

Explorando la termalización desde el punto de vista de la tipicidad en el modelo XY.

Jose Alejandro Montaña Cortes
201732643

31 de mayo de 2019

En el presente documento se resume lo trabajado durante el primer semestre del 2019 en el curso tutorial.

Dado que a lo largo del semestre se trataron varios temas, pasando por los fundamentos de la mecánica clásica, Tipicidad Canónica, Termalización y formalismo de matrices de covarianzas para sistemas fermionicos, en este documento se plasma un resumen de los conceptos y las ideas principales tratadas y del trabajo a futuro.

1. Tipicidad Canónica

Uno de los resultados más importantes estudiados en detalle, fue el de Popescu, Short y Winter [1]. El cual consiste en considerar una bipartición arbitraria del universo en un sistema de interés S y el ambiente E . Al imponer una restricción global R sobre el universo¹, estudiamos el espacio de Hilbert asociado a tal restricción, el cual puede ser visto como un subespacio del producto tensorial entre el espacio de Hilbert del ambiente y el sistema $\mathcal{H}_R \subseteq \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$, con \mathcal{H}_S y \mathcal{H}_E los espacios de Hilbert del sistema y el ambiente, cuyas dimensiones son d_S y d_E respectivamente. De esta forma se define el estado de ignorancia o estado equiprobable sobre el espacio de la restricción R como

$$\mathcal{E}_R = \frac{\mathbb{I}_R}{d_R}, \quad (1)$$

en donde \mathbb{I}_R es el operador que proyecta sobre el espacio \mathcal{H}_R y d_R es la dimensión del espacio \mathcal{H}_R . De esta forma se tiene entonces que \mathcal{E}_R es el estado máximamente mezclado en \mathcal{H}_R , esto es equivalente a seleccionar iguales probabilidades a cada estado congruente con la restricción R .

El estado canónico Ω_S del sistema, tal que es congruente con la restricción R , puede obtenerse eliminando los grados de libertad asociados al ambiente

$$\Omega_S = \text{Tr}_E \mathcal{E}_R. \quad (2)$$

¹Acá la restricción es algo muy general pues esta restricción es un espacio de Hilbert, el cual en principio puede ser arbitrario, sin embargo, en el marco de la mecánica estadística clásica, esta restricción puede ser interpretada como una restricción sobre la energía del universo.

El resultado principal que se muestra en el artículo de Popescu et al. establece que cualquier estado puro del universo $|\Phi\rangle$ consistente con una restricción global R ($|\Phi\rangle \in \mathcal{H}_R$), es tal que para cualquier subsistema “pequeño” comparado con el ambiente, el estado del subsistema resulta coincidir aproximadamente con el estado térmico del sistema.

$$\rho_S \approx \Omega_s, \quad (3)$$

en donde $\rho_S = \text{Tr}_E |\Phi\rangle \langle \Phi|$. Tal resultado se le conoce como la tipicidad canónica y establece de forma más exacta que:

Teorema de la Tipicidad Canónica: *Para cualquier estado puro muestreado con la medida de Haar $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_R \subseteq \mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_a$, $\forall \epsilon > 0$, la probabilidad de que la distancia entre la matriz reducida del sistema $\rho_s = \text{Tr}_{\mathcal{E}}(|\phi\rangle \langle \phi|)$ y el estado canónico $\Omega_S = \text{Tr}_{\mathcal{E}}(\mathcal{E}_R)$, está dada por:*

$$\text{Prob} [\|\rho_s - \Omega_s\|_1 \geq \eta] \leq \eta', \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \eta &= \epsilon + \sqrt{\frac{d_s}{d_E^{\text{eff}}}}, \\ \eta' &= 2\exp\left(-\frac{d_R \epsilon}{18\pi^3}\right), \end{aligned}$$

con $d_E^{\text{eff}} = 1/\text{Tr}\Omega_E^2$ ($\Omega_E = \text{Tr}_s \mathcal{E}_R$), la dimensión efectiva del ambiente.

Es importante notar que el resultado anterior se cumple de forma general para una restricción arbitraria R si el subsistema del universo es lo suficientemente pequeño comparado con el tamaño del ambiente. Una ilustración de esto se presenta en la figura 1, en donde se da una idea de como la tipicidad puede ser vista como un mapa en donde la probabilidad de estar fuera del mar de estados que se equilibra es exponencialmente pequeña.

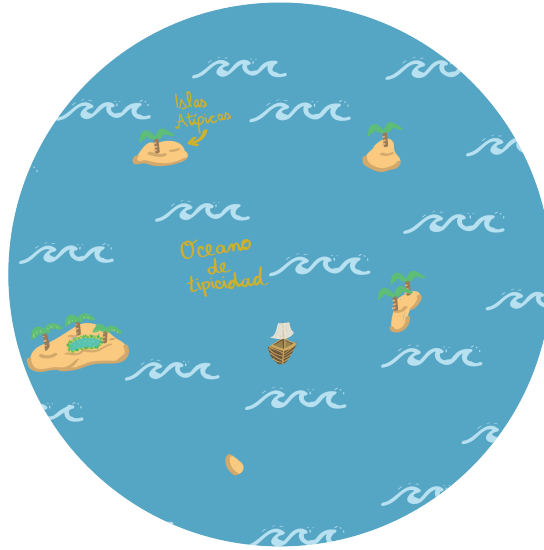


Figura 1: Ilustración del fenómeno de la tipicidad, en la imagen se ilustra como la cantidad de estados que no se equilibran (islas) es mucho menor que el océano de estados que si lo hacen.

Algo a enfatizar es que este resultado no es dinámico, es decir que no tiene en cuenta ningún tipo de evolución unitaria del estado del universo, por ende este resultado no es valido para mostrar que un subsistema cualquiera, puede alcanzar el estado térmico. Sin embargo, debido a que casi todos los estados del universo son tales que todo subsistema “pequeño”, comparados con el tamaño del universo, está aproximadamente en el estado térmico, da una idea de que al estar sometido el estado sobre una evolución arbitraria, este debería de alcanzar rápidamente el equilibrio de forma que se cumpla la tipicidad sobre el subsistema.

2. Tipicidad y evolución hacia al equilibrio

Como se mencionó anteriormente, el resultado de la tipicidad es valido para un estado y un tiempo específico, con lo cual se tiene que este resultado no permite estudiar el problema de como un sistema que se encuentra fuera del equilibrio alcanza ese estado térmico, pues según (4) aquellos estados que están fuera del equilibrio, los estados de interés, son estados atípicos, con lo cual nos podemos preguntar, bajo que circunstancias un sistema alcanza el equilibrio y que tanto fluctúa este. Aunque el problema de la termalización parezca un problema sencillo, este posee una serie de complicaciones a la hora de mostrar que un sistema físico alcanza el estado de equilibrio

- *Equilibración*: Es posible afirmar que un sistema se equilibra si su estado evo-

luciona hacía un estado en particular, el cual puede ser en el caso más general un estado mixto, y permanece en este estado (o al menos cerca de él) para todo tiempo².

- *Independencia del estado de ambiente*: Este estado de equilibrio que el sistema alcanza ha de ser independiente del estado inicial de su ambiente, es decir que en el punto en el que el sistema alcance el equilibrio, este estado ha de depender tan sólo de los parámetros macroscópicos del ambiente.
- *Independencia del estado del sistema ("subsistema")*: Si el subsistema es mucho más pequeño que el ambiente, el estado de equilibrio este subsistema no debería depender de su estado inicial.

con este desglose del problema, es posible entonces atacar cada una de estas partes por separado. Linden *et al.* [2], encontraron una manera de atacar las dos primeras partes (equilibración e independencia del ambiente), demostrando que de forma general que el alcanzar el equilibrio es una propiedad universal de los sistemas cuánticos y que además el estado de equilibrio no depende del estado del baño.

En las ideas propuestas por Linden *et al.* [2], es posible considerar un estado puro del universo $|\phi(t)\rangle$, en donde al estar el universo en un estado puro, la matriz de estado asociada en el tiempo t está dada simplemente por $\rho(t) = |\phi(t)\rangle \langle\phi(t)|$, que reescrita en términos de la base de autoenergía, se tiene que ($\hbar = 1$):

$$\begin{aligned} \rho_S(t) = \text{Tr}_{\mathcal{E}} \rho(t) &= \sum_{m,n} C_n C_m^* \text{Tr}_{\mathcal{E}} (|\psi_n\rangle \langle\psi_m|) e^{-it(E_n - E_m)} \\ &= \underbrace{\sum_n |C_n|^2 \text{Tr}_{\mathcal{E}} (|\psi_n\rangle \langle\psi_n|)}_{\omega_S} + \underbrace{\sum_{m \neq n} C_n C_m^* \text{Tr}_{\mathcal{E}} (|\psi_n\rangle \langle\psi_m|) e^{-it(E_n - E_m)}}_{\lambda_S(t)} \\ &= \omega_S + \lambda_S(t), \end{aligned} \tag{5}$$

en donde $|\psi_i\rangle = \Pi_i |\phi\rangle$ es la proyección del estado del universo sobre un estado con energía E_i , $\omega_S = \langle\rho_S\rangle_t = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \rho(t) dt$ es el estado de equilibrio y $\lambda_S(t)$ corresponde a un término dependiente del tiempo que está asociado con las fluctuaciones del sistema. Por lo tanto el estado de equilibrio se alcanza si la matriz reducida del sistema en promedio está muy cerca del estado de equilibrio para todo tiempo t , $\langle D[\omega_S, \rho_S(t)] \rangle_t \approx 0$.

El resultado principal del artículo [2] se puede enunciar de la siguiente forma

²De forma general, esta definición no especifica el tipo de equilibrio del sistema, es decir que no se especifica que el equilibrio sea térmico. El estado de equilibrio dependerá fuertemente de la condición inicial del sistema, al igual que el estado de su entorno (baño)

Equilibración débil: Todo estado puro de un sistema cuántico compuesto por un gran número de autoestados de energía³ y que evoluciona bajo un Hamiltoniano arbitrario (sin gaps de energía⁴) es tal que todo subsistema lo suficientemente pequeño se equilibrará.

La razón por la cual en la afirmación anterior se hace énfasis en que es necesario que haya bastante cambio en la evolución temporal, es debido a que para que el fenómeno de equilibración se dé, es necesario que una parte de la información del estado inicial del subsistema “salga” del subsistema.

Esta noción de evolucionar varios estados diferentes puede ser expresado matemáticamente por medio de la dimensión efectiva del promedio temporal sobre el estado $d^{\text{eff}}(\omega)$, donde $\omega = \langle \rho(t) \rangle_t$. La conexión entre estas dos cosas se puede evidenciar fácilmente expandiendo

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k e^{-iE_k t} |E_k\rangle,$$

donde $\sum_k |c_k|^2 = 1$ y por ende

$$\rho(t) = \sum_{k,l} c_k c_l^* e^{-i(E_k - E_l)t} |E_k\rangle \langle E_l|. \quad (6)$$

Imponiendo la condición de no degeneramiento sobre los niveles de energía se puede mostrar entonces que

$$\omega = \langle \rho(t) \rangle_t = \sum_k |c_k|^2 |E_k\rangle \langle E_k|, \quad (7)$$

lo cual conlleva a que esta relación está dada por

$$d^{\text{eff}}(\omega) = \frac{1}{\text{Tr}(\omega^2)} = \frac{1}{\sum_k |c_k|^4}. \quad (8)$$

Con esto en mente podemos deducir el primer teorema. Nos preguntamos primero por la distancia entre el estado de equilibrio y el estado en cualquier tiempo t , con lo cual se obtiene que

$$\rho_S - \omega_S = \sum_{m \neq n} c_m c_n^* e^{-i(E_m - E_n)t} \text{Tr}_{\mathcal{B}} |E_m\rangle \langle E_n|,$$

³La razón por la cual se pide que el estado global contenga un gran número de autoenergías pues de esta manera se asegura que hayan varios cambios a lo largo de la evolución.

⁴Se dice que un Hamiltoniano no tiene gaps degenerados de energía si cualquier diferencia de las autoenergías determina el valor de las energías consideradas; es decir que para 4 autoestados cualesquiera con energías E_k , E_l , E_m y E_n , $E_k - E_l = E_m - E_n$ implica $k = l$ y $m = n$ o $k = m$ y $l = n$. Lo cual implica que los niveles de energía son no degenerados.

de forma que al tomar el promedio temporal de la traza de la diferencia al cuadrado obtenemos que

$$\langle \text{Tr}_S [\rho_S(t) - \omega_S]^2 \rangle_t = \sum_{m \neq n} \sum_{k \neq l} \mathcal{T}_{klmn} \text{Tr}_S (\text{Tr}_B |E_k\rangle \langle E_l| \text{Tr}_B |E_m\rangle \langle E_n|),$$

en donde $\mathcal{T}_{klmn} = c_k c_l^* c_m c_n^* e^{-i(E_k - E_l + E_m - E_n)t}$. Al simplificar esta expresión se obtiene entonces que

$$\langle \text{Tr}_S [\rho_S(t) - \omega_S]^2 \rangle_t = \text{Tr}_B \omega_B - \sum_k |c_k|^4 \text{Tr}_S [\text{Tr}_B |E_k\rangle \langle E_k|^2] \leq \text{Tr}_B \omega_B^2,$$

así

$$\langle D[\omega_S, \rho_S(t)] \rangle_t \leq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d_s}{d^{\text{eff}}(\omega_B)}} \leq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d_s^2}{d^{\text{eff}}(\omega)}}, \quad (9)$$

donde $d^{\text{eff}}(\omega)1/\text{Tr}\omega^2$ y $d^{\text{eff}}(\omega)1/\text{Tr}\omega^2$ son las dimensiones efectivas del sistema compuesto y del baño respectivamente.

A partir de la ecuación (5) se identifica entonces que existen dos formas para que $\|\lambda_S(t)\|_1$ se acerque a cero. En una de estas al tomar el promedio temporal, para el caso en el que las energías asociadas estén alejadas unas de las otras, el termino de la exponencial puede tender a cero rápidamente, sin embargo, si estas estuvieran exponencialmente cerca, el tiempo que tomaría esta cantidad en hacerse cero, sería exponencialmente grande.

Por otra parte, a partir de este resultado se deduce que un mecanismo alternativo para explicar cómo se llega al equilibrio, que puede denominarse ultra-ortogonalidad de los estados, consiste en tomar dos estados cuyas energías se encuentren muy cercanas unas de las otras, de forma que⁵ con $\Omega(E) = \text{Tr}_E (|\psi_i\rangle \langle \psi_i|)$ como el estado canónico

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_E [(c_n |\psi_n\rangle + c_m |\psi_m\rangle) (c_n^* \langle \psi_n| + c_m^* \langle \psi_m|)] \\ &= |c_n|^2 \underbrace{\text{Tr}_E (|\psi_n\rangle \langle \psi_n|)}_{=\Omega(E)} + |c_m|^2 \underbrace{\text{Tr}_E (|\psi_n\rangle \langle \psi_m|)}_{=\Omega(E)} + \text{Tr}_E (|\psi_n\rangle \langle \psi_m|) + c_m c_n^* \text{Tr}_E (|\psi_m\rangle \langle \psi_n|) \\ &= \Omega(E) + c_n c_m^* \text{Tr}_E (|\psi_n\rangle \langle \psi_m|) + c_m c_n^* \text{Tr}_E (|\psi_m\rangle \langle \psi_n|), \end{aligned} \quad (10)$$

se tiene entonces que a partir de (10), si los $|\psi_i\rangle$ son estados ortogonales, se cumple que traza parcial $\text{Tr}_E (|\psi_n\rangle \langle \psi_m|) = 0$ es nula. Siendo esto una firma de cómo el equilibrio se alcanza de forma casi inmediata aún si las energías son muy cercanas entre ellas y

⁵Con la condición de que $|c_n|^2 + |c_m|^2 = 1$.

de cómo el equilibrio podría ser entendido como el traspaso de una región típica a una región atípica [2].

Con esta serie de ideas se planteó hacer un estudio de un sistema cuya solución se pudiera obtener de forma exacta y que además fuera posible obtener de forma relativamente fácil los estados reducidos del sistema. Es por esto que se decidió estudiar el modelo XY , el cual aunque es un modelo sencillo, es un modelo que proporciona bastante información acerca de distintos tipos de sistemas físicos de muchos cuerpos.

3. Modelo XY

Tal y como se mencionó anteriormente la escogencia particular de este modelo para estudiar el fenómeno de termalización es debido a una serie de propiedades interesantes que se describirán a continuación de los autoestados de este sistema.

3.1. Conceptos teóricos

En la física de muchos cuerpos, se estudian una variedad de modelos, sin embargo, en la mayoría de los casos se tiene que tales modelos no pueden ser solucionados de forma analítica, debido a su complejidad y falta de simetrías presentes en el sistema. No obstante, existe una serie de Hamiltonianos de sistemas de muchas partículas que pueden ser mapeados de forma aproximada en Hamiltonianos cuadráticos en operadores fermionicos de la forma

$$\hat{H} = \sum_{i,j}^N C_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \sum_{i,j}^N \left(A_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger + A_{j,i}^* \hat{b}_j \hat{b}_i \right), \quad (11)$$

en donde N es el número de modos y $\hat{b}_i, \hat{b}_i^\dagger$ son los operadores fermionicos de creación y destrucción respectivamente, los cuales satisfacen las siguientes relaciones de anticonmutación

$$\{\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger\} = \{\hat{b}_i, \hat{b}_j\} = 0, \quad \{\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j\} = \delta_{i,j}, \quad (12)$$

donde $\{A, B\} := AB + BA$, es el anticonmutador entre A y B .

Modelos tales como el Hamiltoniano del modelo de Hubbard [3] y Hamiltonianos de cadenas de espines (luego de aplicar una transformación de Jordan-Wigner)[3, 4, 5] son ejemplos de modelos cuyos Hamiltonianos pueden ser escritos en la forma de (11). Estos Hamiltonianos pueden ser diagonalizados por medio de una transformación de Bogoliubov-Valantin⁶. Esta transformación hace un mapeo de fermiones interactuantes

⁶La transformación de Bogoliubov-Valantin es una transformación canónica que mapea los operadores \hat{b} y \hat{b}^\dagger en los operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger . El mapeo debe ser tal que se encuentren las constantes u y v

a quasi-partículas⁷ no interactuantes.

$$\hat{a}_i = u_i^j \hat{b}_j + v_i^j \hat{b}_i^\dagger, \quad (13)$$

en donde u_i^j y v_i^j son números complejos sujetos a la restricción de que (13) debe ser una transformación canónica, es decir que los operadores \hat{a}_i cumplan las reglas de anticonmutación dadas en (12). El estudio de los Hamiltonianos de la forma (11), resulta de gran interés, pues estos Hamiltonianos tienen la particularidad de que todos sus autoestados, los cuales pueden ser representados por medio de un número de excitaciones de las cuasi-partículas descritas por \hat{a} y \hat{a}^\dagger , pertenecen a una clase especial de estados llamados estados Gaussianos fermionicos, los cuales tienen la particularidad de que estos pueden ser completamente descritos en términos de las correlaciones de segundo orden, puesto que todos los momentos de orden superior factorizan tal como estipula el teorema de Wick [6].

Con el fin de mostrar como estos conceptos se usan para solucionar el modelo XY , introduciremos los fermiones de Majorana.

3.2. Fermiones de Majorana

Los fermiones de Majorana son fermiones que son sus propias antipartículas, en el marco de la materia condensada los fermiones de Majorana (quasi partículas) pueden ser interpretados como una superposición de un estado de un electrón y un hueco[7]. Estos fermiones pueden ser representados, en el caso de un sistema de N fermiones, por medio de $2N$ operadores Hermiticos definidos como:

$$\hat{\gamma}_j = \hat{b}_j^\dagger + \hat{b}_j, \quad \hat{\gamma}_{j+N} = \frac{\hat{b}_j^\dagger - \hat{b}_j}{i}, \quad (14)$$

y la relación de anticonmutación para estos operadores está dada por:

$$\{\hat{\gamma}_\alpha, \hat{\gamma}_\beta\} = 2\delta_{\alpha\beta}, \quad (15)$$

lo cual es conocido como el álgebra de Clifford. A partir de (15) es sencillo mostrar que cualquier transformación lineal de la forma $\hat{\gamma}_\alpha = O_{\alpha\beta} \hat{\gamma}_\beta$, con $O_{\alpha\beta} \in O(2N)$ (grupo de transformaciones ortogonales), preserva el álgebra de Clifford [5]. Al efectuar esta transformación de un conjunto de fermiones $\hat{b}_1, \hat{b}_2, \dots, \hat{b}_N, \hat{b}_1^\dagger, \hat{b}_2^\dagger, \dots, \hat{b}_N^\dagger$ a los operadores de Majorana $\hat{\gamma}_1, \hat{\gamma}_2, \dots, \hat{\gamma}_N, \hat{\gamma}_{N+1}, \hat{\gamma}_{N+2}, \dots, \hat{\gamma}_{2N}$ resulta conveniente tratar este problema desde una perspectiva llamada la matriz fermionica de covarianzas, esto es debido al hecho de que como se mencionó anteriormente, los autoestados de este sistema son

tales que la transformación resulte ser canónica.

⁷Tales cuasi-partículas corresponden también con fermiones

estados Gaussianos fermionicos.

Los estados Gaussianos fermionicos pueden ser definidos como aquellos estados que cumplen el teorema de Wick[6], o equivalentemente es posible afirmar que un estado Gaussiano puede ser completamente caracterizado por sus segundo momentos. Así de esta forma para un sistema fermionico es posible escribir la matriz de densidad de un estado Gaussiano en la forma [8]

$$\rho = Z \cdot \exp \left[\frac{-i}{4} \hat{\gamma}^T G \hat{\gamma} \right], \quad (16)$$

en donde $\hat{\gamma}^T = (\hat{\gamma}_1, \dots, \hat{\gamma}_{2N})$ es el vector de operadores de fermiones de Majorana, Z es una constante de normalización y G es una matriz antisemítica con entradas reales de tamaño $2N \times 2N$. Toda matriz antisimétrica puede ser llevada a su forma diagonal por bloques haciendo uso del grupo de transformaciones ortogonales $SO(2N)$

$$OGOT = \bigoplus_{j=1}^N \begin{pmatrix} 0 & -\beta_j \\ \beta_j & 0 \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad O \in SO(2N), \quad (17)$$

en donde cada β_j se denominan los autovalores de Williamson de la matriz G . Por medio de esta diagonalización por bloques, es posible escribir (16) en la forma estandar de los estados Gaussianos⁸ [9, 5]

$$\rho = \frac{1}{2^N} \prod_{k=1}^N (\mathbb{I} + i\lambda_k \hat{\gamma}_k \hat{\gamma}_{k+N}), \quad (19)$$

donde $\hat{\tilde{\gamma}} = O^T \hat{\gamma}$ es una transformación ortogonal de $\hat{\gamma}$ y $\lambda_k \in [-1, 1]$. Esta forma estándar de escribir los estados Gaussianos puede ser interpretada como que la transformación unitaria necesaria para llevar un estado Gaussiano a su forma estándar es un tal que desacopla los modos y los lleva a un estado tal que es un producto de estados térmicos independientes que son diagonales en la base de numero (Espacio de Fock). Así los coeficientes λ_i tienen una relación con la temperatura del sistema.

Se tiene entonces que la matriz de covarianzas Γ , se expresa como

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \frac{i}{2} \text{Tr}(\rho[\gamma_\alpha, \gamma_\beta]) = \frac{i}{2} \langle [\gamma_\alpha, \gamma_\beta] \rangle, \quad (20)$$

⁸Una manera alterna de ver esta forma estandar es por medio del producto tensorial, con lo cual se tiene entonces que

$$\rho = \bigotimes_{k=1}^N \tilde{\rho}_k \quad \tilde{\rho}_k = \frac{1}{2} (1 - \lambda_i \hat{\gamma}_i \hat{\gamma}_{i+N}) \quad (18)$$

donde $[\gamma_\alpha, \gamma_\beta] = \gamma_\alpha \gamma_\beta - \gamma_\beta \gamma_\alpha$ y $\alpha, \beta = 1, \dots, 2N$. De igual manera, esta matriz puede ser llevada a su forma diagonal por bloques (forma de Williamson), por medio de una transformación ortogonal de la forma

$$O\Gamma O^T = \bigoplus_{i=1}^N \begin{pmatrix} 0 & -\lambda_j \\ \lambda_j & 0 \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad O \in SO(2N), \quad (21)$$

donde $\lambda_k = \tanh \beta_k / 2$ [10], lo cual establece una conexión entre la matriz G en (16) y la matriz de covarianzas Γ . Los autovalores de Williamson son $\lambda_k = n_k - \frac{1}{2}$, donde n_k corresponde con el número de ocupación.

En resumen, la relación de equivalencia del grupo de transformaciones ortogonales $O(2N)$ con los estados fermiónicos Gaussianos, conduce a una serie de propiedades interesantes, debidas a la “Gaussianidad”. Las cuales pueden ser aprovechadas en los estados que describen excitaciones de cuasipartículas (fermiones de Majorana). Una de estas es que si se considera el estado base del Hamiltoniano (11), entonces $\hat{b}_i |0\rangle = 0 \forall i = 1, \dots, N$. Esto junto a la definición dada en la ecuación (14), se tiene que $\hat{b}_i^\dagger |0\rangle = \hat{\gamma}_i |0\rangle$, implicando así que estados de muchas partículas pueden ser obtenidos de a partir de una transformación del estado base, tal que preserve las relaciones de anticonmutación de los operadores fermiónicos, y dado que el estado es de tipo Gaussiano, el resultante luego de la transformación será también Gaussiano⁹.

3.3. El Hamiltoniano del modelo XY

Ya habiendo introducido el formalismo de los operadores de Majorana y la matriz de covarianzas, resulta de gran interés centrarnos en el Hamiltoniano del modelo XY , el cual consiste en un conjunto de N partículas de espines $1/2$ localizadas en los sitios de una cadena d -dimensional, sin embargo en nuestro caso estamos interesados en el caso $1d$. Se tiene entonces que la cadena de N espines en donde cada espín puede interactuar con sus vecinos cercanos y además con un campo magnético externo, puede ser representada por medio del Hamiltoniano

$$H_{XY} = -\frac{1}{2} \sum_{l=0}^{N-1} \left(\frac{1+\gamma}{2} \sigma_l^x \sigma_{l+1}^x + \frac{1-\gamma}{2} \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y + \lambda \sigma_l^z \right), \quad (22)$$

donde γ se conoce como el parámetro de anisotropía y representa la diferencia entre la intensidad de la interacción en la dirección x y la interacción y , λ es la intensidad de

⁹El hecho de que todos los autoestados del Hamiltoniano de la forma (11) sean Gaussianos es de gran importancia, pues este fue uno de los argumentos principales para decidir el por qué se quiso estudiar un sistema que tuviera esta propiedad (Modelo XY).

campo magnético y σ_l^i son las matrices de pauli actuando sobre el sitio l de la cadena¹⁰. Para encontrar el espectro del Hamiltoniano (22) del modelo XY es necesario efectuar 3 transformaciones para llevar este Hamiltoniano en su forma diagonal.

3.4. Transformación de Jordan-Wigner

Un aspecto importante al solucionar Hamiltoniano del modelo XY y estudiar sus soluciones es tener en consideración el tipo de condiciones de frontera a utilizar (abiertas o periodicas), para nuestro caso nos interesaremos por las condiciones de tipo periodicas. Primero consideramos una transformación que nos permite expresar los operadores de espín (matrices de pauli) en términos de operadores de creación y destrucción fermionicos sin espín

$$\hat{b}_l = \left(\prod_{m < l} \sigma_m^z \right) \sigma_l^-, \quad \sigma_l^- = \frac{\sigma_l^x - i\sigma_l^y}{2}, \quad (23)$$

donde \hat{b}_l obedece las siguientes relaciones de conmutación

$$\{\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger\} = \{\hat{b}_i, \hat{b}_j\} = 0, \quad \{\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j\} = \delta_{i,j}. \quad (24)$$

Así tenemos que las transformaciones inversas están dadas por[12]:

$$\begin{aligned} \sigma_l^z &= 1 - 2\hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l \\ \sigma_l^x &= \left(\prod_{m < l} (1 - 2\hat{b}_m^\dagger \hat{b}_m) \right) (\hat{b}_l^\dagger + \hat{b}_l) \\ \sigma_l^y &= i \left(\prod_{m < l} (1 - 2\hat{b}_m^\dagger \hat{b}_m) \right) (\hat{b}_l^\dagger - \hat{b}_l). \end{aligned} \quad (25)$$

Con esto obtenemos entonces que los términos de interacción en el Hamiltoniano pueden ser escrito como

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_l^x \hat{\sigma}_{l+1}^x &= (\hat{b}_l^\dagger - \hat{b}_l)(\hat{b}_{l+1}^\dagger + \hat{b}_{l+1}), \\ \hat{\sigma}_l^y \hat{\sigma}_{l+1}^y &= -(\hat{b}_l^\dagger + \hat{b}_l)(\hat{b}_{l+1}^\dagger - \hat{b}_{l+1}), \end{aligned}$$

con lo cual se tiene entonces que el Hamiltoniano del modelo XY se puede escribir como

$$H_{XY} = -\frac{1}{2} \sum_l \left[(\hat{b}_{l+1}^\dagger \hat{b}_l + \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_{l+1}) + \gamma (\hat{b}_l^\dagger \hat{b}_{l+1}^\dagger - \hat{b}_l \hat{b}_{l+1}) \right] - \frac{\lambda}{2} \sum_l (1 - 2\hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l), \quad (26)$$

¹⁰Un aspecto a resaltar sobre el modelo XY es que para ciertos valores de γ y λ , este modelo coincide con el modelo de Hubbard para bosones en el limite de “Hard bosons”[3]. Para $\lambda = 1$ el Hamiltoniano (22) coincide con el modelo de ising, y una cadena de Kitaev es equivalente al modelo XY bajo una apropiada identificación entre los parámetros μ , t , Δ y μ y λ [11]

el término $-\lambda N/2$ normalmente es ignorado pues esto causa tan sólo un corrimiento en el espectro de energía. Aquí el hecho de haber usado la transformación de Jordan-Wigner hace que el Hamiltoniano sea casi diagonal, es decir que el Hamiltoniano se escribe ahora como una suma de productos de operadores de creación y destrucción, los cuales actúan de forma local, pues así de esta forma tenemos que el modelo se puede solucionar de forma exacta como se discutió anteriormente. Para ver esto más claro, resulta conveniente escribir H en términos matriciales, arreglando los operadores de creación y destrucción, como

$$H = \sum_{i,j} \left[\hat{b}_i^\dagger A_{ij} \hat{b}_j + \hat{b}_i^\dagger B_{ij} \hat{b}_j^\dagger - \hat{b}_i B_{ij} \hat{b}_j \right] - \frac{\lambda N}{2}, \quad (27)$$

en donde estos elementos de matriz pueden ser escritos como

$$A_{ij} = \lambda \delta_{ij} + \frac{1}{2}(\delta_{i+1,j} + \delta_{i,j+1}), \quad B_{ij} = -\frac{\gamma}{2}(\delta_{i+1,j} - \delta_{i,j+1}),$$

o de forma explícita

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2\lambda & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 2\lambda & 1 & 0 & \\ 0 & 1 & 2\lambda & 1 & \\ 0 & 0 & 1 & 2\lambda & \cdots \\ \vdots & & & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\gamma & 0 & 0 & \cdots \\ \gamma & 0 & -\gamma & 0 & \\ 0 & \gamma & 0 & -\gamma & \\ 0 & 0 & \gamma & 0 & \cdots \\ \vdots & & & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Así de esta forma como mencionamos antes, al poder escribir el Hamiltoniano del modelo XY en una forma cuadrática, es posible solucionar esto de forma exacta. Dado que consideraremos acá condiciones de frontera periódicas, resulta conveniente tener en cuenta esta invarianza translacional y hacer uso de una transformada de Fourier.

3.5. Transformada de Fourier

Al considerar condiciones de frontera periódicas, se hace una identificación del primer sitio con el sitio N ($\hat{\sigma}_{N+1}^\alpha \equiv \hat{\sigma}_1^\alpha$) y así consideramos la transformación¹¹

$$\hat{d}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N \hat{b}_l e^{-i\phi_k l}, \quad (28)$$

en donde la escogencia de la fase ϕ_k ha de ser tal que el álgebra preserve las relaciones canónicas de anticonmutación y que adicionalmente sea tal que refleje la condición

¹¹Al imponer esta condición se tiene ahora que las matrices A y B definidas en (27) dependerán ahora de la paridad del sector.

de frontera, lo cual se consigue imponiendo $\phi_k = \left(\frac{2k+1}{N}\right) \pi$ (sector par $\hat{b}_{l+N} = -\hat{b}_l$) o $\phi_k = \left(\frac{2k+2}{N}\right) \pi$ (sector impar $\hat{b}_{l+N} = \hat{b}_l$).

De esta forma, bajo esta transformación, el Hamiltoniano se escribe como

$$H_{XY} = \sum_{k=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} (-\lambda + \cos \phi_k) \hat{d}_k^\dagger \hat{d}_k + \frac{i\gamma}{2} \sum_{k=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} \sin \phi_k (\hat{d}_k \hat{d}_{-k} + h.c) - \frac{\lambda N}{2}. \quad (29)$$

Ahora podemos considerar una transformación canonica, como se mencionó anteriormente, para los operadores \hat{d}_k

$$\tilde{d}_k = u_k \hat{d}_k^\dagger + i v_k \hat{d}_{-k}, \quad (30)$$

en dónde u_k, v_k pueden ser escogidos como $u_k = \cos \psi_k/2$ y $v_k = \sin \psi_k/2$, tal que

$$\cos \frac{\psi_k}{2} = \frac{-\lambda + \cos \phi_k}{\sqrt{(\lambda - \cos \phi_k)^2 + (\gamma \sin \phi_k)^2}}, \quad (31)$$

así se tiene que bajo estas transformaciones el Hamiltoniano se puede escribir de forma diagonal como

$$H_{XY} = \sum_{k=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} \tilde{\lambda}_k \tilde{d}_k^\dagger \tilde{d}_k, \quad (32)$$

donde

$$\tilde{\lambda}_k := \sqrt{(\lambda - \cos \phi_k)^2 + (\gamma \sin \phi_k)^2} \quad (33)$$

Así de esta forma conseguimos el espectro del modelo XY .

4. Matriz de Covarianzas Fermionica para el modelo XY

Dado que nuestro interés en el modelo XY es el de estudiar la termalización de las matrices reducidas del sistema completo, resulta útil hacer uso de la matriz fermionica de covarianzas, introducida anteriormente, para el modelo XY . Para hacer esto es necesario escribir el Hamiltoniano (22) en términos de operadores fermionicos de Majorana, los cuales se consiguen haciendo una transformación de Jordan-Wigner de la siguiente forma

$$\hat{\gamma}_l = \left(\prod_{m<l} \hat{\sigma}_m^z \right) \hat{\sigma}_l^x, \quad \hat{\gamma}_{l+N} = \left(\prod_{m<l} \hat{\sigma}_m^z \right) \hat{\sigma}_l^y, \quad (34)$$

donde $l = 1, 2, \dots, N - 1$. De manera similar a como se hizo en (26), se tiene que

$$\hat{\gamma}_l \hat{\gamma}_{l+N} = \left(\prod_{m<l} \hat{\sigma}_m^z \right) \left(\prod_{m<l} \hat{\sigma}_m^z \right) \hat{\sigma}_l^x \hat{\sigma}_l^y = i \hat{\sigma}_l^z, \quad (35)$$

$$\hat{\gamma}_{l+N}\hat{\gamma}_{l+1} = \left(\prod_{m<l}\hat{\sigma}_m^z\right)\hat{\sigma}_l^y\left(\prod_{m<l+1}\hat{\sigma}_m^z\right)\hat{\sigma}_{l+1}^x = \hat{\sigma}_l^y\hat{\sigma}_l^z\hat{\sigma}_{l+1}^x = i\hat{\sigma}_l^x\hat{\sigma}_{l+1}^x, \quad (36)$$

$$\hat{\gamma}_l \hat{\gamma}_{l+N+1} = \left(\prod_{m<l} \hat{\sigma}_m^z \right) \hat{\sigma}_l^x \left(\prod_{m<l+1} \hat{\sigma}_m^z \right) \hat{\sigma}_{l+1}^y = \hat{\sigma}_l^x \hat{\sigma}_l^z \hat{\sigma}_{l+1}^y = -i \hat{\sigma}_l^y \hat{\sigma}_{l+1}^y, \quad (37)$$

Lo cual lleva a que el Hamiltoniano (22) pueda ser escrito como:

$$H_{XY} = \frac{i}{4} \sum_{\alpha, \beta=0}^{2N} M_{\alpha\beta} [\hat{\gamma}_{\alpha}, \hat{\gamma}_{\beta}], \quad (38)$$

donde M es una matriz antisimetrica que tiene la forma

$$M = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{M} \\ -\tilde{M} & 0 \end{bmatrix}, \quad (39)$$

con

$$\tilde{M} = \begin{bmatrix} 2\lambda & -(1-\gamma) & 0 & \cdots & 1+\gamma \\ 1+\gamma & 2\lambda & -(1-\gamma) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1+\gamma & 2\lambda & -(1-\gamma) \\ -(1-\gamma) & & & 1+\gamma & 2\lambda \end{bmatrix}. \quad (40)$$

Puesto que \tilde{M} es una matriz con entradas reales, y de tipo circulante, con lo cual, esta matriz puede ser escrita como

$$A = \begin{pmatrix} \ddots & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad (41)$$

. Es decir que esta matriz puede ser descrita tan sólo por el valor de las bandas, y adicionalmente, se tiene que:

$$A = a_0 \mathbb{I} - a_1 T + a_{-1} T^{-1} - a_2 T^2 + a_{-2} T^{-2} + \dots \quad , \quad (42)$$

en donde T es el operador de translación $T : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ $T : |k\rangle \rightarrow |k\rangle = |k+1\rangle$, con lo que se tiene entonces que para un estado $|\theta\rangle$ ¹²,

$$A |\theta\rangle = (a_0 \mathbb{I} + a_1 T + a_{-1} + \dots) \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{-in\theta} |k\rangle ,$$

así de esta forma se tiene que la matriz \tilde{M} se puede escribir como

$$M_{mn} = \frac{1}{N} \sum_{\theta_k \in (-\pi, \pi)} \omega(\theta_k) e^{\phi(\theta_k)} e^{i(m-n)\theta_k} , \quad (43)$$

con $\omega(\theta_k) = \omega(\theta_k)^* = \omega(-\theta_k)$, $\phi(\theta_k) = -\phi(-\theta_k)$, los cuales están dados por

$$\omega^2(\theta_k) := (\lambda - \cos \theta_k)^2 + \gamma^2 \sin^2 \theta_k , \quad (44)$$

y

$$\phi(\theta_k) := \arctan \left(\frac{\lambda - \cos \theta_k}{-\gamma \sin \theta_k} \right) . \quad (45)$$

Teniendo entonces que

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{mn} &= \frac{1}{N} \left[\omega(0) + (-1)^{m-n} \omega(\pi) + 2 \sum_{0 < \theta_k < \pi} \omega(\theta_k) \cos(\theta_k(m-n) + \phi(\theta_k)) \right] \\ &= \frac{\omega(0)}{N} + (-1)^{m-n} \frac{\omega(\pi)}{N} + \sum_{0 < \theta_k < \pi} \omega(\theta_k) (u_m^c(\theta_k) v_n^c(\theta_k) + u_m^s(\theta_k) v_n^s(\theta_k)) , \end{aligned} \quad (46)$$

con

$$u_m^c(\theta_k) = \sqrt{\frac{2}{N}} \cos(m\theta_k + \phi(\theta_k)), \quad u_m^s(\theta_k) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sin(m\theta_k + \phi(\theta_k)), \quad (47)$$

$$v_n^c(\theta_k) = \sqrt{\frac{2}{N}} \cos(n\theta_k), \quad v_n^s(\theta_k) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sin(n\theta_k), \quad (48)$$

¹²Acá se asume que el estado $|\theta\rangle$ puede expandirse en la base de fourier como

$$|\theta\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ik\theta} |k\rangle$$

definiendo por último $u^s(0) = v^s(\pi) = 0$ y $u^c(0) = v^c(\pi) = \frac{1}{\sqrt{N}}$, la expresión (46) se reduce a

$$\tilde{M}_{mn} = \sum_{\theta_k} \omega(\theta_k) (u_m^c(\theta_k) v_n^c(\theta_k) + u_m^s(\theta_k) v_n^s(\theta_k)), \quad (49)$$

así para el bloque superior de la matriz (39), el Hamiltoniano puede ser escrito como

$$H = \sum_{m,n=0}^{N-1} \frac{i}{4} \sum_{\theta_k}^{\pi} \omega(\theta_k) (u_m^c(\theta_k) v_n^c(\theta_k) + u_m^s(\theta_k) v_n^s(\theta_k)) [\hat{\gamma}_n, \hat{\gamma}_{m+N}] \quad (50)$$

$$H = \sum_{\theta_k}^{\pi} \omega(\theta_k) ([\hat{\gamma}_k^c, \hat{\gamma}_{k+N}^c] + [\hat{\gamma}_k^s, \hat{\gamma}_{k+N}^s]), \quad (51)$$

donde

$$\hat{\gamma}_k^{c,s} := \sum_n u_n^{c,s}(\theta_k) \hat{\gamma}_n, \quad \hat{\gamma}_{k+N}^{c,s} := \sum_n v_n^{c,s}(\theta_k) \hat{\gamma}_{n+N}. \quad (52)$$

Recordando que la matriz de covarianza fermionica está definida por (20), se tiene entonces que la transformación que lleva M a su forma de Williamson, es tal que también lleva a la forma de Williamson la matriz de covarianzas fermionica. De esta forma para un estado excitado $|\vec{n}\rangle$ tal que sea estado propio en la base (c, s, θ_k) y $m^{c,s}(\theta_k) - 1/2$, con $n^{c,s}(\theta_k)$ el número de ocupación del coseno (seno) del modo k -ésimo. La parte superior derecha de la matriz de covarianza en esta base se escribe como

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{mn} &= \sum_{\theta_k}^{\pi} [m^c(\theta_k) u_m^c(\theta_k) v_n^c(\theta_k) + m^s(\theta_k) u_m^s(\theta_k) v_n^s(\theta_k)] \\ &= \sum_{\theta_k}^{\pi} \left(\frac{m^c(\theta_k) + m^s(\theta_k)}{2} \right) (u_m^c(\theta_k) v_n^c(\theta_k) + u_m^s(\theta_k) v_n^s(\theta_k)) \\ &\quad + \sum_{\theta_k}^{\pi} \left(\frac{m^c(\theta_k) - m^s(\theta_k)}{2} \right) (u_m^c(\theta_k) v_n^c(\theta_k) - u_m^s(\theta_k) v_n^s(\theta_k)), \end{aligned} \quad (53)$$

definiendo ahora $m^{\pm}(\theta_k) = \frac{m^c(\theta_k) \pm m^s(\theta_k)}{2}$, es posible invertir la transformaciones hechas en (47), (48) y (46), así de esta forma tenemos que

$$\tilde{\Gamma}_{mn} = \underbrace{\sum_{\theta_k}^{\pi} m^+(\theta_k) e^{i\phi(\theta_k)} e^{i(n-m)\theta_k}}_{:= \tilde{\Gamma}_{mn}^+} + \underbrace{\sum_{\theta_k}^{\pi} m^-(\theta_k) e^{i\phi(\theta_k)} e^{i(n+m)\theta_k}}_{\tilde{\Gamma}_{mn}^-}. \quad (54)$$

Para la matriz $\tilde{\Gamma}_{mn}^-$, es posible cambiar el indice $n \rightarrow -n$, de forma se puede identificar que la matriz $\tilde{\Gamma}_{mn}^+$ es circulante, mientras que $\tilde{\Gamma}_{mn}^-$ es anticirculante, es decir que se puede escribir como

$$A = \begin{pmatrix} a_{-1} & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & a_2 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & a_1 & \\ \ddots & & & & & \ddots \\ & \ddots & & & & & a_0 \\ & & \ddots & & & & & \ddots \\ & & & \ddots & & & & & a_{-1} \\ & & & & \ddots & & & & & \ddots \\ & & & & & \ddots & & & & & a_{-2} \\ & & & & & & \ddots & & & & & \ddots \\ & & & & & & & \ddots & & & & & a_1 \end{pmatrix}. \quad (55)$$

De esta manera tenemos entonces que la matriz $\tilde{\Gamma}$ puede ser calculada como la transformada de Fourier de $m^+(\theta_k)e^{i\phi(\theta_k)}$ y $m^-(\theta_k)e^{i\phi(\theta_k)}$.

Referencias

- [1] Sandu Popescu, Anthony J. Short, and Andreas Winter. Entanglement and the foundations of statistical mechanics. 2(11):754–758.
- [2] Noah Linden, Sandu Popescu, Anthony J. Short, and Andreas Winter. Quantum mechanical evolution towards thermal equilibrium. *Phys. Rev. E*, 79:061103, Jun 2009.
- [3] J. I. Latorre, E. Rico, and G. Vidal. Ground state entanglement in quantum spin chains. *Quantum Info. Comput.*, 4(1):48–92, January 2004.
- [4] Eduardo Fradkin. *Field Theories Of Condensed Matter Systems Vol#82 On-demand Printing Of #52253*. CRC Press, 1 edition edition.
- [5] Alonso Botero and Benni Reznik. BCS-like modewise entanglement of fermion gaussian states. 331(1):39 – 44.
- [6] Luca Guido Molinari. Notes on wick’s theorem in many-body theory.
- [7] Martin Leijnse and Karsten Flensberg. Introduction to topological superconductivity and majorana fermions.

- [8] Christina V. Kraus, Michael M. Wolf, J. Ignacio Cirac, and Géza Giedke. Pairing in fermionic systems: A quantum-information perspective. *Phys. Rev. A*, 79:012306, Jan 2009.
- [9] Ming-Chiang Chung and Ingo Peschel. Density-matrix spectra of solvable fermionic systems. 64(6):064412.
- [10] Christina V. Kraus, Michael M. Wolf, J Ignacio Cirac, and Geza Giedke. Pairing in fermionic systems: A quantum information perspective. *Physical Review A*, 79, 10 2008.
- [11] Yuezhen Niu, Suk Bum Chung, Chen-Hsuan Hsu, Ipsita Mandal, S. Raghu, and Sudip Chakravarty. Majorana zero modes in a quantum ising chain with longer-ranged interactions. 85(3):035110.
- [12] A. F. Reyes-Lega. Some aspects of operator algebras in quantum physics. pages 1–74.