\rangle, \pm|1\rangle\}. \end{cases} \quad (33)$$

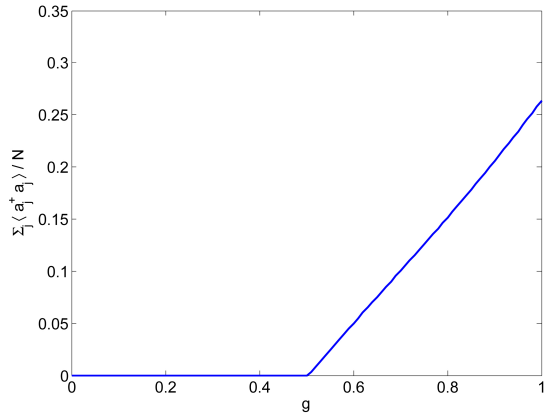


Figura 5. Valor medio de bosones como función de g para el caso de c. QED. El punto de la transición de fase se encuentra en $g \sim 0,5$.

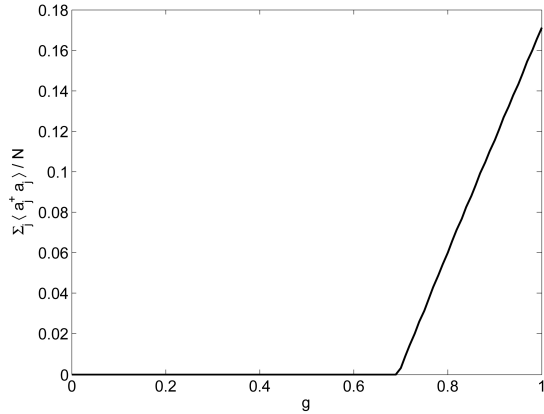


Figura 6. Valor medio de bosones como función de g para la cadena de iones. El punto de la transición de fase se encuentra en $g \sim 0,7$.

Hemos obtenido entonces que si el campo aplicado es muy alto los espines tenderán a alinearse en la dirección del mismo. Esta es la situación ilustrada en la figura 1. Interpretamos que las oscilaciones bosónicas tienen una amplitud insuficiente como para que mediante su acoplamiento a los espines puedan alterar su orientación. Sin embargo, a partir de cierto valor umbral, las oscilaciones se magnifican y la interacción espín-bosón, que efectivamente es una interacción de Ising entre espines, es lo suficientemente fuerte como para que los espines pasen a apuntar en la dirección \mathbf{z} : es el caso presentado en la figura 3. La situación intermedia tiene que ser un *crossover* entre ambos regímenes, esto es, una fase en que los espines apuntan en una dirección θ_j de forma homogénea, es decir, independiente de j salvo por efectos de borde y tamaño finito.

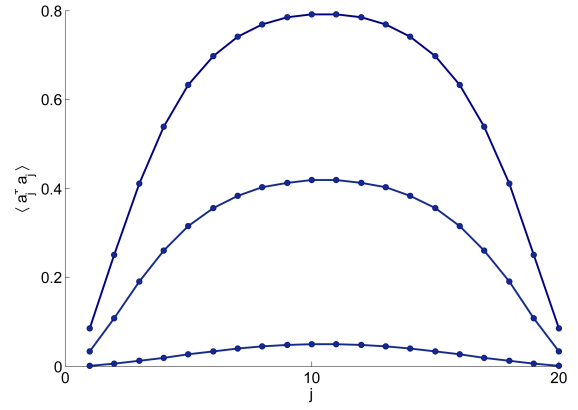


Figura 7. Valor esperado de las amplitudes de oscilación dependiente del sitio para *hopping* a primeros vecinos y condiciones de contorno abiertas, que corresponde a la implementación en c. QED para valores del acoplamiento por encima de su valor crítico: $g = 0,55, 0,75, 0,95$.

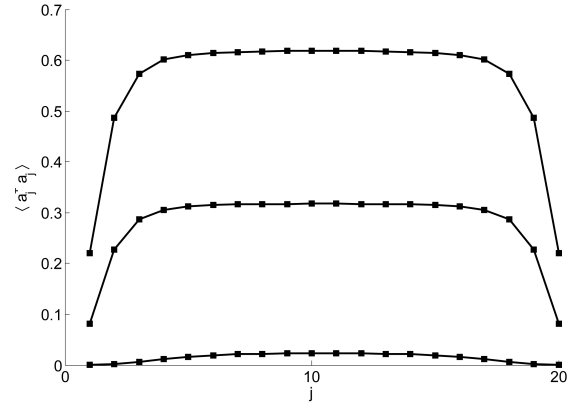


Figura 8. Valor esperado de las amplitudes de oscilación dependiente del sitio para el caso de la implementación con iones atrapados y mismos valores del acoplamiento que en el caso anterior: $g = 0,55, 0,75, 0,95$.

IV. FLUCTUACIONES GAUSSIANAS

En este apartado vamos a calcular las desviaciones sobre la solución de campo medio. Como en el apartado anterior partimos de:

$$H = \sum_j \frac{\Omega}{2} \sigma_j^x + \sum_n \omega_n a_n^\dagger a_n + g \sum_{j,n} \sigma_j^z M_{nj} (a_n + a_n^\dagger). \quad (34)$$

Suponemos que el sistema se encuentra en el estado fundamental $|\Psi_{\text{MF}}\rangle$ con los parámetros tomando el valor dado por la condición de minimización de la energía. Dicho estado puede presentar los espines orientados en una dirección arbitraria en el plano \mathbf{xz} , por lo que si queremos hacer teoría de perturbaciones tendremos antes que rotar el hamiltoniano y centrarlo en la dirección θ_j obtenida:

$$\begin{cases} \sigma_j^y = \tilde{\sigma}_j^y, \\ \sigma_j^z = \cos \theta_j \tilde{\sigma}_j^z + \sin \theta_j \tilde{\sigma}_j^x, \\ \sigma_j^x = \cos \theta_j \tilde{\sigma}_j^x - \sin \theta_j \tilde{\sigma}_j^z. \end{cases} \quad (35)$$

El hamiltoniano rotado es entonces:

$$\begin{aligned} H &= \sum_j \frac{\Omega}{2} (\cos \theta_j \tilde{\sigma}_j^x - \sin \theta_j \tilde{\sigma}_j^z) + \sum_n \omega_n a_n^\dagger a_n \\ &+ g \sum_{j,n} (\cos \theta_j \tilde{\sigma}_j^z + \sin \theta_j \tilde{\sigma}_j^x) M_{nj} (a_n + a_n^\dagger). \end{aligned} \quad (36)$$

Definimos ahora las desviaciones respecto del equilibrio como operadores que actúan sobre estados centrados en el valor encontrado en el apartado anterior; por ejemplo, para los bosones $a_n = \alpha_n + \delta a_n$.

En el caso de los operadores fermiónicos, sin embargo, es conveniente expresar las desviaciones respecto del equilibrio nuevamente como una población de bosones [5], de forma que cada excitación sea una unidad de espín que se añade al valor inicial en virtud de un operador bosónico b^\dagger : es lo que se conoce como *representación de Holstein-Primakoff*:

$$\begin{cases} S^+ = b^\dagger \sqrt{2S - n_b}, \\ S^- = (\sqrt{2S - n_b}) b, \\ S^z = n_b - S, \end{cases} \quad (37)$$

siendo $n_b = b^\dagger b$. Como $[b, b^\dagger] = 1$ es inmediato ver que los anteriores operadores verifican las reglas de conmutación las tres componentes del operador de espín $[S^\alpha, S^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} S^\gamma$. Hay que notar que el espacio de Fock de b completo no tiene el sentido físico correcto, si no que tenemos que ceñirnos al subespacio expandido por $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |2S\rangle\}$. Los estados fuera del anterior subespacio se eliminan mediante el proyector P_S . Además se puede verificar que para la base anterior se cumple que $S^2 = S(S+1)$.

Las raíces cuadradas se pueden expandir en potencias de $1/S$:

$$\sqrt{2S - n_b} = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{n_b}{4S} - \frac{n_b^2}{32S^2} + \dots \right) \quad (38)$$

Si tenemos en cuenta que $S^+ = \sigma^+$, $S^- = \sigma^-$ y que $S^z = 2\sigma^z$, podemos expresar lo anterior como:

$$\begin{cases} \sigma^+ \simeq \delta a_{s,j}^\dagger, \\ \sigma^- \simeq \delta a_{s,j}, \\ \sigma^z \simeq 2\delta a_{s,j}^\dagger \delta a_{s,j} - 1. \end{cases} \quad (39)$$

Estas excitaciones se conocen como *bosones de Holstein-Primakoff*, y las anteriores aproximaciones estarán justificadas si posteriormente vemos que se cumple que $\langle \delta a_{s,j}^\dagger \delta a_{s,j} \rangle \ll 1$.

Si sustituimos y simplificamos vemos que los términos de primer orden se anulan teniendo en cuenta las ligaduras del apartado anterior, lo cual era esperable por estar haciendo perturbaciones en torno a un mínimo. Ignorando los términos de orden cero, ya que no contribuyen a la dinámica, llegamos a que:

$$\begin{aligned} H_G &= \sum_n \omega_n \delta a_n^\dagger \delta a_n + \sum_j \Delta_j \delta a_{s,j}^\dagger \delta a_{s,j} \\ &+ \sum_{j,n} g M_{nj} \sin \theta_j (\delta a_n^\dagger + \delta a_n) (\delta a_{s,j}^\dagger + \delta a_{s,j}), \end{aligned} \quad (40)$$

siendo $\Delta_j := -\Omega \sin \theta_j + 4g \cos \theta_j \sum_n M_{nj} \alpha_n$. Como cualquier hamiltoniano cuadrático, la anterior expresión es diagonalizable mediante una transformación de Bogoliubov. Concretamente, el problema se puede ver como la diagonalización de la siguiente matriz \mathbf{H} :

$$H_G = \frac{1}{2} \mathbf{a}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{a}, \quad (41)$$

siendo:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^\dagger &= (\delta a_1^\dagger, \dots, \delta a_N^\dagger, \delta a_{s,1}, \dots, \delta a_{s,N}, \\ &\delta a_1, \dots, \delta a_N, \delta a_{s,1}, \dots, \delta a_{s,N}). \end{aligned} \quad (42)$$

Para diagonalizar el problema hemos de encontrar una transformación canónica $\mathbf{a} = \mathbf{S} \mathbf{c}$ tal que:

$$\mathbf{S}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{S} = \mathbf{E}, \quad (43)$$

y que:

$$\mathbf{J} = [\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] = \mathbf{S} [\mathbf{c}, \mathbf{c}^\dagger] \mathbf{S}^\dagger = \mathbf{S} \mathbf{J} \mathbf{S}^\dagger. \quad (44)$$

Esta última expresión, que impone la conservación de las reglas de conmutación de bosones, es la condición de que la transformación sea canónica. \mathbf{J} es una matriz diagonal con las $2N$ primeras entradas iguales a -1 y las $2N$ restantes a 1 . Ya que con este último requerimiento \mathbf{S} deja de ser hermitica, es preferible para el cálculo numérico posterior expresar el problema como:

$$\bar{\mathbf{S}}^{-1} \bar{\mathbf{H}} \bar{\mathbf{S}} = \bar{\mathbf{E}}, \quad (45)$$

siendo $\bar{\mathbf{S}} = \mathbf{J} \mathbf{S}$, $\bar{\mathbf{H}} = \mathbf{H} \mathbf{J}$ y $\bar{\mathbf{E}} = \mathbf{J} \mathbf{E}$. Una vez diagonalizado el problema podemos extraer directamente de \mathbf{S} las relaciones:

$$\begin{aligned}\delta a_n &= \sum_{\gamma=1,\dots,2N} (U_{n\gamma}^{(n)} c_\gamma^\dagger + (V_{n\gamma}^{(n)})^* c_\gamma), \\ \delta a_{s,j} &= \sum_{\gamma=1,\dots,2N} (U_{j\gamma}^{(s)} c_\gamma^\dagger + (V_{j\gamma}^{(s)})^* c_\gamma),\end{aligned}\quad (46)$$

de manera que podemos calcular las desviaciones tanto del número de bosones como del valor de equilibrio de los espines:

$$\begin{aligned}F_{\{\delta a_n\}} &= \frac{1}{N} \sum_n \langle \Omega | \delta a_n^\dagger \delta a_n | \Omega \rangle = \sum_{\gamma,n} |V_{n\gamma}^{(n)}|^2, \\ F_{\{\delta a_{s,j}\}} &= \frac{1}{N} \sum_j \langle \Omega | \delta a_{s,j}^\dagger \delta a_{s,j} | \Omega \rangle = \sum_{\gamma,j} |V_{j\gamma}^{(s)}|^2,\end{aligned}\quad (47)$$

siendo $|\Omega\rangle$ el vacío de los *modos de Bogoliubov*, esto es, $c_m |\Omega\rangle = 0$.

Hemos diagonalizado entonces el hamiltoniano de las fluctuaciones entorno al equilibrio:

$$H_G = \sum_m \omega_m c_m^\dagger c_m. \quad (48)$$

De la inspección de los resultados anteriores deducimos varias cosas. En primer lugar, este sistema presenta una transición de fase para un valor crítico g_c . Dicho valor es dependiente de la interacción entre los elementos de la cadena, y ya hemos visto que en el límite termodinámico su valor es $g_c = 0,5$ para el caso de c.QED y $g_c = 0,69$ para el caso de iones atrapados. Las desviaciones de este valor tienen su origen en el tamaño finito del sistema que estamos considerando, aunque para los tamaños considerados éstas son despreciables. Además, si vemos las relaciones de dispersión para distintos valores del acoplo comprobamos que para el caso crítico es lineal, puesto que como es esperable en el punto crítico se cierra el *gap*, mientras que en los demás casos es parabólica. Existe por tanto una sola rama acústica.

V. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

Este trabajo resume la esencia de la idea de la simulación cuántica: dado un hamiltoniano que puede describir un sistema de materia condensada, como pueden ser los acoplos de Jahn-Teller, o un sistema de muchos cuerpos como el necesario para la producción de estados de un gran número de fotones entrelazados, nosotros hemos estudiado la implementación de uno análogo en sistemas de física atómica sobre los cuales los físicos experimentales tienen actualmente un gran dominio. Gracias a esto, los parámetros del sistema se pueden elegir a voluntad, y se pueden explorar las fases del sistema simplemente preparándolo en un estado dado y realizando una medición sobre el mismo. De esta forma uno tiene acceso a la

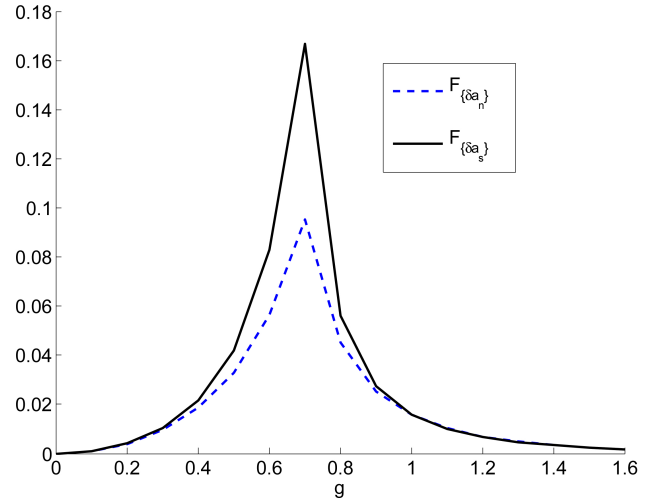


Figura 9. Fluctuaciones gaussianas de la cadena de iones para $N = 20$ sitios con $\omega = 1/t_{jk} = 2,7$. Nótese como las fluctuaciones son máximas en el punto crítico $g \sim 0,69$.

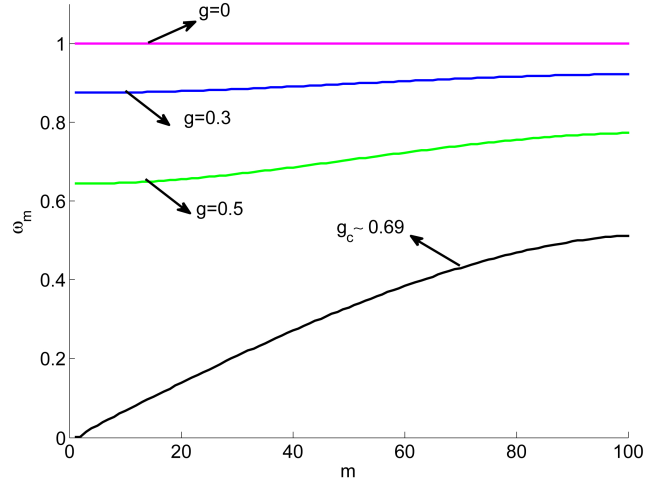


Figura 10. Relación de dispersión de las fluctuaciones para $g \leq g_c \sim 0,69$ para $N = 100$ en el caso de la cadena de iones.

información sobre los observables de manera inmediata, sin que sea necesaria una simulación numérica que en el caso de un sistema macroscópico está fuera del alcance de cualquier ordenador actual.

Con respecto a los resultados obtenidos, vemos que la descripción realizada de campo medio parece ajustarse bien salvo en el punto crítico, donde las fluctuaciones divergen. Una posible continuación del presente trabajo podría consistir en analizar la validez del *ansatz* utilizado en función del valor del acoplo g . Esto tiene especial relevancia en posibles aplicaciones a información cuántica, ya que en este contexto el estudio realizado describe una situación en la que la correlación de los espines se podría mapear a estados de fotón.

Por otro lado, la utilización de métodos numéricos como DMRG (*density matrix renormalization group*) vali-

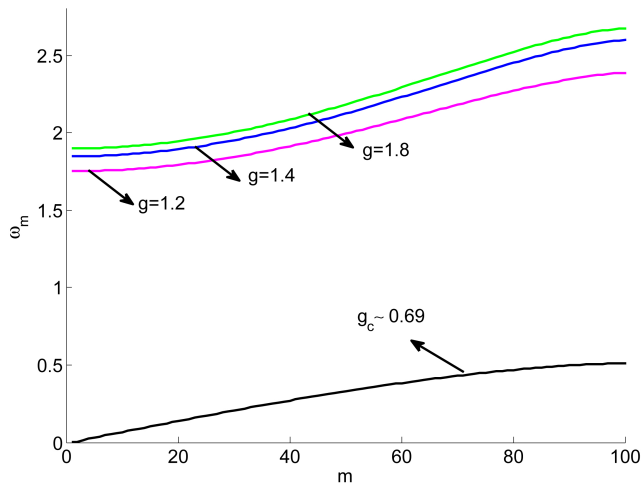


Figura 11. Relación de dispersión de las fluctuaciones para $g \geq g_c \sim 0,69$ para $N = 100$ en el caso de la cadena de iones.

daría los resultados del presente estudio puesto que en el caso de una dimensión son exactos.

Finalmente, una extensión natural del trabajo sería generalizarlo a más dimensiones, para su aplicación por ejemplo a sistemas de cristales 2D, redes triangulares, etc. En estos casos es donde la simulación cuántica surge como única vía posible de estudio del sistema y donde queda patente su potencia frente a cualquier simulación numérica.

- [1] "Quantum simulation", Nature Phys. **8** 262-299 (2012) .
- [2] John J. Bollinger *et al.*, *Engineered two-dimensional Ising interactions in a trapped-ion quantum simulator with hundreds of spins*, Nature **484** 489-493 (2012).
- [3] D. Porras, P. A. Ivanov, F. Schmidt-Kaler, *Quantum Simulation of Cooperative Jahn-Teller Systems with Linear Ion Crystals*, aceptado en Phys. Rev. Lett., preprint en

- <http://arxiv.org/abs/1201.3620> (2012).
- [4] X.-L. Deng, D. Porras, J. I. Cirac, *Effective spin quantum phases in systems of trapped ions*, Phys. Rev. A **72**, 063407 (2005).
- [5] A. Auerbach, *Interacting electrons and quantum magnetism*, Graduate texts in contemporary physics (Springer-Verlag, 1994).