

Universidad Nacional de Córdoba

FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA, FÍSICA Y COMPUTACIÓN

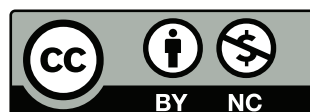
# ESTUDIO DE CORRELACIONES CUÁNTICAS EN UN ENSAMBLE DE PARES TRATADO COMO SISTEMA CUÁNTICO ABIERTO

*Trabajo Especial de Licenciatura en Física*

Taboada Juan Agustín

Director: Ricardo César Zamar

Este documento está realizado bajo licencia [Creative Commons](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)  
"Reconocimiento-NoCommercial 4.0 Internacional".



# *Agradecimientos*

Es impresionante el número de personas que me han ayudado en el transcurso de mi formación académica y personal. Es a todos y a cada uno de ellos que les dedico las siguientes líneas, las cuales nunca serán suficiente para expresar mi inmensa gratitud.

En primer lugar quiero agradecerles a mi director Ricardo Zamar y a Cecilia González que siempre han tenido un trato cálido y hogareño conmigo. Les agradezco también por contagiarme de su amor por la investigación y de su entusiasmo por aprender algo nuevo.

A todos los profesores que he tenido a lo largo de la carrera, los cuales aportaron de forma más que significativa a mi formación académica.

A todos los amigos que hice en la facultad y en particular a mi amiga Daniela Stauber que siempre, pero absolutamente siempre ha estado a mi lado.

Quiero agradecerles a Eduardo Andreozzi y a Hilario Capettini por ser grandes compañeros de estudio y por las infinitas charlas sobre las implicancias de ser un físico. En particular, le agradezco al Sr. Capettini por ser mi rival a lo largo de la carrera y por permitirme conocer lo que es la sana competencia. Con el Sr. Andreozzi no podría estar más agradecido ya que ha sido el primer amigo que hice en la FaMAF y del cual he aprendido muchísimo a nivel académico.

Pienso que sería injusto sino agradezco de forma particular a Matias Cerioni dado que es una de las personas que más me ha ayudado desde los inicios de la carrera. Le agradezco por ser mi amigo y por mostrarme que siempre podré acudir el, no importa la razón. También le agradezco a él y a David Hullet por todas las tardes-noches que hemos invertido juntos y que me han ayudado a lidiar con la amarga soledad del 2020.

Es mi deber agradecerles a Omar y Mary por prestarme su casa de verano para estudiar durante la cursada. Sin este lugar, estudiar hubiera sido muchísimo más complicado.

Es claro que nada de esto hubiera sido posible sin apoyo incondicional de mi familia y es por eso que todo esto es para ellos. A mis papás Pablo y Zulema no les puedo decir otra cosa que gracias por estar siempre para mi y por dejarme en claro que no tienen intensiones de dejar de caminar conmigo. A mis abuelos Liliana y Alejandro les doy las gracias por recibirme con los brazos abiertos en su casa cada vez que lo necesité. También les agradezco por sus palabras de aliento y por creer en mi en todo momento.

Por último le agradezco a la universidad pública, gratuita y de calidad. En particular a la FaMAF que me ha dado la oportunidad de formarme como profesional en un ambiente más que propicio.

Taboada Agustín, Córdoba, 2021

# Resumen

En este trabajo nos proponemos estudiar la dinámica de correlaciones cuánticas en sistemas de espines en sólidos. Calculamos la evolución del discord cuántico como testigo de las correlaciones que aparecen en estados preparables mediante técnicas de RMN, desde una condición inicial de no-equilibrio hasta el equilibrio térmico con una red. El sistema bajo estudio es un ensamble de pares de espines  $1/2$  con interacción dipolar intrapar, sin interacción interpar y acoplados a un ambiente. Este sistema modelo representa adecuadamente a un sistema real de pares de espines débilmente interactuantes, como los casos de los cristales hidratados gypsum y POMH, para los fines de este trabajo. En estos sistemas (como en muchos otros ejemplos de la RMN del estado sólido), la dinámica de espín presenta tres escalas de tiempo bien diferenciadas: de las coherencias (señal de RMN), de la decoherencia cuántica y de la relajación espín-red. En la primera el sistema evoluciona como un sistema cerrado, en la segunda gobernado por el acople cuántico entre espines y ambiente, y en la tercera bajo un régimen markoviano en que el ambiente se considera como un reservorio térmico (coarse-grain). En particular nos interesa analizar el estado cuántico que se puede preparar mediante la secuencia de Jeener-Broekaert en dos etapas de su evolución: durante el transitorio en que se establece el “cuasi-equilibrio” (QE) con “orden dipolar” intrapar y durante la relajación espín-red. La dinámica de los pares en ambas etapas tiene en cuenta la existencia del resto de los espines y de la red. Esto hace que el discord de un par sea representativo de todo el arreglo. En la etapa de decoherencia se usa un enfoque en que los pares interactúan con los modos de un ambiente de fonones. En la etapa markoviana las fluctuaciones corresponden a los flips de los pares vecinos.

El objetivo de este trabajo se centra en caracterizar al QE mediante la medida cuántica elegida, e investigar si estos estados tienen discord no nulo, a diferencia del equilibrio termodinámico a campo alto. Los resultados encontrados muestran que en efecto, a medida que se establece el QE se observa un comportamiento oscilatorio y amortiguado del discord hasta que alcanza su valor mínimo no nulo cuando el estado alcanza una forma diagonal en bloques en la base del Hamiltoniano dipolar. Posteriormente el discord del estado tiende a cero de forma monótona a medida que el sistema relaja al equilibrio termodinámico en una dinámica que acopla los cuasi-invariantes “energía dipolar intrapar” y “exceso de población del estado singlete”. Debido a que en los sistemas elegidos el tiempo de relajación Zeeman (T1) es muy largo, resulta una buena aproximación asumir que durante todo el proceso el “orden Zeeman” permanece saturado en un estado de “temperatura de espín infinita”.

Este trabajo contribuye con el cálculo de una medida de correlación cuántica en un arreglo

ordenado de pares de espines, lo cual representa un resultado novedoso en la RMN de estado sólido ya que trabajos previos se enfocan en sistemas de pares no correlacionados (pares disueltos en un líquido).

# Abstract

In this work, we propose to study the dynamics of the quantum correlations for spin systems in solids. We compute the evolution of the quantum discord as a witness of the quantum correlation that appears in states prepared by NMR techniques. The system under study is an ensemble of pairs of spin  $1/2$  with dipolar interaction between the elements of each pair and coupled to an environment. This model represents very well a real system of weakly interacting spin  $1/2$  pairs as for the cases of hydrated crystals like gypsum and POHM. For these systems the spin dynamics presents three time scales well-differentiated: the decay of the NMR signal, quantum decoherence and spin-lattice relaxation. At the first stage, the dynamics of the system is unitary, at the second the dynamics is governed by the coupling between the spin system and the environment. Finally, the evolution is markovian and the environment is treated as a heat bath. In particular, we are interested in analyzing the quantum state that can be prepared by the Jeener-Broekaert sequence within two stages of its evolution: during its evolution towards quasi-equilibrium (QE) with intrapair dipolar order and during the spin-lattice relaxation. The dynamics of the pairs take into account the presence of each spin in the ensemble and the lattice. This makes the quantum discord of a pair a representative quantity for the whole arrangement. Within the decoherence stage, we use the approach in which the pairs interact with normal modes of a phonon environment. In the markovian stage the fluctuations correspond to the flips of neighboring pairs.

The goal of this work focuses in characterize the QE through the selected measure and investigate if these states, in contrast to those in thermal equilibrium at high fields, have non-zero discord. The results found here show that indeed, as the QE is established, the quantum discord has a damped oscillatory behavior until it reaches a non-zero stationary value. Later the discord goes to zero as the system relaxes toward thermal equilibrium through a dynamics which couples the quasi-invariants “intrapair dipolar energy” and “singlet”. Given that for the system under study the relaxation time  $T_1$  is very long it is a good approximation assuming that during the whole process the “Zeeman order” stay saturated in a state of “infinite spin temperature”.

This work contributes with the calculus of a measure of the quantum correlations for an ordered arrangement of pair of spins. This represents a new result from the NMR in solids perspective given that previous studies focus on uncorrelated pairs (pairs dissolved in a liquid)

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Marco Teórico</b>	<b>4</b>
2.1. Estados Cuánticos . . . . .	4
2.1.1. Operador Densidad . . . . .	4
2.2. Sistemas Cuánticos y sus Operaciones . . . . .	5
2.2.1. Qubits . . . . .	5
2.2.2. Sistemas Bipartitos . . . . .	6
2.2.3. Operaciones Cuánticas . . . . .	7
2.2.4. Medición y Observación . . . . .	8
2.3. Evolución de Sistemas Cuánticos . . . . .	9
2.3.1. Sistemas Cerrados . . . . .	9
2.3.2. Sistemas Cuánticos Abiertos . . . . .	10
2.4. Cuasiequilibrio Termodinámico . . . . .	13
2.4.1. Sistema de espines en campos altos . . . . .	13
2.4.2. Sistema de espines en campos bajos . . . . .	15
2.5. Elementos de Información Cuántica . . . . .	19
2.5.1. Definiciones Básicas . . . . .	19
2.5.2. Discord Cuántico . . . . .	21
<b>3. Pares de Espines 1/2</b>	<b>25</b>
3.1. Decoherencia . . . . .	26
3.2. Relajación . . . . .	29
<b>4. Resultados</b>	<b>33</b>
4.1. Decoherencia . . . . .	33

4.2. Relajación . . . . .	37
<b>5. Conclusiones</b>	<b>40</b>
<b>A. Forma de Bloch y Entropía Condicional</b>	<b>42</b>
A.1. Extremos de la Entropía Condicional Para Estados $X$ . . . . .	45

# Capítulo 1

## Introducción

El rastro más significativo de “no-clasicidad” en un sistema cuántico es la existencia de correlaciones que no tienen contraparte clásica. Los diferentes métodos para cuantificar esta característica se encuentran entre los temas más estudiados en el área de fundamentos de la física cuántica y en diversas aplicaciones en el campo del procesamiento cuántico de la información en la última década [1]. Desde los inicios de la cuántica, el concepto de correlación cuántica estuvo asociado con el de entrelazamiento. Este interés creciente por los fenómenos no-clásicos, tanto desde la física básica como en el del progreso de la computación e información cuántica, llevó a la investigación teórica a dar con otras medidas de los fenómenos no-clásicos, como el *discord cuántico*. [2], [3]. Este es un concepto más amplio que el de entrelazamiento, pero no menos intrigante. Por ejemplo, es posible encontrar discord cuántico en un estado mezcla separable de un sistema compuesto, en el que el entrelazamiento es nulo, y estados como éstos pueden ser utilizados como fuentes valiosas para tecnologías de información cuántica. Entonces, la comprensión profunda de este concepto y su cuantificación se ha convertido en un objetivo importante para la física cuántica actual. En ese contexto, la RMN se presenta como uno de los campos donde es posible efectuar mediciones y cálculos teóricos de este tipo de correlación cuántica [4]. Asociado con este fenómeno, en última instancia interesa su dinámica en presencia de decoherencia y relajación, distintas facetas del acople con un ambiente externo. El estudio de estos problemas va en el sentido de profundizar en la relación entre los experimentos accesibles en la RMN con la problemática fundamental de la mecánica cuántica.

Es conocido que en los estados que se pueden preparar generalmente en RMN, el grado de entrelazamiento es muy bajo o nulo [5]. Los cálculos para un par de espines muestran que para tener entrelazamiento no nulo se necesitan temperaturas por debajo de 20 mK [6]. Entonces, mientras en general no es esperable poder observar signos de entrelazamiento en experimentos de RMN a temperaturas no extremadamente bajas, surge la expectativa de detectar discord cuántico y su dinámica debido a la influencia del ambiente, en estados accesibles para la mayoría de los laboratorios.

Existen antecedentes recientes de estudios por RMN de la dinámica del discord bajo decoherencia producida por ruido térmico, en un sistema de dos espines ligados por acople



J, en un líquido. En este sistema se ha estudiado la dinámica de las correlaciones clásica y cuántica bajo decoherencia **no** adiabática [7].

Por otro lado, en un estudio teórico se investigó la dependencia con la temperatura del discord cuántico de un par de espines con interacción dipolar, en presencia de un campo externo y en equilibrio térmico [8]. En tal trabajo se encuentra un discord muy pequeño en comparación al encontrado en presente estudio.

En este trabajo final nos proponemos describir el discord cuántico de un sistema de pares de espines con interacción dipolar interna, pero no interactuantes entre pares. Nos interesa usar este modelo para investigar propiedades cuánticas que puedan presentar estados de cuasi-equilibrio (QE), como el estado de “orden” dipolar intrapar.

Históricamente los estados de cuasi-equilibrio han sido estudiados e interpretados como estados termodinámicos. En ese enfoque, se utiliza la palabra “orden dipolar” para referir a una situación apartada del estado de equilibrio, por ejemplo un estado de “entropía” menor y con una temperatura de espín mucho más baja que la del equilibrio. Así, se refiere como orden dipolar al estado que alcanza un sistema de espines interactuantes “enfriados” por demagnetización adiabática. La interpretación microscópica semi-clásica asocia el estado ordenado con un “alineamiento” de cada espín con un campo local o campo medio producido por el resto de los espines.

El QE se alcanza en una escala de tiempo mucho menor que la correspondiente a la relajación y por lo tanto no representa un equilibrio genuino, por lo que se ponen de manifiesto varias dudas respecto a la validez de la interpretación termodinámica. Al día de hoy la descripción de tales estados se realiza en el plano fenomenológico, en base a hipótesis de carácter estadístico. En la última década ha surgido la idea de la decoherencia adiabática como el mecanismo que conduce al cuasi-equilibrio [9], [10]. Este nuevo punto de vista permite abandonar la idea termodinámica y ver a tales estados como consecuencia de una dinámica irreversible de un sistema cuántico abierto. En esta visión, nos resulta natural preguntarnos si existe conexión entre correlación cuántica y estado de QE. Un avance en este sentido puede aportar a la interpretación microscópica de lo que fenomenológicamente se denominó orden dipolar.

Entonces la propuesta de este trabajo final se centra en describir la dinámica del discord para un estado de cuasi-equilibrio asociado con el H hamiltoniano dipolar intrapar. Adoptamos el discord como una medida de correlaciones cuánticas que pueda estar presente en esta clase de estados. La escala de tiempo en que se establece el cuasi-equilibrio (orden dipolar) es suficientemente corta como para asumir que el sistema observado no intercambia energía con los grados de libertad del ambiente, sin embargo, el acople adiabático con ese ambiente causa la decoherencia. El estado de cuasi-equilibrio así formado solo evoluciona en una escala de tiempo mucho mas larga, debido a la relajación espin-red (que sí involucra intercambio de energía) y el valor de expectación de la energía intrapar decae por relajación.

El objetivo entonces es evaluar el discord de un par representativo, en el contexto del modelo teórico de la referencia [10], en dos situaciones dinámicas diferentes, para describir

en cada caso la evolución de la correlación cuántica.

(i) En una de las situaciones, consideraremos el estado obtenido inmediatamente luego de la aplicación del par de pulsos de rf desfasados de la secuencia de Jeener-Broekaert y estudiaremos la evolución del discord hasta que el sistema alcanza el cuasi-equilibrio debido a la decoherencia adiabática. Es decir que tomamos como hipótesis que la decoherencia adiabática es la que permite al estado inicial transitar hacia el cuasi-equilibrio.

(ii) En un segundo ejemplo, consideraremos la dinámica de relajación espín-red del estado dipolar intra-par acoplado con el cuasi-invariante “singlete” por el mecanismo de relajación cruzada a través de la red. En este caso, la dinámica del estado es regida por la ecuación maestra markoviana de altas temperaturas. Seguiremos el análisis de la referencia [12] para la sal hidratada POHM. Nuestra contribución consiste en el cálculo de la evolución del discord en la escala de tiempo de la relajación hasta el equilibrio térmico.

Este análisis nos permite observar cómo el discord evoluciona a medida que se establece el estado de orden dipolar y cómo cambia a medida que el mismo relaja al equilibrio.

El trabajo se divide en 5 capítulos más un apéndice. En el capítulo 2 se presenta la teoría necesaria. En particular hacemos un repaso general del operador densidad y sus propiedades más básicas. También se hace una breve introducción al concepto de sistemas cuánticos abiertos y se presentan las distintas evoluciones de interés para este trabajo. Se introduce el concepto de cuasiequilibrio y pone de manifiesto su relación con la decoherencia. Finalmente, se introducen los conceptos más elementales de la teoría de la información cuántica haciendo énfasis en el discord como primer medida de correlaciones más allá del entrelazamiento.

El capítulo 3 está dedicado a presentar los estados cuyo discord calcularemos. Básicamente se hace una derivación detallada de la evolución de los estados en cuestión siguiendo las referencias [11] y [12]. Una vez obtenida dicha evolución se procede a escribir los estados en términos de las matrices de Pauli y en el caso de ser necesario, se aplica una transformación unitaria para llevarlos a la llamada forma de Bloch normal.

En el capítulo 4 se presentan los resultados, es decir, la evolución del discord tanto en el régimen de decoherencia como en el de relajación y se comparan estos resultados con trabajos similares.

En el capítulo 5 se presentan las conclusiones del trabajo.

Por último, en el apéndice se muestra de forma resumida los pasos para llevar un estado arbitrario a la forma Bloch y se hace una derivación breve de la expresión para la entropía condicional asociada a un par de qubits.

# Capítulo 2

## Marco Teórico

### 2.1. Estados Cuánticos

En los próximos capítulos se utilizará el operador densidad para describir estados cuánticos. Dado que este operador es el sujeto de estudio en este trabajo, se dedicará la siguiente sección para introducir de forma sintética su definición y sus propiedades.

#### 2.1.1. Operador Densidad

Se define al operador densidad como un operador que cumple las siguientes propiedades

- $\rho$  es no-negativo, es decir:

$$\langle \phi | \rho | \phi \rangle \geq 0 \quad (2.1)$$

Nótese que esto implica hermiticidad del operador densidad (i.e.,  $\rho^* = \rho$ ).

- $\text{tr}(\rho) = 1$

Una cosa a remarcar es que el conjunto de los operadores densidad no forman un espacio vectorial. Esto resulta claro al notar que una combinación lineal arbitraria de operadores densidad, no necesariamente resulta en un operador densidad, es decir que

$$\sigma = \alpha\rho_1 + \beta\rho_2 \implies \text{tr}(\sigma) = \alpha + \beta = 1 \iff \alpha = 1 - \beta \quad (2.2)$$

Para que el estado  $\sigma$  sea positivo, debemos pedir que los coeficientes  $\alpha, \beta$  sean reales y menores a 1. Entonces vemos que las combinaciones lineales de la forma

$$\sigma = \lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2, \quad 0 \leq \lambda \leq 1 \quad (2.3)$$

cumplen con los requisitos para ser operadores densidad. La suma 2.3 es lo que se conoce como una suma convexa y por lo tanto el conjunto de los operadores densidad representa un conjunto convexo.

## Estados Mixtos y Puros

En base a las propiedades del operador densidad podemos ver que operadores de la forma

$$\rho = \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|, \quad \sum_j p_j = 1, \quad |\psi_j\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.4)$$

son operadores densidad que describen ensambles. Estos estados representan lo que se conoce como una *mezcla estadística* y reciben el nombre de *estados mixtos*. Los coeficientes  $p_j$  representan la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado  $|\psi_j\rangle$ . Cuando se tiene una probabilidad del 100% de encontrarse en algún estado  $|\psi_j\rangle$ , el estado 2.4 se reduce a

$$\rho = |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \quad (2.5)$$

y a esta clase de estados se los conoce como *estados puros*.

Hasta acá se ha dado lo indispensable para entender qué es el operador densidad. En la siguiente sección se presentarán sistemas de interés para este trabajo.

## 2.2. Sistemas Cuánticos y sus Operaciones

### 2.2.1. Qubits

Consideremos un sistema cuántico cuyo espacio de Hilbert es de dimensión dos. Denominamos a este tipo de sistemas **qubits** (quantum bits), que es la unidad de información principal de la teoría de la información cuántica. El motivo es que cada uno de los elementos de cualquier base del espacio se puede poner en correspondencia con los valores 0 y 1 de un bit de información.

Sea entonces  $|\psi\rangle = a_0 |0\rangle + a_1 |1\rangle \in \mathcal{H}$ , con  $\{|i\rangle\}_{i=0}^1$  una base orto-normal (BON),  $a_i \in \mathbb{C}$  y  $|a_0|^2 + |a_1|^2 = 1$ . Luego, la matriz densidad asociada al estado puro  $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$ , en la base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , resulta

$$\rho = \begin{pmatrix} |a_0|^2 & a_0 \bar{a}_1 \\ \bar{a}_0 a_1 & |a_1|^2 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

Ahora bien, para representar cualquier estado de un qubit podemos utilizar las matrices de Pauli  $\{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ . Estas más la identidad  $2 \times 2$  forman una base del espacio de las matrices  $2 \times 2$ , es decir, cualquier matriz compleja  $2 \times 2$  puede ser escrita del siguiente modo:

$$\chi = \sum_{j=0}^3 \beta_j \sigma_j \quad (2.7)$$

siendo  $\sigma_0$  la identidad y  $\beta_j \in \mathbb{C}$ . Dado que las matrices de Pauli son autoadjuntas,<sup>1</sup> podemos descomponer cualquier operador autoadjunto como:

$$\Omega = \sum_{j=0}^3 \alpha_j \sigma_j; \quad \alpha_j \in \mathbb{R} \quad (2.8)$$

---

<sup>1</sup>Al estar hablando de espacios de dimensión finita, decir que una matriz es hermítica o autoadjunta es lo mismo.

Con estos argumentos y recordando que la matriz densidad es un operador autoajunto de traza 1, podemos escribir

$$\rho = \frac{1}{2} \left( I + \sum_{j=1}^3 \alpha_j \sigma_j \right), \quad \alpha_j \in \mathbb{R} \quad (2.9)$$

En general se usará la siguiente notación (más compacta) para la descomposición anterior.

$$\rho = \frac{1}{2} (I + \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}) \quad (2.10)$$

donde a  $\vec{\alpha}$  se lo conoce como vector de *Bloch*. Debido a la positividad de la matriz densidad las componentes del vector de Bloch deben satisfacer la siguiente desigualdad

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 \leq 1 \quad (2.11)$$

### 2.2.2. Sistemas Bipartitos

Al considerar un sistema físico compuesto de dos partes  $A$  y  $B$  con espacios de Hilbert  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$ , el espacio de Hilbert total, asociado al sistema  $A + B$ , está dado por el producto tensorial entre  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$ . Una base ortonormal de este nuevo espacio es la base producto:  $\{|ij\rangle\} = \{|i\rangle_A \otimes |j\rangle_B\}$  con  $\{|i\rangle_A\}$  y  $\{|j\rangle_B\}$  las respectivas bases de  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$ .

Para el caso en el que  $\dim(\mathcal{H}_A) = \dim(\mathcal{H}_B) = 2$  (i.e., qubits) el operador densidad de un estado arbitrario puede escribirse como

$$\rho = \frac{1}{4} \left( I_{A,B} + \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}_A + \vec{\beta} \cdot \vec{\sigma}_B + \sum_{ij} T_{ij} \sigma_{i,A} \sigma_{j,B} \right) \quad (2.12)$$

donde  $T_{ij}$  es conocida como la matriz de correlaciones. Se puede demostrar [31] que la matriz 2.12 es unitariamente equivalente a la siguiente

$$\tilde{\rho} := U^* \rho U = \frac{1}{4} \left( I_{A,B} + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}_A + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}_B + \sum_i c_i \sigma_{i,A} \sigma_{i,B} \right) \quad (2.13)$$

Esta descomposición tan particular y útil se conoce como **forma normal de Bloch**, y el hecho de que exista una transformación unitaria de entre  $\rho$  y  $\tilde{\rho}$  tiene consecuencias favorables que serán señaladas más adelante.

### Algunos estados importantes

Los estados de dos qubits más generales están dados ya sea por 2.12 o por 2.13, sin embargo, existen estados que destacarán por su simpleza.

#### Estados $X$

Estos estados se escriben como

$$\rho_X = \frac{1}{4} \left( I_{AB} + a_z \sigma_{A,z} + b_z \sigma_{B,z} + \sum_i c_i \sigma_{A,i} \sigma_{B,i} \right) \quad (2.14)$$

y su representación matricial, en la base producto, toma la siguiente forma

$$\rho_X = \begin{pmatrix} 1 + a_z + b_z - c_z & 0 & 0 & c_x - c_y \\ 0 & 1 + a_z - b_z - c_z & c_x + c_y & 0 \\ 0 & c_x + c_y & 1 - a_z + b_z - c_z & 0 \\ c_x - c_y & 0 & 0 & 1 - a_z - b_z + c_z \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

De 2.15 vemos inmediatamente por qué el atributo  $X$ .

Un subconjunto de estados  $X$  muy importante y que aparecerán más adelante, es ed de los:

### Estados de Bell Diagonal

Estos estados son un caso muy particular de los estados  $X$  en donde los vectores de Bloch  $\alpha$  y  $\beta$  (o  $a$  y  $b$ ) son idénticamente nulos. Esto es

$$\rho_D = \frac{1}{4} \left( I_{AB} + \sum_i c_i \sigma_{A,i} \sigma_{B,i} \right) \quad (2.16)$$

### 2.2.3. Operaciones Cuánticas

En ocasiones es necesario contar con una expresión explícita de la evolución de un estado cuántico. Supongamos que deseamos estudiar la dinámica de un sistema, digamos  $S$ , acoplado a otro sistema que sugestivamente llamaremos ambiente ( $E$ ). Sabemos que la dinámica de  $S + E$  estará dada por un mapa unitario<sup>2</sup>. Dado que el espectro de un operador, al igual que su traza son invariantes ante transformaciones unitarias, es claro que el operador resultante de esta operación seguirá siendo un operador densidad. Es decir que las operaciones unitarias mapean operadores densidad a operadores densidad. El escenario cambia cuando se observa solamente el subsistema  $S$  ya que su evolución no será unitaria. Entonces es razonable exigir que todo mapa  $\mathcal{E}$  que represente un cambio en  $\rho$  cumpla con los siguientes requisitos [13]:

- El mapa  $\mathcal{E}[\cdot]$  debe respetar la convexidad del espacio de las matrices densidad

$$\mathcal{E} \left[ \sum_i p_i \rho_i \right] = \sum_i p_i \mathcal{E}[\rho_i] \quad (2.17)$$

- $\text{tr}(\mathcal{E}[\rho])$  es la probabilidad de que la transformación  $\rho \rightarrow \mathcal{E}[\rho]$  ocurra, con lo cual

$$0 \leq \text{Tr}(\mathcal{E}[\rho]) \leq 1 \quad (2.18)$$

- $\mathcal{E}[\rho]$  tiene que ser un mapa *completamente positivo* (CP). Este requisito es más fuerte que la positividad del mapa, que significa que  $\mathcal{E}[\rho]$  es un operador positivo. Para un mapa CP, consideremos la transformación  $\mathcal{E} \otimes I$  dada por:

$$(\mathcal{E} \otimes I) \left[ \sum_\alpha A_\alpha \otimes B_\alpha \right] = \sum_\alpha \mathcal{E}[A_\alpha] \otimes B_\alpha \quad (2.19)$$

con  $A_\alpha$  y  $B_\alpha$  operadores sobre  $\mathcal{H}_n$  y  $\mathcal{H}_m$ , siendo  $\mathcal{H}_m$  un espacio de Hilbert de dimensión  $m \in \mathbb{N}$ .  $\mathcal{E}[\cdot]$  es una transformación completamente positiva si la operación compuesta  $\mathcal{E} \otimes I$

<sup>2</sup>Esto se debe a que el sistema  $S + E$  está aislado del exterior.

sobre el espacio  $\mathcal{H}_n \otimes \mathcal{H}_m$  mapea operadores positivos en operadores positivos para todo  $m$ . Físicamente este es un requerimiento razonable porque las transformaciones compuestas pueden ser vistas como una operación solo sobre el sistema que representa  $\mathcal{H}_n$ , sin influenciar lo que resta del sistema compuesto.

Sabemos qué requisitos debe cumplir un mapa para ser físicamente válido, la pregunta que surge es ¿cómo está caracterizado? La respuesta está dada por el teorema de representación de Kraus [13]

**Teorema 1** *Un mapa lineal  $\mathcal{E}[\cdot]$ , es completamente positivo y satisface  $0 \leq \text{Tr}(\mathcal{E}[\cdot]) \leq 1$  para todo estado  $\rho$  si y solo si existe un conjunto numerable de operadores  $\{E_j\}$  tales que la operación  $\mathcal{E}[\cdot]$  se puede escribir como*

$$\mathcal{E}[\rho] = \sum_j E_j \rho E_j^* \quad (2.20)$$

con  $0 \leq I - \sum_j E_j^* E_j$ .

Se dice que una transformación lineal CP que cumple  $\sum_j E_j^* E_j = I$  preserva la traza. En efecto, si se cumple esta condición se puede ver que  $\text{tr}(\mathcal{E}[\rho]) = \text{tr}(\rho) = 1$ . Luego, si  $\rho$  es un estado, entonces  $\mathcal{E}[\rho]$  también lo será. De ahora en adelante cuando hablemos de **operaciones cuánticas** se estará haciendo referencia a mapas completamente positivos que preservan la traza (CPTP).

Un mapa que resulta de gran interés para este trabajo es la **traza parcial**, la cual se define como sigue.

**Definición:** Sea  $\rho_A \otimes \rho_B$  un operador densidad actuando sobre un sistema compuesto por dos partes  $A$  y  $B$ , cuyo espacio de Hilbert asociado es  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ . Se define la traza parcial según  $B$  como un mapa lineal  $T : \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \rightarrow \mathcal{H}_A$ , tal que  $T(\rho_A \otimes \rho_B) =: \text{tr}_B(\rho_A \otimes \rho_B) = \rho_A$ . De igual forma se puede definir la traza parcial según  $A$ .

La necesidad de introducir la traza parcial surge cuando uno desea estudiar solo una de las partes del sistema  $A + B$ . Muchas veces resulta imposible estudiar el sistema completo ya que una de las partes puede estar fuera de nuestro control y por lo tanto debemos trazar sobre sus variables. Se suele decir que cuando uno toma la traza parcial (para estudiar una de las partes) que el sistema se abre, ya que la dinámica deja de ser unitaria y por lo tanto no puede ser descripta en el marco de sistemas cuánticos cerrados.

## 2.2.4. Medición y Observación

Otros mapas que resultan de gran interés son los denominados mapas probabilísticos y que están relacionados con el proceso de medición. Estos mapas están dados por el postulado de medición. Concretamente postulamos que de una *medición*  $A$ , cuyos  $n$  valores posibles  $a_k$  están asociados a  $n$  operadores  $A_k$  (que cumplen  $\sum_k A_k^* A_k = I$ ), el estado del sistema luego de *medir* y *observar* el resultado  $k$  está dado por

$$\rho_k = \frac{A_k \rho A_k^*}{\text{tr}(A_k \rho A_k^*)} \quad (2.21)$$

donde  $\rho$  es el estado previo a la medición. La probabilidad de obtener el resultado  $k$ -ésimo está dada por  $p_k = \text{tr}(A_k \rho_k^*)$ .

La transformación  $\rho \rightarrow \rho_k$  se llama *selección* y está dada por el hecho de observar el resultado de la medición (el  $k$ -ésimo en este caso). Si medimos  $A$  y no observamos (no seleccionamos) entonces el estado luego de medir es una combinación convexa de los resultados posibles

$$\rho_A = \sum_k p_k \rho_k = \sum_k A_k \rho A_k^* \quad (2.22)$$

En una medición *proyectiva* o de von Neumann, los operadores  $A_k$  son proyectores ortogonales:  $A_k = P_k$ ,  $P_i P_j = \delta_{ij} P_j$  para  $i, j = 1 \dots n$ .

Una característica clave de las mediciones proyectivas es que son repetibles, es decir que el estado luego de medir permanece invariante ante nuevas mediciones. Por otro lado, la mayoría de las mediciones no son repetibles. En consecuencia, nos vemos obligados a adoptar un esquema más general que el anterior. Esto nos conduce a relajar la condición de ortogonalidad y utilizar operadores positivos  $E_i$  (*Positive Operator Value Measures*, POVM) definidos como cualquier partición de la identidad:  $\sum_n E_i = I$  que a su vez satisfacen  $E_i = E_i^*$ ,  $E_i \geq 0$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

## 2.3. Evolución de Sistemas Cuánticos

En esta sección veremos las ecuaciones que rigen la evolución de los sistemas cuánticos. A tal fin, debemos hacer entre la distinción sistemas cerrados y abiertos. Comencemos con la evolución de los sistemas cerrados.

### 2.3.1. Sistemas Cerrados

El 4to postulado de la MC dice que la evolución de un sistema está dado por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \partial_t |\psi_j(t)\rangle = H |\psi_j(t)\rangle \quad (2.23)$$

entonces la evolución de un estado  $\rho := \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|$ , está dada por

$$\rho(t) = U(t) \rho(t_0) U^*(t), \quad U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (2.24)$$

o equivalentemente

$$i\hbar \partial_t \rho(t) = [H, \rho(t)] \iff \partial_t \rho(t) = \mathcal{L}[\rho(t)], \quad \mathcal{L} := -\frac{i}{\hbar} [H, \cdot] \quad (2.25)$$

El operador  $\mathcal{L}$  se lo conoce como el “*operador de Liouville*”, y si  $H$  es independiente del tiempo, también lo es  $\mathcal{L}$ . En este caso, se tiene que

$$\rho(t) = \exp(\mathcal{L}(t - t_0)) \rho(t_0) \quad (2.26)$$

Una vez conocida 2.25 para  $\rho(t_0)$ , el operador  $\rho(t)$  nos brinda toda la información necesaria sobre nuestro sistema. Dado un observable  $O$ , el valor medio del mismo está dado por  $\langle O \rangle(t) = \text{Tr}(O \rho(t))$ .



### 2.3.2. Sistemas Cuánticos Abiertos

Habiendo discutido brevemente la evolución de sistemas cerrados, pasamos a discutir la noción de sistema abierto. El objetivo se reduce a describir la dinámica de un sistema  $S$  que interactúa con otro sistema que llamaremos ambiente  $E$ . El espacio de Hilbert total está dado por el producto tensorial de los subespacios correspondientes, esto es  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ . Sabemos que sea cual sea la dinámica que gobierne a nuestro sistema  $S$ , tiene que ser descrita por un mapa completamente positivo. Comencemos considerando el sistema total  $S + E$ , dado que este es un sistema cerrado, la evolución será de la forma 2.24 y por lo tanto el sistema de interés se obtiene trazando sobre  $E$

$$\rho(t)_S = \text{tr}_E[U(t)\rho(t_0)U^*(t)] \quad (2.27)$$

Debido a que el hamiltoniano total es de la forma

$$H = H_S \otimes I_E + I_S \otimes H_E + H_I \quad (2.28)$$

donde el  $H_j$  es el hamiltoniano libre (i.e., sin interacciones) del sistema  $j$  ( $j = \{S, E\}$ ), y  $H_I$  es el hamiltoniano que describe la interacción entre  $S$  y  $E$ , el operador  $U(t)$  no factoriza (i.e.,  $U(t) \neq U_S(t) \otimes U_E(t)$ ). Por lo tanto los sistemas  $S$  y  $E$  intercambian constantemente información.

#### Mapas Dinámicos

Dado nuestro sistema de interés, nos interesa reescribir 2.27 como un *mapa dinámico* que actúe en  $\mathcal{H}_S$  y conecte los estados del sistema a distintos tiempos  $t_0$  y  $t_1$ :

$$\mathcal{E}_{(t_0, t_1)} : \rho_S(t_0) \rightarrow \rho_S(t_1) \quad (2.29)$$

#### Mapas Dinámicos Universales

Se llamará mapa dinámico universal (UDM) a un mapa dinámico independiente del estado sobre el que actúa y que por lo tanto, describe una evolución plausible para cualquier estado  $\rho_S$ .

El resultado que sigue es importante ya que las evoluciones que consideraremos cumplen con las hipótesis de este teorema.

**Teorema 2** *Un mapa dinámico es un UDM si y solo si es inducido a partir de un sistema extendido con condición inicial  $\rho(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_E(t_0)$  donde  $\rho_E(t_0)$  es fijado para cada  $\rho_S(t_0)$ .*

Los UDM tienen además la propiedad de ser lineales y completamente positivos [14]. Del teorema enunciado, podemos ver que si partimos de 2.24, para la evolución del sistema cerrado  $S + E$ , cuyo estado inicial es de la forma  $\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_E(0)$ , se tiene que el mapa

$$\rho_S(t) = \text{tr}_E[U(t)\rho_S(0) \otimes \rho_E(0)U^*(t)] \equiv \mathcal{E}_t[\rho_S(0)] \quad (2.30)$$

es un UDM. Ahora bien, dado que a medida que el sistema global evoluciona, las partes que lo constituyen interactúan entre sí y se correlacionan, el estado  $\rho(t)$  deja de ser un estado producto. Esto nos dice que el mapa que conecta el estado del sistema  $S$  a los tiempos  $t$  y  $t' > t$ , no será más un UDM.

**Teorema 3** *Un UDM  $\mathcal{E}_{(t_0, t_1)}$  puede ser invertido por otro UDM si y solo si  $\mathcal{E}_{(t_0, t_1)}$  es unitario.*

Este teorema nos dice que solo las dinámicas unitarias pueden ser invertidas. Sabemos que una vez que trazamos sobre las variables del ambiente, el sistema se abre y su dinámica deja de ser unitaria, por lo tanto, no existirá un UDM que invierta la evolución. Esto significa que abrir el sistema tiene como consecuencia una evolución irreversible.

El teorema 2 nos dice que solo los sistemas que cuyas partes no se correlacionan conforme pasa el tiempo tendrán una dinámica descrita por un UDM. Podemos preguntarnos que clase de sistemas físicos satisface esta condición.

## Sistemas Markovianos

Los procesos Markovianos se caracterizan por no tener memoria, es decir que su dinámica no se ve afectada por su historia previa. Un ejemplo de esta clase de procesos, y de interés para este trabajo, son los llamados *flips* en las moléculas de agua que conforman el oxalato de potasio mono-hidratado (POMH). Este es un ejemplo de sal hidratada. Estos *flips* en el POMH no representan otra cosa que el intercambio en la posición entre los átomos de hidrógeno que componen las moléculas de agua y ocurren de forma aleatoria a una tasa de  $W_F = 10^4 s^{-1}$  a  $T = 295K$  [12].

La pregunta que surge es la de cómo describir la dinámica de dichos sistemas. Sabemos que dicha dinámica estará dada por un UDM, pero ¿qué forma tiene dicho UDM?

Bajo la hipótesis de markovianicidad y acople débil con un baño térmico (i.e.,  $\rho(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_E \forall t$ ), se puede demostrar que la evolución de un sistema  $S$ , acoplado a un ambiente  $E$ , está dada por [15]

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty tr_E[H_I(t), [H_I(t-t'), \rho(t)]]dt' \quad (2.31)$$

Realizando lo que en óptica cuántica se conoce como *rotating wave approximation*, que permite descartar términos oscilatorios, se llega a que

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_{LS}, \rho_S(t)] + \mathcal{D}[\rho_S(t)] = \mathcal{L}[\rho_S(t)] \quad (2.32)$$

con

$$H_{LS} = \sum_{\omega, \alpha, \beta} S_{\alpha, \beta}(\omega) A_\alpha^*(\omega) A_\beta, \quad \mathcal{D}[\rho_S(t)] = \sum_{\omega, \alpha, \beta} \gamma_{\alpha, \beta}(\omega) \left[ A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^*(\omega) - \frac{1}{2} \{ A_\alpha^*(\omega) A_\beta, \rho_S \} \right] \quad (2.33)$$

donde el operador  $H_{LS}$  es hermítico y se lo conoce como corrimiento Lamb<sup>3</sup>. Este término representa la parte unitaria de la evolución. Por otro lado, el operador  $\mathcal{D}[\cdot]$  es un término

<sup>3</sup>Los operadores  $A_{\alpha, \beta}(\omega)$ , al igual que los coeficientes  $\gamma_{\alpha, \beta}(\omega)$ , se definen en [17]

disipativo y por lo tanto se lo llama *disipador*. La ecuación 2.32 recibe el nombre de ecuación maestra cuántica.

Ahora bien, Kossakowski et. al [16] demostraron que para un sistema de  $n$  niveles, un operador  $\mathcal{L}[\cdot]$ , es el generador de un semigrupo dinámico completamente positivo si y solo si tiene la forma 2.32. Esta afirmación viene a responder la pregunta ¿qué forma tiene el UDM que describe esta clase de sistemas?

Una pregunta importante es ¿cuándo podemos aplicar la 2.31? Para responder esto definimos el tiempo de correlación  $\tau_R$  como una medida del tiempo durante el cual, en promedio, algún recuerdo de la interacción entre los sistemas  $S$  y  $E$  es retenida por  $E$ . Para tiempos mayores a  $\tau_R$  el ambiente  $E$  olvida todo tipo de interacción con  $S$ , manifestándose como la integral a infinito en 2.31. Entonces la aplicación de esta ecuación solo es válida cuando investigamos sistemas en una escala de tiempo mayor a  $\tau_R$ . Es decir que si cualquier cambio apreciable en  $S$  toma un tiempo mucho mayor a  $\tau_R$ , entonces se puede usar la 2.31 para estudiar su dinámica. Volviendo a la POHM, dado que el tiempo de correlación  $\tau_R$  es igual a  $1/2W_F \approx 10^{-4}$ s y su dinámica se estudia en una escala de tiempo de milisegundos [12], resulta legítimo usar el enfoque markoviano presentado. De hecho, es este el marco teórico el utilizado para estudiar la dinámica de la POHM rumbo al equilibrio termodinámico.

## Decoherencia Cuántica Adiabática

La decoherencia cuántica es el mecanismo por el cual las coherencias de la matriz densidad reducida se anulan con el tiempo en la base de autovectores del hamiltoniano de interacción. Este proceso es adiabático en el sentido de que no hay transferencia de energía entre el sistema de interés y el ambiente al cual se encuentra acoplado. Esto se puede expresar considerando el hamiltoniano total

$$H = H_S \otimes I_E + I_S \otimes H_E + H_I$$

y notando que la condición de adiabaticidad se escribe como  $[H_S, H] = 0$ . Dado que  $[H_S, H_E] = 0$ , la condición que estamos discutiendo se resume a  $[H_S, H_I] = 0$ . De esta forma el operador de evolución total factoriza de la siguiente manera

$$U(t) = e^{-iHt} = e^{-iH_S t} e^{-i(H_E + H_I)t}, \quad \hbar \equiv 1 \quad (2.34)$$

con lo cual

$$\rho_S(t) = tr_E[e^{-iH_S t} e^{-i(H_E + H_I)t} \rho_S(0) \otimes \rho_E(0) e^{iH_S t} e^{i(H_E + H_I)t}] = \mathcal{E}_t[\rho_S] \quad (2.35)$$

recordemos que para que el mapa 2.35 sea un UDM, el estado inicial debe ser un estado producto. Siguiendo [18] se llega a que los elementos de matriz del operador densidad reducido  $\rho_S$ , en la base que diagonaliza al hamiltoniano de interacción, están dados por

$$\rho_{nm}^{(S)}(t) = \rho_{nm}^{(S)} \Phi_{nm}(t) \quad (2.36)$$

donde la función  $\Gamma_{nm}(t) := \ln(|\Phi_{nm}(t)|) \leq 0$ , se conoce como la *función de decoherencia*. Para  $n = m$  se tiene  $\Phi_{nn}(t) = 1$ , con lo cual los elementos diagonales no evolucionan conforme pasa

el tiempo. Las funciones  $\Gamma_{nm}(t)$  dependen, en general, fuertemente de la interacción entre el ambiente y el sistema, de los diversos parámetros del modelo microscópico subyacente y del estado inicial. En muchos sistemas físicos, la dinámica irreversible inducida por la interacción sistema-ambiente conduce a decaimiento de la función de decoherencia dando como resultado la desaparición de las coherencias.

## 2.4. Cuasiequilibrio Termodinámico

En esta sección se dará una breve introducción a los conceptos de “*cuasi-equilibrio*” y “*temperatura de espín*”, cuyos orígenes se remontan a las décadas del 50-60 y cuya justificación es puramente experimental. Esta hipótesis surge como una necesidad para describir distintos fenómenos de la RMN en sólidos que no podían ser explicados con las teorías ya establecidas en ese entonces [19].

### 2.4.1. Sistema de espines en campos altos

Para introducir la idea de temperatura de espín, consideremos un sistema de espines 1/2 inmersos en un campo magnético  $H$  y acoplados a un baño térmico que por razones históricas se suele denominar “la red”. Llamemos  $p_{\pm}$  a las poblaciones asociadas a los 2 niveles Zeeman. Estas satisfacen la relación  $p_{+} + p_{-} = 1$  y además, en equilibrio térmico, se tiene:

$$\frac{p_{+}}{p_{-}} = \exp\left(\frac{\gamma\hbar H}{kT}\right) \quad (2.37)$$

donde  $\gamma$  es la constante giro-magnética de los espines,  $k$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura de la red. Ahora bien, sabemos que podemos perturbar este equilibrio mediante diversos mecanismos. La hipótesis de temperatura de espín consiste en suponer que incluso fuera del equilibrio termodinámico, y en una escala de tiempo mucho menor<sup>4</sup> a  $T_1$ , es posible asignarle a nuestro sistema una temperatura  $T_S$  diferente a la de la red y la cual está definida por medio de la relación

$$\frac{p_{+}}{p_{-}} = \exp\left(\frac{\gamma\hbar H}{kT_S}\right) \quad (2.38)$$

Esto es equivalente a decir que el sistema, en una escala de tiempo  $t \ll T_1$ , alcanza un estado de cuasi-equilibrio dado por

$$\rho_{cuasi} \propto e^{-\gamma\hbar H/kT_S} \quad (2.39)$$

Entonces el efecto de la interacción espín-red sería la de igualar la temperatura  $T_S$  a la de la red  $T$ .

---

<sup>4</sup>El tiempo característico  $T_1$  es el tiempo necesario para que el sistema alcance el equilibrio térmico debido a su interacción con la red. Por otro lado, definimos  $T_2$  vagamente como el tiempo característico de decaimiento de la señal de RMN en sólidos. Un orden de magnitud típico de  $T_2$  es  $100\mu s$ , mientras que  $T_1$  puede variar desde fracciones de segundos hasta horas o días inclusive [19]

La idea detrás de 2.38 (y de 2.39) es que el estado del sistema de espines fuera del equilibrio y a campo alto, puede ser descripto totalmente asignando poblaciones a sus niveles Zeeman individuales. Esto implica que la matriz densidad del sistema debe ser diagonal en la base del hamiltoniano. Sin embargo, es posible crear situaciones en las que la matriz densidad no es diagonal. Después de un pulso de  $90^\circ$ , por ejemplo, se tiene una magnetización normal al campo estático, la cual está asociada a los elementos fuera de la diagonal de la matriz densidad. Esta magnetización y los correspondientes elementos fuera de la diagonal decaen a cero en un tiempo del orden de  $T_2$ , el “tiempo de relajación” espín-espín. Es entonces después de haber esperado un tiempo mayor a  $T_2$  que podemos hablar de una temperatura de espín. La posibilidad de definir una temperatura de espín distinta a la de la red está restringida a sistemas que satisfacen  $T_2 \ll T_1$ . Esta condición se verifica para los sólidos, donde las interacciones espín-espín entre los núcleos son muchos más intensas que la interacción con la red. Para tiempos  $t$  mayores a  $T_2$  pero menores a  $T_1$  podemos hablar de una temperatura de espín distinta a la de la red.

**Observación:** Se debería notar que debido al fuerte acople que existe entre los espines que componen un sólido, las componentes  $S_z^i = m_z$ ; no son buenos números cuánticos y un enfoque correcto de este problema es uno colectivo, donde toda la muestra es tratada como un único sistema de espines. Es decir, que pensar en espines individuales y asociarles poblaciones a sus niveles energía, no es la idea más correcta al momento de encarar al problema en cuestión. Sin embargo, y a costa de cierto rigor, es todavía posible; en situaciones donde el campo externo es mucho mayor al campo local, usar esta imagen de espines individuales con niveles de energía bien definidos, entre los cuales la interacción dipolar induce transiciones a una cierta tasa  $W$ . La interacción dipolar<sup>5</sup> entre dos espines puede en principio inducir varios tipos de transiciones entre los distintos niveles de energía, llamamos *flips* o *flip-flop* a estas transiciones. Las distintas transiciones que se pueden dar son: flips de un solo espín, flips de los dos espines en la misma dirección y flips opuestos de los espines. Debido a que estas transiciones deben conservar la energía Zeeman<sup>6</sup>, solo los flips en direcciones opuestas tendrán una probabilidad no despreciable.

## Mecanismos Para Alcanzar una Temperatura de Espín a Campos Altos.

A campo alto se supone que el mecanismo para alcanzar una temperatura de espín distinta de la red son los flips inducidos por las interacciones espín-espín, los cuales, debido a que los niveles son equidistantes, conservan la energía Zeeman y ocurren durante un tiempo  $W^{-1} \sim T_2$ , mucho más corto que  $T_1$ . Entonces, a campo alto, podemos decir que el sistema de espines (con  $s$  arbitrario), gracias a los flip-flops, alcanza en un tiempo  $T_2 \ll T_1$  un estado

---

<sup>5</sup>Cuando hablamos de las transiciones generadas por el hamiltoniano dipolar  $H_D$ , nos referimos solamente a aquellas que se corresponden con la parte secular de  $H_D$  que se define como la parte que conmuta con el hamiltoniano Zeeman.

<sup>6</sup>Esto se debe a que los tiempos en los que se estudian las transiciones generadas por la parte secular del hamiltoniano dipolar, son mucho menores a  $T_1$ , con lo cual la interacción espín red es despreciable y el proceso es a energía constante.

de cuasiequilibrio descrito por una distribución de Boltzmann para sus poblaciones, esto es

$$\frac{p_m}{p_{m-1}} = \exp\left(\frac{\gamma\hbar H}{kT_S}\right) \quad (2.40)$$

Esta idea ha sido verificada por primera vez experimentalmente irradiando núcleos de  $\text{Na}^{23}$  y  $\text{Cl}^{35}$  en cristales de  $\text{NaCl}$  con ondas ultrasónicas para luego estudiar el comportamiento de la magnetización. Los resultados obtenidos coincidieron muy bien con las predicciones hechas por la hipótesis de temperatura de espín [20].

## Temperaturas Negativas

Una cualidad interesante de los sistemas de espines es que las poblaciones pueden ser invertidas, siendo los niveles de mayor energía los más poblados. Esto puede llevarse a cabo, por ejemplo, aplicando un pulso de  $180^\circ$  que invierte la magnetización, haciéndola antiparalela con el campo externo. Los flip-flops se encargan de establecer una distribución de Boltzmann para las poblaciones, pero con el cociente  $p_m/p_{m-1}$  invertido. Esto, de acuerdo con 2.40, le atribuye al sistema una temperatura de espín  $T_S$  negativa. Las temperaturas negativas resultan ser más “calientes” que las positivas ya que es necesario entregar energía al sistema para alcanzarlas. Nótese que la posibilidad de alcanzar este tipo de temperaturas se debe a que los hamiltonianos de estos sistemas son acotados y por lo tanto una cantidad finita de energía es necesaria para invertir las poblaciones.

Entonces, se puede concluir que el uso de una temperatura de espín, positiva o negativa, para describir sistemas de espines a campos altos resultó ser un lenguaje conveniente que explicaba de forma satisfactorias varios fenómenos y que contaba con un mecanismo para establecer dicha temperatura (los flip-flops). Sin embargo, extendiendo el concepto de temperatura de espín a campos bajos, emergen nuevas ideas físicas para nada triviales que conducen a predicciones definidas y cuantitativas.

### 2.4.2. Sistema de espines en campos bajos

El primer indicio que sugirió hablar de una temperatura de espín aun a campo bajo viene de experimentos realizados con espines de  $\text{Li}^7$  en muestras de fluoruro de litio [21]. El tiempo de relajación  $T_1$  era razonablemente largo a campo alto (alrededor de 5 minutos). Se observó que, cuando se removía al cristal del campo y se lo restauraba al cabo de unos segundos, la magnetización de  $\text{Li}^7$  era solamente un poco más chica que la magnetización original. El mismo experimento fue llevado a cabo pero empezando con una magnetización opuesta al campo, esto es una temperatura negativa de los espines nucleares [22]. Remover el cristal del imán y luego reinsertarlo no solo restauró la magnetización inicial sino también su orientación antiparalela con el campo. Este resultado fue difícil de entender en ese entonces ya que se esperaba que a campo nulo las interacciones espín-espín condujeran a una destrucción total de la magnetización. Los argumentos para predecir una magnetización nula eran los siguientes: Estaba bien establecido que las únicas transiciones posibles eran aquellas que no

cambiaban la energía del sistema. A campo alto estas transiciones no son otra cosa que los flip flops. Sin embargo, a campo nulo no hay interacción Zeeman, entonces parecería que todas las transiciones inducidas por el hamiltoniano dipolar tomarían lugar, llevarían a un estado de desorden total, y por lo tanto a una rápida destrucción de la magnetización en un tiempo del orden de  $T_2$ . En lugar de eso se encontró que la magnetización decaía como una función dependiente del tiempo que la muestra permanecía fuera del imán. Estos argumentos estaban mal tal como lo probaron los experimentos y la comprensión del comportamiento de los sistemas de espines en campos bajos se llevó a cabo usando la hipótesis de temperatura de espín. Se asumió que el sistema podía alcanzar en un tiempo del orden de  $T_2$  un estado de cuasiequilibrio caracterizado por una distribución de Boltzmann incluso a campo bajo, donde la energía es mayormente dipolar. El pasaje por los campos alto, bajo y el retorno al campo alto se corresponde con una demagnetización y remagnetización adiabática; esto es, un proceso reversible a entropía constante. En términos de esta temperatura de espín concluimos que, como resultado de la demagnetización adiabática, a campo bajo la temperatura del sistema es menor a la de la red y su energía es menor a la de equilibrio. El error en el argumento inicial fue el suponer que las transiciones espín-espín a campo nulo podrían conducir a un desorden en el sistema sin intercambiar energía con la red. La destrucción del orden existente aumentaría la entropía del sistema y esto iría acompañado de un intercambio de energía, lo cual contradice el hecho de que en una escala de tiempo mucho menor  $T_1$ , no hay transferencia de energía.

La suposición de que un sistema de espines es capaz de alcanzar un estado de cuasiequilibrio aún a campos bajos se demostró experimentalmente [23]. La idea detrás del experimento es que el sistema puede ser caracterizado por una temperatura que no depende de cómo se haya alcanzado y que debe ser la misma tanto si el sistema se enfrió a través de una demagnetización adiabática o por contacto térmico con un baño frío. En este experimento un cristal de fluoruro de litio fue enfriado a las temperaturas del helio líquido a campo nulo y después introducido en un imán. Lo que se observó, en un tiempo mucho menor a  $T_1$ , fue una magnetización comparable en magnitud con aquella correspondiente al equilibrio térmico a temperatura ambiente.

## Discusión de la Hipótesis de Temperatura de Espín

La hipótesis de temperatura de espín puede ser establecida como sigue: Un sistema aislado de la red y bajo la influencia de las interacciones espín-espín alcanza un estado de equilibrio interno tal que las probabilidades de encontrar al sistema en cualquiera de sus niveles de energía está dada por una distribución de Boltzmann  $\propto \exp(-E_i/kT_S)$  y esta distribución define la temperatura de espín.

Básicamente lo que la hipótesis de temperatura de espín nos dice es que estos sistemas se comportan igual que cuando se encuentran en equilibrio termodinámico. Uno podría preguntarse por qué es esto válido ya que, por ejemplo, los estados de equilibrio son aquellos de máxima entropía y por lo tanto estaríamos diciendo que estos estados también lo son. Hasta el momento no hay una teoría que prediga tales estados y por lo tanto, solo podemos

decir que experimentalmente esto es algo que ocurre y que explica de forma satisfactoria los fenómenos observados.

En el límite de altas temperaturas se puede aproximar la exponencial de Boltzmann por su desarrollo de Taylor a orden 1, es decir

$$\rho_{quasi} = \frac{1}{Z} e^{-H/(kT_S)} \simeq \frac{1}{Z_\infty} \left( I - \frac{H}{kT_S} \right), \quad Z_\infty = \text{tr}(I) \quad (2.41)$$

La mayoría de los experimentos se llevan a cabo en condiciones de “altas temperaturas” ya que  $\frac{\hbar\omega_0}{kT} \ll 1$  para temperaturas tan bajas como  $T = 1$  K.

### Cuasiequilibrio en Presencia de Varias Constantes de Movimiento.

Una de la hipótesis hechas al momento de aceptar como válido el concepto de cuasi-equilibrio es que la energía total del sistema es la única constante de movimiento<sup>7</sup>. Sin embargo, hay casos donde en una escala de tiempo limitada ( $t < T_2$ ) varios observables permanecen constantes, estos observables se conocen como cuasi-invariantes. Un ejemplo de cuasi-invariante es la parte secular del hamiltoniano dipolar, que debido a que conmuta con el término Zeeman, conmuta con el hamiltoniano total<sup>8</sup>. En particular, para el cristal de  $\text{CaF}_2$ , se ve es que los estados puede ser preparados de forma tal que su operador densidad, al cabo de un tiempo  $T_2 \ll t \ll T_1$ , se escribe como [24]

$$\rho_{quasi} = \frac{1}{Z_\infty} \left( I - \frac{H_Z}{kT_Z} - \frac{H_D}{kT_D} \right) \quad (2.42)$$

donde  $H_Z$  y  $H_D$  son los hamiltonianos Zeeman y dipolar respectivamente.  $T_Z$  y  $T_D$  representan temperaturas asociadas a cada energía. Entonces, la idea, en este ejemplo, es pensar a los términos Zeeman y dipolar como reservorios que pueden intercambiar calor entre si. Usando 2.42 podemos interpretar el comportamiento de los espines en el experimento de demagnetización adiabática como sigue: Cuando el campo es alto, la temperatura del reservorio dipolar es prácticamente infinita, de modo que la parte Zeeman es la relevante. A medida que el campo baja, el reservorio dipolar comienza a entregar calor al Zeeman y este se enfría mientras el Zeeman se calienta. A campo nulo, la temperatura del reservorio Zeeman es infinita y lo único que hay es la contribución dipolar. Usando esta imagen de resorvorios podemos pensar que el orden que había debido a la interacción con el campo se transfiere al reservorio dipolar y que después regresa al Zeeman cuando el campo es alto nuevamente de manera que el proceso es a entropía constante. Esta idea de asignarle temperaturas a las distintas constantes de movimiento ha sido estudiada en experimentos de relajación utilizando la secuencia de Jeener-Brokaert en una sal hidratada  $\text{CaSO}_4\text{H}_2\text{O}$  (Gypsum) [25]. Estas ideas fueron corroboradas y explicadas detalladamente mediante experimentos en el oxalato de potasio monohidratado (POHM) [12] en los que se logró describir la dinámica de los tres cuasi-invariantes dipolar: dipolar intra-par, dipolar inter-par y diferencia de poblaciones triplete-singlete.

<sup>7</sup>Esto es así porque se está pensando en un ensamble microcanónico.

<sup>8</sup>Acá estamos considerando sistemas cuyos hamiltonianos están compuesto por el Zeeman y el término dipolar intrapar solamente



## Cuasiequilibrio y Decoherencia

Se ha hecho énfasis en que hasta el día de hoy, no hay una teoría aceptada por la comunidad de RMN que prediga los estados de cuasiequilibrio. Sin embargo, trabajos recientes sugieren que el mecanismo por el cual se arriba al cuasiequilibrio es provisto por la decoherencia adiabática debida a la interacción con un ambiente [9],[11]. En la sección anterior presentamos la decoherencia y señalamos que, debido a la interacción con el ambiente, al cabo de un tiempo  $\tau_\chi$  conocido como tiempo de decoherencia, el operador densidad adopta una forma diagonal en la base del hamiltoniano de interacción (i.e., la base preferida). Esto nos dice que al cabo de un tiempo  $t \gg \tau_\chi$  el operador densidad se escribe como

$$\rho_s = \frac{1}{\mathcal{N}} \left( I + \sum_k \beta_k O_k \right) \quad (2.43)$$

donde el conjunto  $\{O_k\}$  es tal que  $[\rho_s, H_i] = 0$  y por lo tanto  $\rho_s$  es diagonal en la base del hamiltoniano de interacción  $H_i$ .

La idea detrás de la conexión entre la decoherencia y el cuasiequilibrio surge debido a que cuando se trabaja a campo alto, todas las interacciones pueden ser secularizadas, es decir, que solo se retienen las partes que conmutan con el término dominante. Consideremos<sup>9</sup> el caso en el que se tiene interacción Zeeman, dipolar intrapar y dipolar interpar de forma que  $\|H_Z\| \gg \|H_{intra}^{(D)}\| \gg \|H_{inter}^{(D)}\|$ , entonces solo retenemos la parte de  $H_{intra}^{(D)}$  que conmuta con  $H_Z$  y solo nos quedamos con la parte de  $H_{inter}^{(D)}$  que conmuta con  $H_Z$  y con  $H_{intra}^{(D)}$ . Debido a dicha secularización, todas las partes del hamiltoniano conmutan entre si y por lo tanto con el hamiltoniano total. Se tiene entonces que la base preferida diagonaliza a todos estos operadores y podemos usarlos para construir una base completa de observables, con lo cual

$$\rho_s = \frac{1}{\mathcal{N}} \left( I + \sum_i \alpha_i H_i^{(s)} + \beta_i O_i \right) \quad (2.44)$$

donde  $H_i^{(s)}$  representan las distintas interacciones entre los espines. Estas podrían ser en principio la interacción dipolar intrapar e interpar, etc y por supuesto la interacción Zeeman. Los  $O_i$  son los operadores que se necesitan para completar la base de observables. Los coeficientes  $\alpha_i := tr(\rho_s H_i)$  y  $\beta_i := tr(\rho_s O_i)$ , son identificados como las temperaturas de espín mencionadas previamente. Por lo tanto, la idea de la decoherencia como mecanismo para arribar al cuasiequilibrio a campo alto resulta razonable. Además, esta idea permite dejar de lado toda la interpretación termodinámica detrás de los estados de cuasi-equilibrio y esto es importante ya que, por ejemplo, para cristales líquidos no se justifican expresiones que asumen un límite termodinámico debido a que tales sistemas de espines cuentan con pocos grados de libertad. Es para esta clase de sistemas es donde el papel de la decoherencia para describir dinámicas correspondientes a escalas de tiempo mucho más tempranas que la relajación se torna más evidente [9], [26].

<sup>9</sup>En general, si se tiene un conjunto  $\{F_i\}$  de operadores y  $\|F_j\| \ll \|F_i\| \forall i \neq j$ , entonces la secularización de  $F_j$  se hace respecto a todo el conjunto  $\{F_i\}_{i \neq j}$ .

## 2.5. Elementos de Información Cuántica

### 2.5.1. Definiciones Básicas

En este capítulo nos iremos adentrando más en los temas de interés para el desarrollo de este trabajo. Para tal fin, comenzaremos dando algunas definiciones básicas que serán utilizadas posteriormente.

**Definición:** Para un estado cuántico  $\rho$ , se define la *entropía de Von Neumann* como sigue

$$S(\rho) := -\text{tr}(\rho \log_2 \rho) \quad (2.45)$$

donde el logaritmo del operador densidad  $\rho$  se define a través de sus autovalores  $\lambda_i$  y sus autovectores  $|i\rangle$  de la siguiente manera:  $\log_2 \rho := \sum_i \log_2 \lambda_i |i\rangle \langle i|$ . Con esta definición la entropía puede ser escrita como

$$S(\rho) = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i \quad (2.46)$$

donde por definición se tiene  $0 \log_2 0 = 0$ .

La entropía de Von Neumann es la versión cuántica de la entropía de Shannon.

**Definición:** Para una variable aleatoria y discreta  $X$ , la cual puede tomar valores  $x$  con una cierta probabilidad  $p_x$ , se define la entropía de Shannon de la siguiente manera

$$H(X) = -\sum_x p_x \log_2 p_x \quad (2.47)$$

La idea básica detrás de la definición de la entropía de Shannon es que el “valor de la información” de un mensaje, depende de qué “tan sorprendente” es el contenido de dicho mensaje. Si un evento es muy probable, entonces no hay sorpresa alguna cuando ese evento ocurre. Por otro lado, cuando un evento es poco probable, entonces resulta mayor la información que se extrae al saber que dicho evento ocurrió u ocurrirá.

La *sorpresa* de un evento  $E$ , es una función que decrece a medida que la probabilidad  $p(E)$  del evento crece y está definida como:  $I(E) := -\log_2(p(E))$ . Vemos así que la entropía de Shannon es el valor medio de la sorpresa. También se la puede interpretar como una medida de la incertidumbre que guarda una variable aleatoria  $X$ , ya que a medida que la sorpresa aumenta los eventos se hacen menos probables, i.e., aumenta la incertidumbre.

Esta interpretación se puede extender al caso cuántico de forma sencilla. Los estados puros son eventos con una probabilidad de ocurrencia del<sup>10</sup> 100%, por lo tanto se tiene  $S(|\psi\rangle \langle \psi|) = 0$ . Por otro lado, cuando el espacio de Hilbert es de dimensión  $d$ , los estados de máxima incertidumbre (o máxima sorpresa) están representados por estados máximamente mixtos, i.e.,  $\rho_M = I/d$ , donde  $I$  es la identidad  $d \times d$  y cuya entropía es igual a  $S(\rho_M) = \log_2 d$ .

---

<sup>10</sup>Para ver esto recordemos que para un estado puro el operador densidad resulta ser un proyector. Por lo tanto, se tiene un autovalor igual a 1 y los restantes son todos cero. Usando la convención  $0 \log 0 = 0$ , se tiene  $S(|\psi\rangle \langle \psi|) = 0 \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ .

Cuando se consideran dos sistemas  $A$  y  $B$ , la entropía de Von Neumann puede ser utilizada para definir la **información mutua** entre las partes<sup>11</sup>. Si el operador densidad del sistema  $AB$  es  $\rho_{AB}$  y los estados marginales son  $\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB})$  y  $\rho_B = \text{tr}_A(\rho_{AB})$ , la información mutua se define como

$$I(\rho_{AB}) = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}); \quad S(\rho_{AB}) = -\text{tr}(\rho_{AB} \log_2 \rho_{AB}) \quad (2.48)$$

La cantidad 2.48 se interpreta como una medida de qué tan correlacionados están los sistemas  $A$  y  $B$ . Cuando los sistemas son independientes, se tiene  $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$  y por lo tanto la información mutua resulta cero, es decir que los sistemas no están correlacionados. Siempre que  $\rho_{AB} \neq \rho_A \otimes \rho_B$ , la información mutua será distinta de cero y por lo tanto dará cuenta de la correlación que existe entre  $A$  y  $B$ . Esto sugiere pensar a la información mutua como una medida de todas las correlaciones (tanto clásicas como cuánticas) existentes entre las partes involucradas. En efecto, esta es la interpretación estándar que se le da a esta cantidad.

Otra cantidad que resultará de gran interés es la entropía condicional, cuya definición clásica es la siguiente.

**Definición:** Dadas dos variables aleatorias  $X$  e  $Y$  con distribuciones de probabilidad  $p(x), p(y), p(x, y)$ , la entropía condicional se define como

$$H(Y|X) = -\sum_{x,y} p(x, y) \log_2 \frac{p(x, y)}{p(x)} = -\sum_{x,y} p(x, y) \log_2 p(y|x), \quad p(y|x) := \frac{p(x, y)}{p(x)} \quad (2.49)$$

y representa la cantidad de información que se necesita para describir el resultado  $y$  de la variable aleatoria  $Y$  dado que el valor  $x$  de la variable  $X$  es conocido.

Otra forma de entender a la entropía condicional es como sigue: supongamos que se tienen dos variables aleatorias  $X$  e  $Y$  con una distribución de probabilidad conjunta  $\rho_{(x,y)}$ , la entropía asociada con esta distribución es  $H(X, Y) = -\sum_{x,y} p(x, y) \log_2 p(x, y)$ , y esta mide la incertidumbre que se tiene asociada a  $p(X, Y)$ . Debido a que existe algún grado de correlación entre  $X$  e  $Y$  se tiene que la incertidumbre en  $X$  se reduce en una cantidad  $H(X, Y)$ . Lo mismo ocurre para  $Y$ , la entropía condicional  $H(X|Y)$  (o  $H(Y|X)$ ) representa la reducción en la entropía de  $X$  ( $Y$ ), es decir

$$H(Y|X) = H(Y) - H(X, Y), \quad H(X|Y) = H(X) - H(X, Y) \quad (2.50)$$

La igualdad 2.50 se conoce como *regla de la cadena* y relaciona a la entropía conjunta (i.e.,  $H(X, Y)$ ) con la entropía condicional.

Antes de extender la entropía condicional al caso cuántico, veamos una propiedad característica de la información mutua clásica. Al igual que su versión cuántica, esta se define como

$$I(X, Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y) \quad (2.51)$$

y usando 2.50 se obtiene

$$I(X, Y) = H(Y) - H(Y|X) \quad (2.52)$$

---

<sup>11</sup>La entropía de Shannon también se utiliza para tal fin. Debe quedar claro que todas las definiciones que se darán son una extensión al caso cuántico de todas las ya existentes para el caso clásico.

Brevemente señalaremos que en el caso cuántico las ecuaciones 2.51 y 2.52, no representan la misma cantidad y es esta discrepancia la piedra angular en la definición del **discord cuántico**.

## 2.5.2. Discord Cuántico

Históricamente el discord cuántico ha sido la primera medida de correlaciones cuánticas más allá del entrelazamiento [27]. Su definición se basa en el hecho de que la información mutua clásica admite dos expresiones equivalentes (2.51, 2.52). Sin embargo, y como ya se había mencionado, no es este el caso cuando el sistema es cuántico. El análogo cuántico de 2.51 es inmediato y está dado por 2.48. La generalización de 2.52, por otro lado, no resulta tan trivial. Supongamos que se tiene un sistema cuántico compuesto  $A + B$  descrito por un operador densidad  $\rho_{AB}$ , la meta es encontrar una expresión para la entropía condicional  $S(A|B)$  (ó  $S(B|A)$ ). La dificultad se pone de manifiesto cuando vemos que para calcular  $S(A|B)$  es necesario conocer el estado de  $A$  dado que conocemos el de  $B$ . Ahora ¿qué significa conocer a  $B$  en este contexto? Sabemos que para caracterizar un sistema cuántico, este debe ser sometido a una serie de mediciones. Entonces el cálculo de  $S(A|B)$  implicará realizar un conjunto de mediciones sobre  $B$ . Notemos que esto no está muy alejado de la idea clásica que se tiene de la entropía condicional; la idea detrás de la misma es reducir la incertidumbre que se tiene respecto al sistema  $A + B$ . Al tratar con sistemas físicos, cualquier reducción en la entropía o cualquier incremento de conocimiento se ganará midiendo. Volviendo al cálculo de  $S(A|B)$ , nos enfocaremos en mediciones perfectas, proyectivas o de Von Neumann<sup>12</sup> aplicadas a  $B$ , este tipo de mediciones está representada por proyectores ortonormales de rango 1. Denotamos al conjunto de tales mediciones como  $\{\Pi_j^{(B)}\}$  donde el subíndice  $j$  distingue los distintos valores que se pueden obtener.

El estado de  $A$ , después de aplicar al sistema total el conjunto de mediciones  $\{\Pi_j^{(B)}\}$  y observar  $j$ -ésimo valor, es (Sección 2.2.4)

$$\rho_{AB} \xrightarrow{\Pi_j^{(B)}} \frac{\Pi_j^{(B)} \rho_{AB} \Pi_j^{(B)}}{\text{tr}(\Pi_j^{(B)} \rho_{AB})} \implies \rho_{A|\Pi_j^{(B)}} = \frac{\text{tr}_B(\Pi_j^{(B)} \rho_{AB} \Pi_j^{(B)})}{\text{tr}(\Pi_j^{(B)} \rho_{AB})} \quad (2.53)$$

La entropía  $S(\rho_{A|\Pi_j^{(B)}})$  representa la incertidumbre asociada a  $A$  luego de que el valor  $j$ -ésimo en  $B$ , ha sido observado. Entonces, las entropías  $S(\rho_{A|\Pi_j^{(B)}})$  pesadas con las probabilidades  $p_j$  dan como resultado la entropía condicional de  $A$  dado que se aplicó un conjunto completo de mediciones sobre  $B$ .

$$S(A|\{\Pi_j^{(B)}\}) = \sum_j p_j S(\rho_{A|\Pi_j^{(B)}}) \quad (2.54)$$

Este resultado nos permite generalizar de forma inmediata 2.52 como sigue

$$J(A, B)_{\{\Pi_j^{(B)}\}} = S(\rho_A) - S(A|\{\Pi_j^{(B)}\}) \quad (2.55)$$

<sup>12</sup>Aunque el análisis que sigue se puede extender utilizando los (POVM) *Positive Operator Value Measure*. Recordemos que estos se definen como un conjunto  $\{E_j\}$  de operadores no negativos tales que  $\sum_j E_j = I$ .

La cantidad  $J(A, B)_{\{\Pi_j^{(B)}\}}$  representa la información ganada sobre  $A$  debido a la medición  $\{\Pi_j^{(B)}\}$  en  $B$ .

### *Discord Cuántico*

Con todas estas definiciones, podemos dar la definición del discord cuántico.

Como ya se ha dicho en varias ocasiones, las expresiones 2.48 y 2.55 para la información mutua resultan no ser equivalentes cuando nos encontramos en el escenario cuántico. El discord cuántico se define, de forma preliminar, como la diferencia entre estas dos expresiones, es decir:

$$\begin{aligned} \delta(A, B)_{\{\Pi_j^{(B)}\}} &:= I(A, B) - J(A, B)_{\{\Pi_j^{(B)}\}} \\ &= S(\rho_A) - S(\rho_{AB}) + S(A|\{\Pi_j^{(B)}\}) \end{aligned} \quad (2.56)$$

**Algunos comentarios:** Una de las primeras cosas que notamos de la definición 2.56 es una asimetría respecto al intercambio  $A \longleftrightarrow B$ , esto es de esperarse ya que los conjuntos de mediciones que se pueden aplicar sobre  $B$  no necesariamente son los mismos que se podrían aplicar sobre  $A$ .

Otra cosa que vemos es que el discord, tal y como está definido en 2.56, depende de  $\{\Pi_j^{(B)}\}$ . Un último paso para dar la definición definitiva del discord cuántico es tomar el mínimo de 2.56 sobre todos los conjuntos  $\{\Pi_j^{(B)}\}$ , esto es

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(A, B) &:= \min_{\{\Pi_j^{(B)}\}} [I(A, B) - J(A, B)_{\{\Pi_j^{(B)}\}}] \\ &= S(\rho_A) - S(\rho_{AB}) + \min_{\{\Pi_j^{(B)}\}} S(A|\{\Pi_j^{(B)}\}) \end{aligned} \quad (2.57)$$

### **Propiedades**

- $\delta(A, B)_{\{\Pi_j^{(B)}\}} \geq 0 \quad \forall \{\Pi_j^{(B)}\} \implies \mathcal{Q}(A, B) \geq 0$
- $\mathcal{Q}(A, B)$  es invariante ante transformaciones unitarias locales. Esto quiere decir que un estado  $\rho_{AB}$  y otro  $\tilde{\rho}_{AB} = U_A^* \otimes U_B^* \rho_{AB} U_A \otimes U_B$  tienen el mismo discord.
- Los estados de la forma

$$\rho_{qc} = \sum_i p_i \rho_i^{(A)} \otimes |i\rangle \langle i|^{(B)} \quad (2.58)$$

llamados estados cuánticos-clásicos ( $\mathcal{QC}$ ), donde  $\{|i\rangle\}$  es un conjunto de vectores ortonormales en  $\mathcal{H}_B$ , se caracterizan por tener discord nulo [27].

La no negatividad del discord implica que la información que se podrá obtener de  $A$  debido a las mediciones efectuadas en  $B$ , nunca será mayor a la información mutua 2.48. La invariancia ante transformaciones unitarias locales, es una propiedad que toda medida de correlaciones debe cumplir. Este requerimiento tiene sentido ya que los resultados obtenidos no pueden depender, por ejemplo, de la base en la que se escribe el operador densidad. Esta propiedad además resulta ventajosa al momento de calcular el discord ya que para una clase limitada de estados existe una expresión analítica del mismo. Los estados  $X$  2.15 y Bell diagonales 2.14 gozan de una expresión analítica del discord. Por lo tanto, si se tiene un estado unitariamente equivalente a cualquiera de estos dos estados, entonces el discord se puede obtener analíticamente.

## Interpretación del Discord

A menudo se suele dar una interpretación operativa a las medidas de correlaciones cuánticas. Es decir que una cantidad se puede definir como aquella necesaria para realizar una cierta tarea. Un ejemplo popular puede ser el de la teleportación cuántica, la cual necesita del entrelazamiento para llevarse a cabo, entonces podríamos definir al entrelazamiento como esa cualidad cuántica necesaria para realizar esta tarea. Varias medidas del entrelazamiento gozan de este tipo de definiciones. El discord, por su lado, puede ser definido como una medida de la máxima información que se puede obtener del sistema  $A$  perturbando lo menos posible al sistema  $B$  [2].

En base a esta definición podemos decir que mientras mayor sea el discord, mayor será la perturbación generada en  $B$  y menor será la información que obtendremos de  $A$ . Esto se debe a que al medir  $B$  destruimos el estado original y con él, mucha de la información que se tenía previamente. Básicamente el discord representa un tira y afloje entre la información que se puede obtener sobre  $A$  y la perturbación que se puede generar en  $B$  debido a esto.

## Aspecto clásico de las correlaciones

Una pregunta que nos podemos hacer es si existen estados que nos permitan obtener información sobre  $A$  sin perturbar  $B$ . Esta pregunta se puede reformular como sigue: ¿existen estados con discord nulo? La respuesta es, como hemos visto, afirmativa y estos son los estados cuánticos-clásicos 2.58. La idea intuitiva detrás de la definición de estados cuánticos-clásicos es la que sigue: en mecánica clásica medir sobre un sistema no afecta el estado del mismo, entonces ahora supongamos que se aplica el siguiente conjunto de mediciones  $\{\Pi_i = |i\rangle\langle i|^{(B)}\}$  al estado 2.58 ¿cuál es estado que resulta después de aplicar este conjunto? Dado que 2.58 está construido con los proyectores  $\Pi_i$ , se tiene que el estado resultante es el mismo. Por lo tanto, para los estados cuántico-clásico, existe un conjunto de mediciones tales que su aplicación no modifica el estado inicial. Se podría decir entonces que los estados con discord nulo son aquellos insensibles ante algún proceso de medición.

Sabemos que los estados de la forma 2.58 tienen discord nulo, entonces nos preguntamos ¿son los únicos con esta propiedad? La respuesta es sí [2]

$$\mathcal{Q}(A, B) = 0 \iff \rho_{AB} = \sum_i p_i \rho_i^{(A)} \otimes |i\rangle\langle i|^{(B)} \quad (2.59)$$

donde  $\{|i\rangle^{(B)}\}$  es un conjunto ortonormal de  $B$ .

Este punto marca una diferencia entre el discord y el entrelazamiento cuántico, el cual se anula para estados separables.

Recordemos que un estado es separable si y solo si admite la siguiente descomposición

$$\rho_{sep} = \sum_i p_i |a_i\rangle\langle a_i| \otimes |b_i\rangle\langle b_i| \quad (2.60)$$

donde  $|a_i\rangle$  y  $|b_i\rangle$  son vectores en  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$ .

Notemos que estos estados en general no tienen que ser  $\mathcal{QC}$  y por lo tanto tienen discord no nulo.

Durante mucho tiempo separabilidad era sinónimo de “clasicidad”, es decir que un estado separable no gozaba de atributos cuánticos. El discord vino de alguna manera a romper con esa creencia y a mostrar que sistemas descritos por estados separables son sensibles ante el proceso de medición. Desde el punto de vista operativo, el discord resulta ser un recurso necesario para realizar ciertas tareas que no necesitan del entrelazamiento para ser llevadas a cabo [28].

Otra clase de estados con discord nulo son los clásico-clásico ( $\mathcal{CC}$ ) que se definen como

$$\rho_{CC} = \sum_{ij} p_{ij} |i\rangle \langle i|^{(A)} \otimes |j\rangle \langle j|^{(B)} \quad (2.61)$$

y a diferencia de los  $\mathcal{QC}$ , tienen discord nulo en ambas direcciones, es decir que  $D(A, B) = D(B, A) = 0$ . Nótese que estos estados son un caso particular de los  $\mathcal{QC}$ .

Una interpretación más concreta, pero no necesariamente acertada, que se le puede dar al discord, surge de definir al mínimo de 2.55 sobre todas las posibles mediciones como una medida de todas las correlaciones clásicas entre  $A$  y  $B$  [3]. Esta definición, junto con la interpretación de la información mutua como medida de todas las correlaciones, sugiere interpretar al discord como una medida de **todas** las correlaciones cuánticas entre  $A$  y  $B$ .

$$\mathcal{C}(A, B) := \max_{\{\Pi_j^{(B)}\}} J(A, B)_{\{\Pi_j^{(B)}\}} \implies \mathcal{Q}(A, B) = \mathcal{I}(A, B) - \mathcal{C}(A, B) \quad (2.62)$$

Esta interpretación tiene sus fallas ya que parte de la premisa de que las correlaciones se pueden separar en parte clásica y cuántica, lo que si bien parece razonable, no tiene por qué ocurrir. Otro punto en contra de esta interpretación es la asimetría debido al intercambio de partículas. Una verdadera medida de todas las correlaciones cuánticas entre dos sistemas  $A$  y  $B$  no debería presentar esta característica. Sin embargo, y con el objetivo de utilizar una notación más compacta, haremos uso de las definiciones 2.62 para las correlaciones clásicas y el discord cuántico.

## Proceso de Optimización

Como se ha visto, por definición el cálculo del discord involucra encontrar el conjunto de mediciones  $\{\Pi_B\}$  que minimiza la entropía condicional  $S(A|B)$ . Encontrar este conjunto puede ser difícil y es por eso que solo se cuenta con expresiones analíticas del discord para estados de Bell diagonales [29] y estados  $X$  [30]. En particular, para estados de dos qubits generales, el proceso de minimización involucra la resolución de dos ecuaciones trascendentales que solo pueden ser resueltas numéricamente [31]. En el siguiente capítulo proponemos un método alternativo al presentado en [30] para minimizar  $S(A|B)$ .

# Capítulo 3

## Pares de Espines 1/2

En este capítulo nos proponemos analizar la forma y la dinámica de los estados cuyo discord vamos a calcular en los regímenes de decoherencia y relajación.

Comenzamos describiendo el sistema físico cuyo discord queremos calcular. Tal sistema es un par representativo que forma parte de todo un ensamble de pares de espines. Los espines que forman cada par interactúan dipolarmente, mientras que se desprecia la interacción entre los pares. A su vez, los pares se encuentran acoplados a la red. Este sistema modela de forma muy simplificada al oxalato de potasio mono-hidratado  $C_2K_2O_4 \cdot H_2O$  o POHM (Potassium Oxalate Monohydrate) ya que desde el punto de vista del RMN de  $^1H$ , puede ser considerado como un sistema de pares de espines débilmente interactuantes. Esto se basa en las siguientes características:

- El POHM cristaliza con estructura monoclinica. La celda unidad tiene cuatro moléculas y al ser monohidratado, también hay cuatro moléculas de agua por celda que además son magnéticamente equivalentes (todos los ejes H-H son paralelos)
- Las frecuencias de resonancia de los núcleos de K, C y O son suficientemente lejanas de la frecuencia de resonancia del H, como para que cualquier espectrómetro sintonizado a la frecuencia del H interactúe solo con el sistema de hidrógenos. Por esta razón consideramos que un cristal de POHM es un arreglo ordenado de hidrógenos.
- El acople dipolar entre los protones del agua de hidratación es mucho más intenso que entre el H de una molécula y el H de la primer molécula vecina. La relación de distancias es 3,6:1, y como el acople dipolar va como  $r^{-3}$ , es adecuado adoptar una imagen de espines acoplados en pares que interactúan débilmente con otros pares.

Decimos que el sistema de interés modela de forma muy simplificada al POHM debido a que se ignora la interacción entre los pares, que si bien es pequeña frente a la interacción intrapar, no es nula.



### 3.1. Decoherencia

En lo que respecta a la decoherencia, las vibraciones de la red generan una fluctuación en la distancia entre los espines que componen cada par y por lo tanto fluctuaciones en la energía dipolar intrapar. Estas vibraciones se representan a través del formalismo de fonones y son las causantes de una dinámica irreversible y las responsables de la desaparición de las coherencias en una escala de tiempo mucho menor a  $T_1$ , es decir que el proceso no involucra un intercambio de energía con la red [11].

La preparación del estado inicial se logra a través de la secuencia de Jeener-Broekaert [24]. Esta consiste en un pulso de  $\pi/2$  alrededor del eje  $y$ , seguida de una evolución libre gobernada por el hamiltoniano dipolar un tiempo  $\tau$  y finalmente de un pulso de  $\pi/4$  alrededor del eje  $x$ .

Entonces se parte del operador densidad correspondiente al equilibrio termodinámico con un baño térmico y en presencia de un campo magnético  $B = B\hat{z}$ .

$$\rho_{eq} = \exp(-\beta\omega_0\hbar I_z)/Z, \quad Z := \text{Tr}(\exp(-\beta\omega_0\hbar I_z)), \quad I_z = I_z^{(A)} + I_z^{(B)} \quad (3.1)$$

En el régimen de altas temperaturas se tiene

$$\rho_{eq} \simeq \frac{1}{Z_\infty}(I - \beta\omega_0\hbar I_z), \quad Z_\infty = \text{Tr}(I) = 4 \quad (3.2)$$

La identidad permanece inalterada durante la secuencia de Jeener y por lo tanto se trabajará con el término Zeeman solamente. La aplicación de un pulso en  $\pi/2$  alrededor del eje  $y$  da como resultado

$$U_y(\pi/2)I_zU_y^*(\pi/2) = I_x \quad (3.3)$$

con lo cual

$$U_y(\pi/2)\rho_{eq}U_y^*(\pi/2) \simeq \frac{1}{Z_\infty}(I - \beta\omega_0\hbar I_x) \quad (3.4)$$

Ahora consideramos la evolución libre gobernada por la interacción dipolar, la cual tiene lugar durante un intervalo de tiempo  $\tau$ . Usando el operador de evolución  $U(\tau) = e^{-iH_D\tau/\hbar}$ , se llega a que

$$U(\tau)U_y(\pi/2)\rho_{eq}U_y^*(\pi/2)U^*(\tau) = \frac{1}{Z_\infty}(I - \beta\omega_0\hbar U(\tau)I_xU^*(\tau)), \quad (3.5)$$

$$U(\tau)I_xU^*(\tau) = I_x \cos(\omega_D\tau) + i(T_{2,1} + T_{2,-1}) \sin(\omega_D\tau) \quad (3.6)$$

$$\therefore U(\tau)U_y(\pi/2)\rho_{eq}U_y^*(\pi/2)U^*(\tau) := \rho(\tau) = \frac{1}{Z_\infty}(I - \beta\omega_0\hbar [I_x \cos(\omega_D\tau) + i(T_{2,1} + T_{2,-1}) \sin(\omega_D\tau)]) \quad (3.7)$$

Ahora solo resta aplicar el pulso de  $\pi/4$ .

$$\begin{aligned} \sigma(0) &:= U_x(\pi/4)\rho(\tau)U_x^*(\pi/4) = \frac{1}{Z_\infty}(I - \beta\omega_0\hbar U_x(\pi/4)[I_x \cos(\omega_D\tau) + i(T_{2,1} + T_{2,-1}) \sin(\omega_D\tau)]U_x^*(\pi/4)) \\ &= \frac{1}{Z_\infty}(I - \beta\omega_0\hbar [I_x \cos(\omega_D\tau) + \sin(\omega_D\tau)U_x(\pi/4)i(T_{2,1} + T_{2,-1})U_x^*(\pi/4)]) \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$U_x(\pi/4)i(T_{2,1} + T_{2,-1})U_x^*(\pi/4) = \frac{1}{2}(T_{2,2} + T_{2,-2}) + \frac{\sqrt{3}}{2}T_{2,0} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \sigma(0) &= \frac{1}{Z_\infty} \left( I - \beta\omega_0\hbar \left[ I_x \cos(\omega_D\tau) + \sin(\omega_D\tau) \left( \frac{1}{2}(T_{2,2} + T_{2,-2}) + \frac{\sqrt{3}}{2}T_{2,0} \right) \right] \right) \\ &= \frac{1}{4} \left( I - \beta\omega_0\hbar \left[ \cos(\omega_D\tau)(\sigma_A^x + \sigma_B^x) + \sin(\omega_D\tau) \left( \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}}\sigma_A^x\sigma_B^x - \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}}\sigma_A^y\sigma_B^y + \sqrt{2}\sigma_A^z\sigma_B^z \right) \right] \right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Los tensores  $T_{2,\pm 1}$ ,  $T_{2,0}$  y  $T_{2,\pm 2}$  se definen en [12] como sigue

$$\begin{aligned} T_{2,\pm 1} &:= \pm \frac{1}{2^{3/2}}(\sigma_A^z\sigma_B^{\pm 1} + \sigma_A^{\pm 1}\sigma_B^z) & T_{2,0} &:= \frac{2}{\sqrt{6}}(3\sigma_A^z\sigma_B^z - \vec{\sigma}_{(A)} \cdot \vec{\sigma}_{(B)}) \\ T_{2,\pm 2} &:= \frac{1}{2}\sigma_A^\pm\sigma_B^\pm & \sigma^\pm &:= \sigma^x \pm i\sigma^y \end{aligned} \quad (3.11)$$

El estado 3.10 representa la preparación de nuestro sistema, el cual sufrirá los efectos de la decoherencia. Es decir que experimentalmente se prepara este estado y luego se observa la dinámica inducida por el acople con el baño de fonones.

Antes de seguir con nuestro análisis, hacemos la distinción entre dos tipos de preparación:

1) La secuencia “astuta” que consiste en elegir  $\tau$  tal que  $\tau\omega_D = \pi/2$ , con lo cual, se tiene que

$$\sigma_{astuta}(0) = \frac{1}{4} \left( I - \beta\omega_0\hbar \left( \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}}\sigma_A^x\sigma_B^x - \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}}\sigma_A^y\sigma_B^y + \sqrt{2}\sigma_A^z\sigma_B^z \right) \right) \quad (3.12)$$

2) La secuencia no astuta que se reduce a la ecuación 3.10 con  $\tau$  arbitrario.

## Evolución de los elementos de matriz de 3.10

La evolución, en el régimen de decoherencia, de los elementos de matriz de 3.10, está dada por [10], [11]:

$$\sigma_{m,n}(t) = \sigma(0)_{m,n} e^{i\omega_D(\kappa_m - \kappa_n)t} e^{-[(\kappa_m - \kappa_n)t/\tau_\chi]^2} \quad (3.13)$$

con

$$\kappa_m = \begin{cases} \kappa_1 = 1 \longrightarrow |1, 1\rangle \\ \kappa_2 = -2 \longrightarrow |1, 0\rangle \\ \kappa_3 = 1 \longrightarrow |1, -1\rangle \\ \kappa_4 = 0 \longrightarrow |0, 0\rangle \end{cases} \quad (3.14)$$

donde  $\tau_\chi$  es el tiempo de decoherencia y  $\kappa_i$  son proporcionales a los autovalores del hamiltoniano dipolar intrapar  $H_D$ , el cual es proporcional al tensor  $T_{2,0}$ .

Estos elementos están escritos en la base acoplada, la cual diagonaliza al hamiltoniano dipolar  $H_D$  (i.e., la base preferida, (ver sección 2.3.2)).

Consideremos la evolución de estos elementos para el caso en que se aplica la secuencia astuta. El estado resultante, en término de los tensores  $T_{2,q}$ , está dado por

$$\sigma_{astuta}(t) = \sigma_{astuta}(0) = \frac{1}{Z_\infty} \left( I - \beta\omega_0\hbar \left( \frac{1}{2}(T_{2,2} + T_{2,-2}) + \frac{\sqrt{3}}{2}T_{2,0} \right) \right) \quad (3.15)$$

El tensor  $T_{2,0}$  es diagonal en la base suma, mientras que las matrices correspondientes a  $T_{2,\pm 2}$  están dadas por:

$$T_{2,0} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_{2,2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_{2,-2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Resulta claro que  $T_{2,0} \propto H_D$  no evolucionará en este régimen ya que conmuta con el hamiltoniano de interacción [11]. Por otro lado, los tensores  $T_{2,\pm 2}$ , tampoco son afectados por la evolución 3.13 de manera que permanecerán invariantes.

Por lo tanto, para la secuencia astuta, se tiene que el estado no evoluciona. También vemos que este estado es un estado de Bell diagonal 2.16, con lo cual se cuenta con una expresión analítica del discord [29].

$$\sigma_{astuta}(t) = \frac{1}{4} \left( I - \beta\omega_0\hbar \left( \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}} \sigma_A^x \sigma_B^x - \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}} \sigma_A^y \sigma_B^y + \sqrt{2} \sigma_A^z \sigma_B^z \right) \right) \quad (3.17)$$

Consideramos ahora la secuencia no astuta, es decir

$$\sigma(0) = \frac{1}{4} \left( I - \beta\omega_0\hbar \left[ \cos(\omega_D\tau) (\sigma_A^x + \sigma_B^x) + \sin(\omega_D\tau) \left( \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}} \sigma_A^x \sigma_B^x - \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}} \sigma_A^y \sigma_B^y + \sqrt{2} \sigma_A^z \sigma_B^z \right) \right] \right) \quad (3.18)$$

y su evolución, calculada en la sección A.1, está dada por

$$\begin{aligned} \sigma(t) = & \frac{1}{4} \left[ I - \beta\omega_0\hbar \left\{ \cos(\omega_D\tau) e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(3\omega_D t) (\sigma_A^x + \sigma_B^x) - e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t) (\sigma_A^y \sigma_B^z + \sigma_A^z \sigma_B^y) \right. \right. \\ & \left. \left. + \sin(\omega_D\tau) \left( \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}} \sigma_A^x \sigma_B^x - \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}} \sigma_A^y \sigma_B^y + \sqrt{2} \sigma_A^z \sigma_B^z \right) \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.19)$$

Usando una transformación unitaria es posible llevar este estado a la forma normal de Bloch 2.13 (Sección A.1)

$$U^* \sigma(t) U \equiv \rho(t) = \frac{1}{4} [I + \alpha(t) (\sigma_A^x + \sigma_B^x) + \lambda_k(t) \sigma_A^{(k)} \sigma_B^{(k)}], \quad k = x, y, z \quad (3.20)$$

con

$$\lambda_x = -\beta\omega_0\hbar \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}} \sin(\omega_D\tau), \quad \alpha(t) = -\beta\omega_0\hbar \cos(\omega_D\tau) e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(3\omega_D t) \quad (3.21)$$

$$\lambda_{y,z} = \beta\omega_0\hbar \left( \frac{\sqrt{2}+1}{2^{3/2}} \sin(\omega_D\tau) \pm \sqrt{\frac{11+6\sqrt{2}}{8} \sin^2(\omega_D\tau) + e^{-18t^2/\tau_x^2} \cos^2(\omega_D\tau) \sin^2(3\omega_D t)} \right) \quad (3.22)$$

La 3.20 no es otra cosa que un estado  $X$  2.14, el cual, también cuenta con una expresión analítica para su discord (Sección A.1), [30].

Notemos que a tiempos largos la 3.19 tiende a la 3.12. Sin embargo, si se considerara la interacción inter-par, suponemos que el límite a tiempos largos estaría dado por

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sigma(t) = \frac{1}{Z_\infty} \left( I - \frac{\sqrt{3}}{2} \beta\omega_0\hbar T_{2,0} \right) = \frac{1}{Z_\infty} (I - \beta_D H_D) \quad (3.23)$$

Es decir que al agregar esta interacción, los tensores  $T_{2,\pm 2}$  desaparecerían. El operador densidad 3.23 corresponde a lo que se denomina estado dipolar intrapar, donde  $\beta_D = 1/(kT_D)$  es la “nueva temperatura” debido al “enfriamiento” causado por la secuencia de JB. Cuánticamente, podríamos decir que el valor de expectación de la energía dipolar que teníamos en el equilibrio se ve incrementado en la razón  $\beta_D/\beta_0$  (notar que los valores de expectación son proporcionales a las  $\beta_j$  en cada caso)

## 3.2. Relajación

Ahora nos enfocamos en el régimen de relajación y presentamos el estado cuyo discord estudiaremos. A diferencia de la decoherencia, el proceso en cuestión (i.e., la relajación) involucra un intercambio de energía.

La dinámica del POHM rumbo al equilibrio termodinámico ya ha sido estudiada en detalle [12]. El mecanismo para que el sistema alcance el equilibrio termodinámico es provisto por el intercambio en las posiciones de los átomos de hidrógeno que componen las moléculas de agua [12] (ver figura 3.2). El intercambio entre estas posiciones generan una fluctuación de la energía interpar induciendo así una dinámica irreversible hacia el equilibrio.

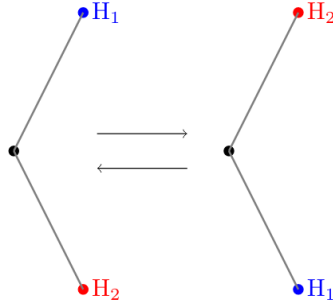


Figura 3.1: Intercambio de los protones  $H_1$  y  $H_2$  debido a los flips aleatorios de las moléculas de agua alrededor de sus dos ejes.

En la sección anterior mencionamos que al tener en cuenta la interacción interpar, el estado que resultaría luego de que la decoherencia tome lugar está dado por el límite 3.23. En términos de una temperatura de espín se podría concluir que debido a la decoherencia el sistema alcanza un estado de cuasiequilibrio caracterizado por una temperatura dipolar (sección 2.4.2). En [12] se parte de la premisa de que al cabo de un tiempo suficientemente largo ( $T_2 \ll t \ll T_1$ ) el sistema alcanza un estado de cuasiequilibrio dado por

$$\rho_{cuasi} \sim \frac{1}{Z_\infty} (I - \lambda_Z H_Z - \lambda_D^{(intra)} H_D^{(intra)} - \lambda_D^{(inter)} H_D^{(inter)} - \lambda_0 \Delta N_0) \quad (3.24)$$

y se estudia su evolución rumbo al equilibrio. Los términos en 3.24 representan la interacción Zeeman, dipolar intra e inter-par, mientras que el último miembro  $\Delta N_0$ , es un cuasi-invariante cuyo origen se debe exclusivamente a la interacción espín-red [25]. Los coeficientes

$\lambda_j$  son proporcionales a las inversas de las temperaturas de espín asociada a cada cuasi-invariante [ver subsección 2.4.2]. Si pensamos en términos de la decoherencia, sabemos que al cabo de un tiempo  $t \gg \tau_x$ , el operador densidad será diagonal en la base del hamiltoniano de interacción. Dado que siempre se trabaja a campo alto, las interacciones dipolar intra e inter-par<sup>1</sup> son secularizadas y por lo tanto conmutan entre si y consecuentemente con el hamiltoniano total. Es claro entonces que un estado de la forma

$$\rho = \frac{1}{Z_\infty} (I - \lambda_Z H_Z - \lambda_D^{(intra)} H_D^{(intra)} - \lambda_D^{(inter)} H_D^{(inter)}) \quad (3.25)$$

será diagonal en la base preferida. Estos operadores en particular tienen traza nula y son ortogonales respecto al producto interno  $\langle A, B \rangle := \text{tr}(AB^*)$  [12]. Notemos además que el valor de expectación de cada uno de estos operadores permanece constante durante la decoherencia<sup>2</sup>, es por esto que se los llama *cuasi-invariantes*. Ahora bien, en principio nos estarían faltando operadores en 3.25 ya que estamos trabajando con matrices  $4 \times 4$ , y por lo tanto se necesitan de 15 operadores más la identidad para describir completamente cualquier estado. Jeener et al. [25] demostraron experimentalmente la existencia de un cuarto cuasi-invariante, que sumado a los 3 ya mencionados, describe completamente el estado del sistema a través de 3.24 una vez que se alcanza el cuasi-equilibrio. Tal cuasi-invariante está dado por  $\Delta N_0 := -\vec{\sigma}^{(A)} \cdot \vec{\sigma}^{(B)}$  y su valor de expectación  $\langle \Delta N_0 \rangle = N_S - N_S^{equilibrio}$ , da cuenta de la desviación del número de ocupación del estado singlete respecto de su valor en equilibrio térmico.

Habiendo justificado de forma resumida la forma 3.24 de la condición inicial para este régimen, pasamos a estudiar su evolución hacia el equilibrio la cual se analiza, tal y como se había anticipado, a través del formalismo markoviano y la ecuación 2.31 en principio debe ser aplicada. Sin embargo, y debido a que puede resultar extremadamente difícil describir el ambiente en términos de operadores, se utiliza un modelo semi-clásico, en el cual las variables del ambiente se representan con funciones estocásticas que dependen del tiempo. La ecuación markoviana que se utiliza entonces está dada por

$$\frac{d\rho_S}{dt} = - \int_0^\infty \langle [H(t), [H(t-t'), \rho(t)]] \rangle_E dt' \quad (3.26)$$

donde  $H(t) = \sum_i H_i^{(s)} f_i(t)$ , con  $H_i^{(s)}$  son operadores actuando en el espacio del sistema de interés, las  $f_i(t)$  son funciones estocásticas que describen las variables del ambiente y  $\langle \dots \rangle_E$  significa promedio sobre el ensamble.

El procedimiento consiste en primero definir<sup>3</sup>

$$\mathcal{O}_1 := H_z, \quad \mathcal{O}_2 := H_D^{intra}, \quad \mathcal{O}_3 := \Delta N_0, \quad \mathcal{O}_4 := H_D^{inter}, \quad x_j(t) := \lambda_j(t) \sqrt{\text{tr}(\mathcal{O}_j^2) / \text{tr}(I)} \quad (3.27)$$

<sup>1</sup>Notemos que a lo largo de este trabajo final solo hemos considerado estas tres interacciones. Esto no implica que sean las únicas que existen, sino más bien que son las únicas relevantes al momento de estudiar el POHM.

<sup>2</sup>Es decir que permanecen constantes a medida que se establece el cuasi-equilibrio (subsección 2.4.2)

<sup>3</sup>Esto se hace para simplificar la notación solamente.

los coeficientes  $\lambda_j(t)$  se definen como  $\lambda_j(t) := \text{tr}(\rho_{cuasi}\mathcal{O}_j)/\text{tr}(\mathcal{O}_j^2) = \langle \mathcal{O}_j \rangle(t)/\text{tr}(\mathcal{O}_j^2)$  y son las inversas de las temperaturas de espín asociadas a cada cuasi-invariante. Notemos que la ecuación 3.26 determina la evolución de los valores medios  $\langle \mathcal{O}_j \rangle$  y consecuentemente la de los coeficientes  $\lambda_j$ .

Insertando 3.24 en 3.26, multiplicando a ambos miembros de la igualdad por  $\mathcal{O}_j$  y tomando traza, encontramos un sistema de ecuaciones acoplados para los coeficientes  $x_j(t)$ , es decir

$$\frac{d\langle \mathcal{O}_j \rangle}{dt} = \text{tr}(\rho_{cuasi}\mathcal{O}_j) = \text{tr}(\mathcal{O}_j^2) \frac{d\lambda_j}{dt} = - \int_0^\infty \text{tr}(\mathcal{O}_j \langle [H(t), [H(t-t'), \rho_{cuasi}(t)]] \rangle_E dt') \quad (3.28)$$

o de forma más compacta

$$\dot{x}_j(t) = - \sum_{q=1}^4 S_{pq}(t)x_q(t) \quad (3.29)$$

Antes de seguir con el análisis caben algunas aclaraciones. En primer lugar, el sistema de ecuaciones 3.29 solo acopla a las funciones  $x_2(t)$  y  $x_3(t)$  [12], de forma que las funciones  $x_1(t)$  y  $x_4(t)$  evolucionan independientemente. Segundo, en este trabajo solo nos interesa la evolución del orden dipolar y por lo tanto la condición inicial está dada por 3.23. Esta condición inicial sumado al hecho de que las funciones  $x_2(t)$  y  $x_3(t)$  solo se acoplan entre si, nos permite tomar  $x_4(t) = 0 \forall t$ . Por otro lado, el tiempo de relajación, es decir el tiempo necesario para que restablezca el orden Zeeman, es  $T_1 = 300$  s [12], en consecuencia, el tiempo necesario para que la función  $x_1(t)$  tome un valor apreciable respecto a  $x_2(t)$  y  $x_3(t)$  también será igual a  $T_1$ . Dado que  $x_1(0) = 0$ , podemos suponer que durante la evolución de las funciones  $x_2(t)$  y  $x_3(t)$ , se tiene  $x_1(t) = 0$ .

Bajo las consideraciones hechas, la evolución de 3.23 rumbo al equilibrio está dada por:

$$\rho(t) = \frac{1}{4} \left( I - \frac{\sqrt{3}}{2} \beta_0 [x_2(t)T_{2,0} - x_3(t)\Delta N_0] \right) \quad (3.30)$$

con

$$x_2(t) = 0,7e^{-t/T_L} + 0,3e^{-t/T_s}, \quad x_3(t) = 0,46(e^{-t/T_L} - e^{-t/T_s}), \quad \beta_0 = \hbar\omega_0/k_B T \quad (3.31)$$

donde  $T_L = 202$  ms y  $T_s = 22,4$  ms.

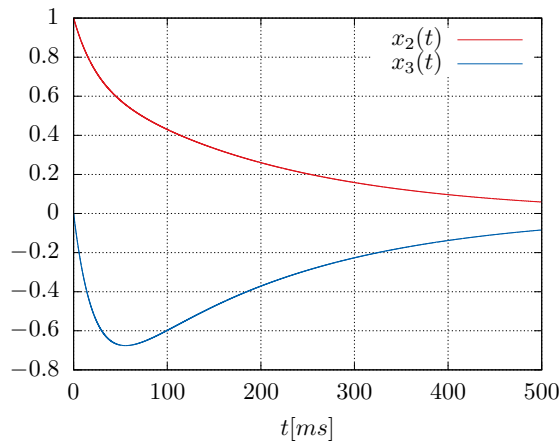


Figura 3.2: Funciones  $x_2(t)$  y  $x_3(t)$ .

En la figura 3.2 observamos el comportamiento de los coeficientes  $\lambda_D$  y  $\lambda_0$  y por lo tanto el de las inversas de las temperaturas  $T_D$  (dipolar) y  $T_0$  (singlete). Vemos que a  $t = 0$  se tiene  $T_0 = \infty$ , con lo cual el término  $\Delta N_0$  no aparece inicialmente y solo el término dipolar es relevante y por lo tanto a  $t = 0$  se tiene que el estado 3.30 coincide con el 3.23.

Notemos que el despreciar la contribución Zeeman es legítimo ya que el tiempo característico de las funciones  $x_2(t)$  y  $x_3(t)$  es  $T_L = 202$  ms, es decir 5 órdenes de magnitud menor que  $T_1$  aproximadamente.

Los operadores  $T_{2,0}$  y  $\Delta N_0$  en términos de las matrices de Pauli se escriben como

$$T_{2,0} = \frac{2}{\sqrt{6}}(3\sigma_1^z\sigma_2^z - \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}) = \frac{2}{\sqrt{6}}(2\sigma_1^z\sigma_2^z - \sigma_1^x\sigma_2^x - \sigma_1^y\sigma_2^y), \quad \Delta N_0 = -\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma} = -(\sigma_1^x\sigma_2^x + \sigma_1^y\sigma_2^y + \sigma_1^z\sigma_2^z) \quad (3.32)$$

Definimos

$$a(t) = \frac{2\beta_0}{\sqrt{6}}x_2(t), \quad b(t) = -\beta_0x_3(t) \quad (3.33)$$

con lo cual

$$\rho(t) = \frac{1}{4} [I + (a+b)\sigma_1^x\sigma_2^x + (a+b)\sigma_1^y\sigma_2^y + (b-2a)\sigma_1^z\sigma_2^z] \quad (3.34)$$

Este es un estado de Bell diagonal que, como ya se ha mencionado, cuenta con una expresión analítica del discord [29].

Entonces, los estados cuyo discord vamos a calcular son

$$\begin{aligned} \rho_{deco}(t) &= \frac{1}{4} [I + \alpha(t)(\sigma_A^z + \sigma_B^z) + \lambda_1(t)\sigma_A^z\sigma_B^z + \lambda_2(t)\sigma_A^y\sigma_B^y - \lambda_3(t)\sigma_A^x\sigma_B^x] && \text{Decoherencia} \\ \rho_{relax}(t) &= \frac{1}{4} [I + (a+b)\sigma_1^x\sigma_2^x + (a+b)\sigma_1^y\sigma_2^y + (b-2a)\sigma_1^z\sigma_2^z] && \text{Relajación} \end{aligned} \quad (3.35)$$

# Capítulo 4

## Resultados

En este capítulo se muestra la dinámica del discord tanto en los regímenes de decoherencia como de relajación para los estados 3.35.

### 4.1. Decoherencia

Comenzamos para la decoherencia y dado que el estado es de la forma  $X$  aplicaremos lo desarrollado en la sección A.1

Los valores utilizados serán<sup>1</sup>

$$\omega_0 = 300\text{MHz}, \quad T = 20^\circ\text{C} \implies \beta\omega_0\hbar = 7,8 \times 10^{-6}, \quad \tau\omega_D = \frac{\pi}{4}, \quad \frac{1}{\tau_\chi} = 3,27\text{kHz}, \quad \omega_D = 95,5\text{kHz} \quad (4.1)$$

Los autovalores  $\lambda_i$  de la matriz de correlación  $T$  son

$$\lambda_x = -1,27 \times 10^{-6}, \quad \lambda_{y,z}(t) = 7,8 \times 10^{-6} \left( \frac{\sqrt{2} + 1}{4} \pm \sqrt{\frac{11 + 6\sqrt{2}}{16} + e^{-18(3,27t)^2} \sin^2(286,5t)} \right) \quad (4.2)$$

donde el tiempo está medido en milisegundos.

Es hora de evaluar la entropía condicional en los supuestos extremos y para tal fin, notamos que

$$S(A|B)\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) = f(\tilde{r}(t)) = 1 - \frac{1}{2} [(\tilde{r}(t) + 1) \log_2(\tilde{r}(t) + 1) + (1 - \tilde{r}(t)) \log_2(1 - \tilde{r}(t))] \quad (4.3)$$

$$S(A|B)\left(\pi, \frac{\pi}{2}\right) = \frac{1 - \alpha(t)}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} [u_+(t) \log_2(u_+(t)) + u_-(t) \log_2 u_-(t)] \right\}; \quad u_\pm := \left( 1 \pm \frac{r_\pm(t)}{1 - \alpha(t)} \right) \\ + \frac{1 + \alpha(t)}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} [v_+(t) \log_2 v_+(t) + v_-(t) \log_2 v_-(t)] \right\}; \quad v_\pm(t) := \left( 1 \pm \frac{r_\pm(t)}{1 + \alpha(t)} \right) \quad (4.4)$$

donde

$$r_\pm(t) := |\lambda_x \pm \alpha(t)|; \quad \tilde{r}(t) := \sqrt{\alpha^2(t) + \lambda_y^2(t)} \quad (4.5)$$

---

<sup>1</sup>En el experimento con el POMH se usa una frecuencia de 270 MHz [12].



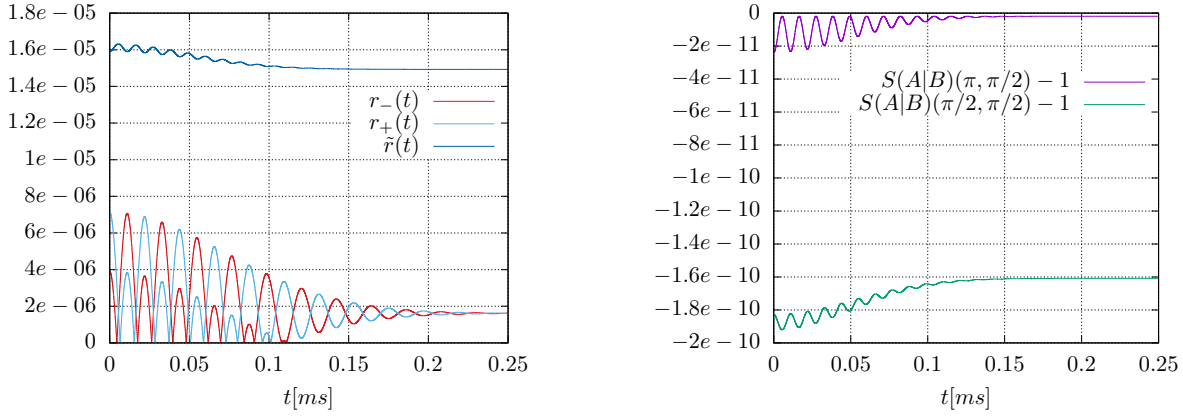


Figura 4.1: (Izquierda) Funciones  $r_{\pm}(t)$  y  $\tilde{r}(t)$ . (Derecha) Entropía condicional como función del tiempo valuada en los extremos.

En la figura 4.1 vemos los gráficos correspondientes a  $S(A|B)(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$  y  $S(A|B)(\pi, \frac{\pi}{2})$  (gráficos de la derecha) e inferimos que

$$\text{mín}\{S(A|B)(t)\} = f(\tilde{r}(t)) \quad (4.6)$$

Tomando traza parcial sobre el subsistema  $B$  al estado  $\rho_{deco}(t)$  de la ecuación 3.35, obtenemos el operador densidad reducido

$$\rho_A(t) = \frac{1}{2}(I + \alpha(t)\sigma_A^x) \quad (4.7)$$

cuyo espectro está dado por

$$\text{spec}(\rho_A(t)) = \left\{ \frac{1 \pm \alpha(t)}{2} \right\} \quad (4.8)$$

y por lo tanto la entropía asociada es

$$S(\rho_A(t)) = -\frac{1 + \alpha(t)}{2} \log_2 \left( \frac{1 + \alpha(t)}{2} \right) - \frac{1 - \alpha(t)}{2} \log_2 \left( \frac{1 - \alpha(t)}{2} \right) \quad (4.9)$$

Finalmente, las correlaciones clásicas, definidas en la ecuación 2.62, están dadas por

$$\mathcal{C}(\rho_{deco}(t)) = -\frac{1 + \alpha(t)}{2} \log_2 \left( \frac{1 + \alpha(t)}{2} \right) - \frac{1 - \alpha(t)}{2} \log_2 \left( \frac{1 - \alpha(t)}{2} \right) - f(\tilde{r}(t)) \quad (4.10)$$

Para calcular el discord, debemos evaluar la información mutua. Dado que los operadores densidad reducidos son iguales, tenemos que

$$\mathcal{I}(t) = 2S(\rho_A(t)) - S(\rho_{deco}(t)) \quad (4.11)$$

$$\mathcal{Q}(t) = S(\rho_A(t)) + f(\tilde{r}(t)) - S(\rho_{deco}(t)) \quad (4.12)$$

Ahora debemos hallar los autovalores de  $\tilde{\rho}_{deco}(t)$ , para esto rotamos  $\tilde{\rho}_{deco}(t)$  en  $\pi/2$  alrededor del eje  $y$ , con lo cual en la base producto, se tiene que

$$U_y^*(\pi/2)\rho_{deco}(t)U_y(\pi/2) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + 2\alpha(t) + \lambda_1 & 0 & 0 & -(\lambda_2 + \lambda_3)(t) \\ 0 & 1 - \lambda_1 & (\lambda_2 - \lambda_3)(t) & 0 \\ 0 & (\lambda_2 - \lambda_3)(t) & 1 - \lambda_1 & 0 \\ -(\lambda_2 + \lambda_3)(t) & 0 & 0 & 1 - 2\alpha(t) + \lambda_1 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

donde  $U_y(\pi/2)$  es una rotación en  $\pi/2$  alrededor del eje  $y$ . Los autovalores de este nuevo estado son

$$\begin{aligned} \ell_0 &= \frac{1 + \lambda_1 + \sqrt{(4\alpha^2(t) + (\lambda_2 + \lambda_3)^2(t))}}{4}, & \ell_1 &= \frac{1 + \lambda_1 - \sqrt{(4\alpha^2(t) + (\lambda_2 + \lambda_3)^2(t))}}{4} \\ \ell_2 &= \frac{1 - \lambda_1 - (\lambda_2 - \lambda_3)(t)}{4}, & \ell_3 &= \frac{1 - \lambda_1 + (\lambda_2 - \lambda_3)(t)}{4} \end{aligned} \quad (4.14)$$

Recordando que operadores unitariamente equivalentes tienen los mismos autovalores, tenemos que

$$S(\rho_{deco}(t)) = - \sum_j \ell_j \log_2(\ell_j) \quad (4.15)$$

Reemplazando en 4.15 en 4.11 obtenemos la información en función del tiempo (figura 4.2).

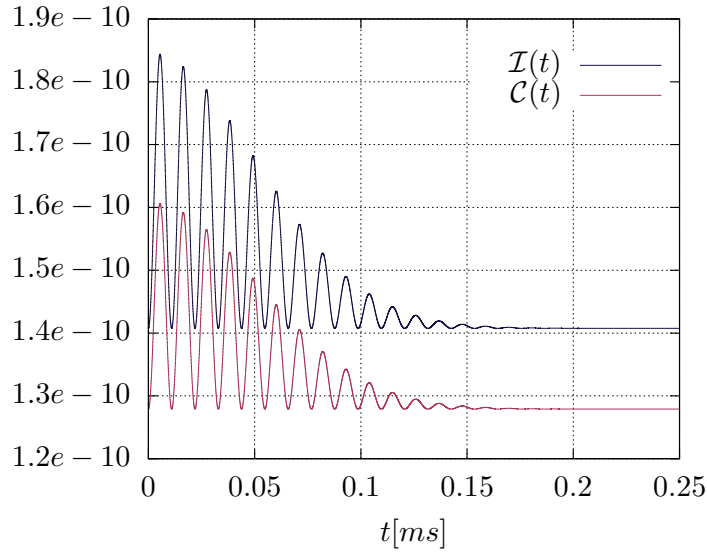


Figura 4.2: Evolución de la información mutual y de las correlaciones clásicas.

Reemplazando 4.15 y 4.9 en 4.12, obtenemos que el discord  $\mathcal{Q}(t)$ , tiene la forma graficada en la figura 4.3

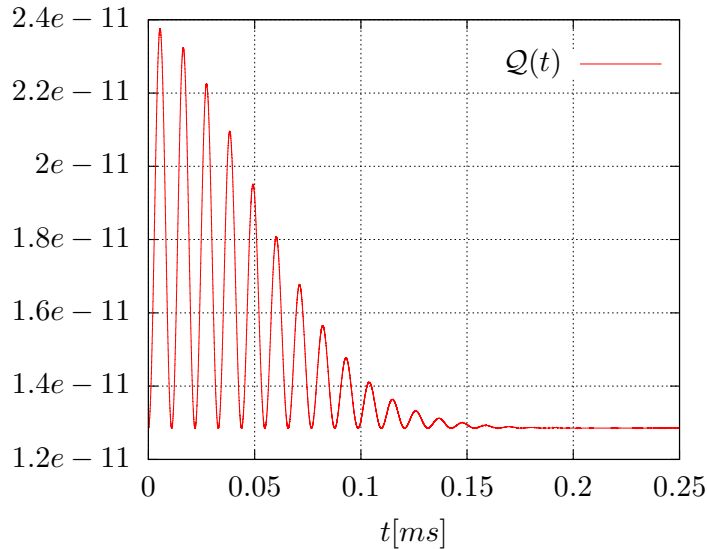


Figura 4.3: Discord Cuántico.

En la figura 4.1 vemos la evolución del discord en el régimen de decoherencia. Inmediatamente observamos un mínimo absoluto distinto de cero. También podemos contemplar el comportamiento oscilatorio y amortiguado del mismo. Esto es un reflejo del comportamiento de las coherencias que en efecto oscilan a medida que decaen.

Previamente habíamos señalado que para tiempos largos la 3.19 tiende a la 3.15.

$$\sigma(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{1}{4}(I + a\sigma_A^x\sigma_B^x + b\sigma_A^y\sigma_B^y + d\sigma_A^z\sigma_B^z) = \sigma_{astuta} \quad (4.16)$$

con

$$a := -\beta\omega_0\hbar\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}}\sin(\omega_D\tau), \quad b := \beta\omega_0\hbar\frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}}\sin(\omega_D\tau), \quad d := -\sqrt{2}\beta\omega_0\hbar\sin(\omega_D\tau) \quad (4.17)$$

El estado en este régimen es de la forma 2.16 y la información mutua está dada por

$$\mathcal{I} = 2 - \sum_{k=0}^3 \ell_k \log_2 \ell_k \quad (4.18)$$

donde

$$\ell_0 = \frac{1+b+d-a}{4}, \quad \ell_1 = \frac{1+a-b+d}{4}, \quad \ell_2 = \frac{1+a+b-d}{4}, \quad \ell_3 = \frac{1-a-b-d}{4} \quad (4.19)$$

Estos autovalores se pueden obtener a través de un cálculo directo o podemos tomar el límite  $t \rightarrow \infty$  de la ecuación 4.14. Cualquiera sea el camino que tomemos nos llevará al mismo resultado.

Si volvemos a la ecuación 4.5, veremos que  $\tilde{r}(t) \rightarrow b$ , con lo cual

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \min\{S(A|B)\}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} f(\tilde{r}(t)) = f(b) \quad (4.20)$$

Debido a que el estado en cuestión es máximamente mixto<sup>2</sup>, tenemos que las correlaciones clásicas están dadas por

$$\mathcal{C} = 1 - f(b) = \frac{1-b}{2} \log_2(1-b) + \frac{1+b}{2} \log_2(1+b) \quad (4.21)$$

por lo tanto

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{Q}(\rho(t)) = \mathcal{Q}(\sigma_{astuta}) = 2 - \sum_{k=0}^3 \ell_k \log_2 \ell_k - \frac{1-b}{2} \log_2(1-b) - \frac{1+b}{2} \log_2(1+b) \simeq 1,29 \times 10^{-11} \text{bits} \quad (4.22)$$

Vemos entonces que el discord 4.12 tiende al límite que corresponde a tiempos grandes. En otras palabras, nuestro resultado converge al presentado por Luo [29] para estados de Bell diagonales.

Dado que el tema central este trabajo son los estados de Q-E con orden dipolar, es natural preguntarse cuanto vale el discord para el estado 3.23. Recordando lo visto en el capítulo anterior podemos reescribir este estado en términos de las matrices de Pauli, esto es

$$\rho_D = \frac{1}{4} \left[ I - \frac{\beta\hbar\omega_0}{\sqrt{2}} (2\sigma_A^z\sigma_B^z - \sigma_A^x\sigma_B^x - \sigma_A^y\sigma_B^y) \right] \quad (4.23)$$

<sup>2</sup>Es decir que  $\text{tr}_A(\rho_{AB}) = \text{tr}_B(\rho_{AB}) = I/2$ .

Este es un estado de Bell diagonal con discord igual a

$$\mathcal{Q}(\rho_D) \simeq 4,38 \times 10^{-11} \text{bits} \quad (4.24)$$

Esto en principio marca una diferencia con los estados de equilibrio en RMN a campos altos donde se tiene que la interacción Zeeman es la dominante y todas las demás pueden ser vistas como perturbaciones. Por lo tanto, el equilibrio termodinámico está caracterizado solo por el orden Zeeman, es decir

$$\begin{aligned} \rho_{eq} &= \frac{1}{4}(I - \beta\hbar\omega_0 I_z) = \frac{1}{4}(I - \beta\hbar\omega_0(\sigma_A^z + \sigma_B^z)) \\ &= \frac{1}{4}((1 + \beta\hbar\omega_0) |0\rangle_A \langle 0| \otimes |0\rangle_B \langle 0| + (1 - \beta\hbar\omega_0) |1\rangle_A \langle 1| \otimes |1\rangle_B \langle 1| + |0\rangle_A \langle 0| \otimes |1\rangle_B \langle 1| + |1\rangle_A \langle 1| \otimes |0\rangle_B \langle 0|) \end{aligned} \quad (4.25)$$

el cual es un estado  $\mathcal{CC}$  y por lo tanto tiene discord nulo (ver ecuación 2.61)

## 4.2. Relajación

Habiendo descrito la evolución del discord hacia lo que presumimos un estado causiequilibrio, pasamos a estudiar su dinámica rumbo al equilibrio termodinámico.

$$\rho(t) = \frac{1}{4} [I + (a+b)\sigma_A^x \sigma_B^x + (a+b)\sigma_A^y \sigma_B^y + (b-2a)\sigma_A^z \sigma_B^z] \quad (4.26)$$

Este es un estado de Bell diagonal por lo que la entropía condicional está dada por (ver apéndice A)

$$S(A|B) = -\frac{1+r}{2} \log \frac{1+r}{2} - \frac{1-r}{2} \log \frac{1-r}{2} \quad (4.27)$$

donde

$$r = \sqrt{(b+a)^2 \sin^2 \theta + (b-2a)^2 \cos^2 \theta} \quad (4.28)$$

Para encontrar las correlaciones clásicas se debe minimizar  $S(A|B)$  y dado que esta es una función decreciente de  $r$ , solamente debemos maximizar  $r$ . Para encontrar dicho máximo, estudiamos el cociente

$$P = \left( \frac{b+a}{b-2a} \right)^2 \quad (4.29)$$

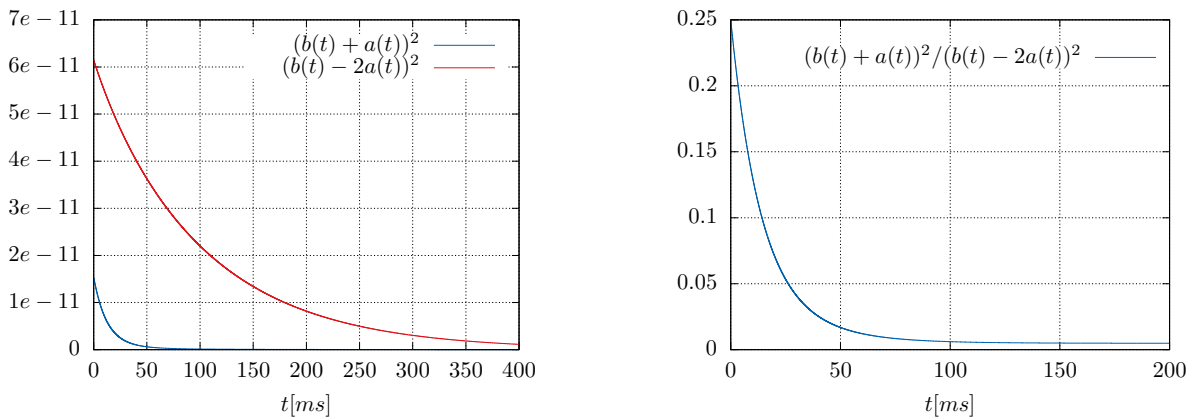


Figura 4.4: Funciones  $(b(t)+a(t))^2$  y  $(b(t)-2a(t))^2$  (izquierda). Cociente  $P(t)$  4.29 (derecha).

En la figura 4.4 vemos que  $P(t) < 1 \forall t$ , con lo cual

$$r_{\text{máx}} := r(t) = |b(t) - 2a(t)| \quad (4.30)$$

Las correlaciones clásicas están dadas por

$$\mathcal{C}(t) = 1 + \frac{1 + |b(t) - 2a(t)|}{2} \log_2 \frac{1 + |b(t) - 2a(t)|}{2} + \frac{1 - |b(t) - 2a(t)|}{2} \log_2 \frac{1 - |b(t) - 2a(t)|}{2} \quad (4.31)$$

Hasta acá hemos calculado solamente las correlaciones clásicas. Ahora debemos calcular la información mutua, la cual está dada por

$$\mathcal{I} = 2 + \sum_k \lambda_k \log_2 \lambda_k \quad (4.32)$$

y donde autovalores los autovalores  $\lambda_k$  de nuestro estado están dados por

$$\lambda_0(t) = \frac{1}{4}(1 - 3b(t)), \quad \lambda_{1,2}(t) = \frac{1}{4}(1 + b(t) - 2a(t)), \quad \lambda_3(t) = \frac{1}{4}(1 + b(t) + 4a(t)) \quad (4.33)$$

Insertando 4.33 en 4.32, obtenemos la dependencia temporal de la información mutua y luego, haciendo la resta entre 4.32 y 4.31, obtenemos el tan deseado discord cuántico.

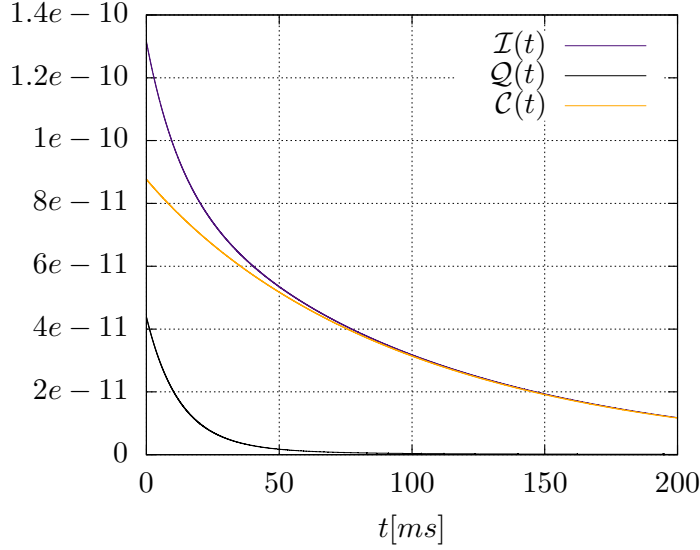


Figura 4.5: Información mutua, correlaciones clásicas y discord cuántico.

En la figura 4.2 observamos el comportamiento del discord como función del tiempo para este régimen. Encontramos que el mismo decrece de forma monótona conforme pasa el tiempo y atribuimos este comportamiento al carácter markoviano que rige la evolución del sistema. En términos de una temperatura de espín, podríamos decir que el discord decae a cero debido a que las temperaturas dipolar  $T_D$  y  $T_0$  tienden a infinito. Esta interpretación se basa en el hecho de que en [8] se demostró que en equilibrio térmico el discord para un par de espines con interacción dipolar, en el régimen de altas temperaturas, decae asintóticamente a cero como el inverso del cuadrado de la temperatura, es decir  $\mathcal{Q} \simeq 1/T^2$ . También observamos que el tiempo necesario para que el discord decaiga a cero es 100 ms aproximadamente. Esto

nos dice que el sistema se dirige hacia el equilibrio con discord nulo. Es más, vemos que una vez que el orden Zeeman se restablece, el sistema ya no tiene discord. Esto en realidad es algo esperable ya que el tiempo largo  $T_L$  (ver ecuación 3.31) es mucho menor que  $T_1$ . Un tiempo igual a  $3T_L$  (necesario para que las funciones  $x_2(t)$  y  $x_3(t)$  decaigan a cero) sigue siendo 3 ordenes de magnitud menor que  $T_1$ .

En los trabajos [7], [32], [33] se estudia la dinámica del discord en el régimen de relajación. En particular en [7] se estudia un sistema de pares de espines  $1/2$ , con acople  $J$  y desprecian todo tipo de interacción interpar. La evolución del sistema también tiene un caracter markoviano y por lo tanto un decaimiento monótono del discord se observa para un tiempo  $t > t_c$  definido en [7]. Por otro lado, para tiempos menores a  $t_c$ , se obtiene un discord constante, este fenómeno se conoce como congelamiento del discord cuántico, el cual para estados de Bell diagonal 2.16, se presenta bajo la condición  $|c_1| > |c_2|, |c_3|$  o  $|c_2| > |c_1|, |c_3|$  y  $|c_3| \neq 0$ . En nuestro caso tenemos  $c_1 = c_2 = a + b$  y  $c_3 = b - 2a$  y como hemos visto  $|c_3| > |c_1| = |c_2| \forall t$ , por lo que este fenómeno no se observa. En cuanto a los valores del discord, en [7] obtienen un valor máximo  $\mathcal{Q} \sim 4 \times 10^{-10}$  bits y un tiempo de vida de aproximadamente 250 ms. Cabe aclarar que la intensidad del campo utilizado es de 500 MHz y la temperatura es de 25 °C. En cambio, los valores utilizados en este trabajo final han sido de  $B = 300$  MHz y  $T = 20$  °C, es decir a un campo menor y a una temperatura ligeramente menor y esto se ve reflejado en discord menor. Por otro lado, el tiempo de vida del discord presentado acá es 150 ms menor al presentado en [7]. Cabe entonces preguntarse ¿a qué se debe el decaimiento acelerado del discord en relación al de [7]? Basándonos en lo discutido en [33] y en el hecho de que el carácter bi-exponencial en el decaimiento del orden dipolar se debe a la presencia del cuasi-invariante  $\Delta N_0$ , se sospecha que la presencia del singlete promueve una trasferencia del discord entre el par hacia la red dando lugar al acelerado decaimiento observado. Es decir que el discord existente entre los dos espines, se transforma en un discord entre cada espín y la red. Esta idea se basa fuertemente en el hecho de que el acople con el singlete  $\Delta N_0$ , se debe exclusivamente a la interacción espín-red.

# Capítulo 5

## Conclusiones

En este trabajo final hemos logrado estudiar la dinámica del discord cuántico para el ejemplo más simple de sistemas de espines interactuantes: un sistema de pares de espines con interacción dipolar preparado en un estado de “orden dipolar” como los que se pueden acceder experimentalmente. Dicho estudio se ha hecho en dos escalas de tiempo bien diferenciadas arrojando resultados que ponen de manifiesto la naturaleza cuántica que rigen las evoluciones en cada escala temporal. El trabajo combina las ideas provenientes de la RMN con la teoría tras las correlaciones cuánticas. Esto ha implicado también revisar trabajos bibliográficos escritos en épocas diferentes. Para llegar a calcular el discord en los estados y regímenes propuestos se ha presentado un método alternativo al de la bibliografía para obtener los mínimos de la entropía relativa. Asimismo se ha debido sistematizar un método para expresar los estados en su forma de Bloch a medida que evolucionan.

En término de recursos, se puede concluir que con un experimento sumamente sencillo (secuencia de Jeener-Brokaert) y en condiciones más que accesibles (campo magnético de 300 MHz y  $T = 20$  °C) se puede crear un estado con discord cuyo valor es 7 ordenes de magnitud mayor al de un estado con orden dipolar en equilibrio termodinámico y a temperatura ambiente [8].

En lo que respecta al cuasi-equilibrio hemos observado la dinámica del discord a medida que el cuasi-invariante dipolar se establece y se ha visto que tal estado posee discord no nulo. Como se ha señalado previamente este no es el caso para el orden Zeeman el cual no tiene discord. Con lo cual, un sistema descrito por un estado de cuasiequilibrio puede tener atributos cuánticos que desaparecen a medida que se establece el equilibrio termodinámico. Por lo tanto concluimos que hablar de cuasiequilibrio y equilibrio no es necesariamente lo mismo.

### Trabajo a Futuro

En este trabajo hemos despreciado la interacción dipolar interpar en el régimen de decoherencia. Sin embargo, es de nuestro interés continuar con el estudio la decoherencia contemplando tal interacción. De esta forma se podrá modelar de la manera más realista posible

la llegada al cuasi-equilibrio para el orden dipolar en sistemas como el considerado en este trabajo.

En lo que respecta al régimen de relajación, nos proponemos estudiar experimentalmente la dinámica del discord para el estado 3.23. Para esto se medirán los elementos de la matriz densidad a través del método de *tomografía de la matriz densidad* [7]. La idea detrás de este experimento es la de contrastar los resultados teóricos presentados en este trabajo y ver si coinciden o no con los resultados experimentales. Esta sería una nueva forma de verificar si la teoría de relajación desarrollada en [12] es correcta para describir este tipo de cuasi invariante.

Los resultados obtenidos en este trabajo nos motivan a abandonar los modelos semi-clásicos para describir la relajación en sistemas de RMN y optar por un formalismo puramente cuántico en donde las variables del ambiente sean descritas a través de operadores y no con funciones estocásticas.



# Apéndice A

## Forma de Bloch y Entropía Condicional

Este apéndice tiene como intención descomprimir un poco el cuerpo principal e incluir los pasos para derivar la expresión de la entropía condicional para un sistema de dos qubits general. Para tal fin vamos a seguir la idea presentada en [31] y comenzamos mostrando como llevar a un estado arbitrario a su forma de Bloch considerando un estado de la forma

$$\rho = \frac{1}{4}(I + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}_A + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}_B + T_{ij}\sigma_{i,A}\sigma_{j,B}) \quad (\text{A.1})$$

Para llevar nuestro estado a la forma de Bloch, hacemos uso del siguiente teorema

**Teorema 4** *Sea  $T$  una matriz real  $m \times n$ , entonces la descomposición en valores singulares existe y es una factorización de la forma*

$$T = WDV^T$$

donde  $V$  está compuesta con los autovectores de  $TT^T$  y las columnas de  $W$  son los autovectores de  $T^TT$ .

Con este resultado se tiene que

$$T_{i,j} = \sum_k w_{i,k}d_k v_{j,k} \implies \sum_{i,j} T_{i,j}\sigma_i^{(A)}\sigma_j^{(B)} = \sum_{i,j,k} w_{i,k}d_k v_{j,k}\sigma_i^{(A)}\sigma_j^{(B)} = \sum_k d_k \hat{O}_k^{(A)} \otimes \hat{O}_k^{(B)} \quad (\text{A.2})$$

$$O_k^{(A)} = \sum_i w_{i,k}\sigma_i^{(A)} = U\sigma_k^{(A)}U^*; \quad O_k^{(B)} = \sum_j v_{j,k}\sigma_j^{(B)} = V\sigma_k^{(B)}V^* \implies \sum_k d_k O_k^{(A)} O_k^{(B)} = \sum_k d_k U\sigma_k^{(A)}U^*V\sigma_k^{(B)}V^* \quad (\text{A.3})$$

$$\therefore \tilde{\rho} = U^* \otimes V^* \rho U \otimes V = \frac{1}{4} \left( I^{(AB)} + \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma} + \vec{\beta} \cdot \vec{\sigma}^{(B)} + \sum_k d_k \sigma_k^{(A)} \sigma_k^{(B)} \right) \quad (\text{A.4})$$

La ecuación A.3 nos dice que existen transformaciones unitarias  $U$  y  $V$  asociadas a las matrices ortonormales  $W$  y  $V$  respectivamente. Es un ejercicio simple el demostrar que si  $U = e^{-i\alpha\hat{u}\cdot\vec{\sigma}/2}$  es una rotación en un ángulo  $\alpha$  alrededor de un eje  $\hat{u}$  se tiene que

$$\rho' = \frac{1}{2}(I + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}) \implies U^* \rho' U = \frac{1}{2}(I + R_U(\vec{a}) \cdot \vec{\sigma}) \quad (\text{A.5})$$

donde  $R_U$ , es la matriz de rotación  $3 \times 3$  asociada a  $U$ . Entonces podemos ver los vectores  $\vec{a}$  ( $\vec{b}$ ) y  $\vec{\alpha}$  ( $\vec{\beta}$ ) se conectan a través de la relación

$$\vec{\alpha} = R_U \vec{a}, \quad \vec{\beta} = R_V \vec{b} \quad (\text{A.6})$$

Entonces

$$\tilde{\rho} = U^* \otimes V^* \rho U \otimes V = \frac{1}{4} \left( I^{(AB)} + (R_U \vec{a}) \cdot \vec{\sigma}^{(A)} + (R_V \vec{b}) \cdot \vec{\sigma}^{(B)} + \sum_k d_k \sigma_k^{(A)} \sigma_k^{(B)} \right) \quad (\text{A.7})$$

En la sección 3.3 vimos que al pasar a la forma de Bloch, los coeficientes  $\alpha(t)$ , que serían la componente  $x$  de los vectores de Bloch, no cambian y es debido a que la rotación se efectúa a lo largo del eje  $x$ .

Ahora procedemos a calcular la entropía condicional  $S(A|B)$ , recordemos que esta se define como

$$S(A|B) = \sum_k p_k S(\tilde{\rho}_k^{(A)}), \quad \tilde{\rho}_k^{(A)} := \frac{\text{tr}_B(I^{(A)} \otimes \Pi_k^{(B)} \tilde{\rho})}{\text{tr}(I^{(A)} \otimes \Pi_k^{(B)} \tilde{\rho})}, \quad \Pi_k = U |k\rangle \langle k| U^*, \quad k = 0, 1$$

donde  $U$  es una rotación arbitraria. Recordemos que al tratarse de un sistema de dos qubits, solo dos proyectores ortogonales hacen falta para obtener un conjunto completo de observables que actúen en el subsistema  $B$ .

Los proyectores  $|k\rangle \langle k|$  pueden escribirse en término de las matrices de Pauli

$$|0\rangle \langle 0| = \frac{1}{2}(I + \sigma_z), \quad |1\rangle \langle 1| = \frac{1}{2}(I - \sigma_z)$$

Haciendo uso de la ecuación A.5 obtenemos que

$$\Pi_0 = \frac{1}{2}(I + R(U)\hat{z} \cdot \vec{\sigma}), \quad \Pi_1 = \frac{1}{2}(I - R(U)\hat{z} \cdot \vec{\sigma})$$

donde  $R(U)\hat{z}$ , representa la rotación asociada al operador  $U$  aplicada al versor  $\hat{z}$ .

$$\begin{aligned} I^{(A)} \otimes \Pi_0^{(B)} \tilde{\rho} &= \frac{1}{2} I^{(A)} \otimes (I^{(B)} + R(U)\hat{z} \cdot \vec{\sigma}^{(B)}) \left[ \frac{1}{4} (I^{(A,B)} + \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma} \otimes I^{(B)} + I^{(A)} \otimes \vec{\beta} \cdot \vec{\sigma} + d_k \sigma_k^{(A)} \otimes \sigma_k^{(B)}) \right] \\ &= \frac{1}{2} \tilde{\rho} + \frac{1}{8} [I^{(A)} \otimes R(U)\hat{z} \cdot \vec{\sigma}^{(B)} + \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}^{(A)} \otimes R(U)\hat{z} \cdot \vec{\sigma}^{(B)} + I^{(A)} \otimes (R(U)\hat{z} \cdot \vec{\sigma}^{(B)}) (\vec{\beta} \cdot \vec{\sigma}^{(B)}) \\ &\quad + d_k \sigma_k^{(A)} \otimes (R(U)\hat{z} \cdot \vec{\sigma}^{(B)}) \sigma_k^{(B)}] \\ &= \frac{1}{2} \tilde{\rho} + \frac{1}{8} [I^{(A)} \otimes R(U)\hat{z} \cdot \vec{\sigma}^{(B)} + \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}^{(A)} \otimes R(U)\hat{z} \cdot \vec{\sigma}^{(B)} \\ &\quad + I^{(A)} \otimes (R(U)\hat{z} \cdot \vec{\beta} + i(R(U)\hat{z} \times \vec{\beta}) \cdot \vec{\sigma}^{(B)}) + d_k \sigma_k^{(A)} \otimes (R(U)\hat{z} \cdot \vec{\sigma}^{(B)}) \sigma_k^{(B)}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{tr}_B(I^{(A)} \otimes \Pi_0^{(B)} \tilde{\rho}) &= \frac{1}{2} \tilde{\rho}_B + \frac{1}{4} (R(U)\hat{z} \cdot \vec{\beta} + d_k (R(U)\hat{z})_k \sigma_k^{(A)}) \\ &= \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{2} (I^{(A)} + \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}^{(A)}) \right] + \frac{1}{4} (R(U)\hat{z} \cdot \vec{\beta} + d_k (R(U)\hat{z})_k \sigma_k^{(A)}) \\ &= \frac{1}{4} \left[ (1 + R(U)\hat{z} \cdot \vec{\beta}) I^{(A)} + \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}^{(A)} + d_k (R(U)\hat{z})_k \sigma_k^{(A)} \right] \end{aligned}$$

$$p_0 = \text{tr}(I^{(A)} \otimes \Pi_0^{(B)} \tilde{\rho}) = 2(1+p) \implies \tilde{\rho}_0^{(A)} = \frac{1}{2} \left[ I^{(A)} + \frac{(m_+)_k \sigma_k^{(A)}}{1+p} \right] \implies \lambda_0^\pm = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{r_+}{1+p} \right)$$

Reemplazando  $R(U)\hat{z} \rightarrow -R(U)\hat{z}$ , obtenemos  $\tilde{\rho}_1^{(A)}$

$$\tilde{\rho}_1^{(A)} = \frac{1}{2} \left[ I^{(A)} + \frac{(m_-)_k \sigma_k^{(A)}}{1-p} \right] \implies \lambda_1^\pm = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{r_-}{1-p} \right)$$

Donde hemos definido las variables  $p = \vec{\beta} \cdot (R(U)\hat{z})$ ,  $[\vec{m}_\pm]_k = \alpha_k \pm d_k (R(U)\hat{z})_k$ ,  $r_\pm = \|\vec{m}_\pm\|$  y  $\lambda_{0,1}^\pm$  son los autovalores de  $\tilde{\rho}_0^{(A)}$  y  $\tilde{\rho}_1^{(A)}$  respectivamente. Con todas estas definiciones, se puede llegar, a través de un cálculo muy simple, a que las entropías asociadas a  $\tilde{\rho}_0^{(A)}$  y  $\tilde{\rho}_1^{(A)}$  están dadas por

$$S(\tilde{\rho}_0^{(A)}) = 1 - \frac{1}{2} \left[ \left( 1 + \frac{r_+}{1+p} \right) \log \left( 1 + \frac{r_+}{1+p} \right) + \left( 1 - \frac{r_+}{1+p} \right) \log \left( 1 - \frac{r_+}{1+p} \right) \right] \quad (\text{A.8})$$

$$S(\tilde{\rho}_1^{(A)}) = 1 - \frac{1}{2} \left[ \left( 1 + \frac{r_-}{1-p} \right) \log \left( 1 + \frac{r_-}{1-p} \right) + \left( 1 - \frac{r_-}{1-p} \right) \log \left( 1 - \frac{r_-}{1-p} \right) \right] \quad (\text{A.9})$$

Recordemos que la entropía de un estado  $\rho$  cualquiera está dada por (ver sección 2.3)

$$S(\rho) = \sum_j \lambda_j \log_2 \lambda_j \quad (\text{A.10})$$

donde los  $\lambda_j$ , son los autovectores de  $\rho$ .

Ahora bien, las variables  $p$  y  $r_\pm$  dependen de  $R(U)\hat{k}$ , este vector es de norma 1, con lo cual

$$R(U)\hat{k} = (\cos \phi \sin \theta, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (\text{A.11})$$

por lo que se tiene que

$$p = \beta_x \cos \phi \sin \theta + \beta_y \sin \theta \sin \phi + \beta_z \cos \theta \quad (\text{A.12})$$

$$r_\pm = \sqrt{(\alpha_x \pm d_x \cos \phi \sin \theta)^2 + (\alpha_y \pm d_y \sin \theta \sin \phi)^2 + (\alpha_z \pm d_z \cos \theta)^2}$$

Si nos restringimos al estado 3.20 de la sección 3.2, encontramos que

$$\vec{\alpha} = \vec{\beta} = (\alpha(t), 0, 0), \quad d_k = \lambda_k(t) \quad (\text{A.13})$$

por lo tanto

$$p(t) = \alpha(t) \cos \phi \sin \theta, \quad r_\pm = \sqrt{(\alpha(t) \pm \lambda_x \cos \phi \sin \theta)^2 + (\lambda_y \sin \theta \sin \phi)^2 + (\lambda_z \cos \theta)^2} \quad (\text{A.14})$$

Si consideramos el caso en el que  $\vec{a} = \vec{b} = 0$ , entonces tenemos un estado de Bell diagonal y por lo tanto

$$p = 0, \quad r_+ = r_- = r = \sqrt{(\lambda_x \cos \phi \sin \theta)^2 + (\lambda_y \sin \theta \sin \phi)^2 + (\lambda_z \cos \theta)^2} \quad (\text{A.15})$$

con lo cual

$$S(A|B) = 1 - \frac{1}{2} (1+r) \log(1+r) - \frac{1}{2} (1-r) \log(1-r) \quad (\text{A.16})$$

Esta es una función decreciente, por lo que para minimizarla se debe maximizar  $r$ , con lo cual

$$\text{máx}\{S(A|B)\} = 1 - \frac{1}{2} (1+r_{max}) \log(1+r_{max}) - \frac{1}{2} (1-r_{max}) \log(1-r_{max}) \quad (\text{A.17})$$

con [29]

$$r_{max} = \text{máx}\{|\lambda_x|, |\lambda_y|, |\lambda_z|\} \quad (\text{A.18})$$

# A.1. Extremos de la Entropía Condicional Para Estados $X$

En esta sección se detallarán los pasos para llegar a 3.19 y el procedimiento para minimizar la entropía condicional. Cabe remarcar que para estados  $X$  ya se han investigado dichos extremos y se ha indicado que pueden ser encontrados de forma analítica [30]. Acá proponemos una forma más simple y clara de encontrar tales extremos. Además, y a diferencia de [30], se darán los puntos exactos donde estos extremos yacén y mostraremos que si representan máximos o mínimos, dependerá del estado en cuestión.

Entonces, para llegar a 3.19 partimos de la 3.18

$$\Delta\sigma(0) = \frac{1}{4} \left( I - \beta\omega_0\hbar \left[ \cos(\omega_D\tau) (\sigma_A^x + \sigma_B^x) + \sin(\omega_D\tau) \left( \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}} \sigma_A^x \sigma_B^x - \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}} \sigma_A^y \sigma_B^y + \sqrt{2} \sigma_A^z \sigma_B^z \right) \right] \right) \quad (\text{A.19})$$

Como vimos anteriormente, los términos de coherencia dobles no evolucionan en el régimen de decoherencia. Resta entonces analizar el término de polarización  $\sigma_A^x + \sigma_B^x$ . En la base suma, se tiene

$$\sigma_A^x + \sigma_B^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.20})$$

Con lo cual, y usando 3.13, tenemos que

$$\begin{aligned} (\sigma_A^x + \sigma_B^x)(t) &= e^{-9t^2/\tau_X^2} \begin{pmatrix} 0 & e^{3\omega_D t} & 0 & 0 \\ e^{-3\omega_D t} & 0 & e^{-3\omega_D t} & 0 \\ 0 & e^{3\omega_D t} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= e^{-9t^2/\tau_X^2} \cos(3\omega_D t) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + i e^{-9t^2/\tau_X^2} \sin(3\omega_D t) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= e^{-9t^2/\tau_X^2} (\cos(3\omega_D t) (\sigma_A^x + \sigma_B^x) - \sqrt{2}i \sin(3\omega_D t) [T_{2,1} + T_{2,-1}]) \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

$$T_{2,1} := \frac{\sigma_A^z (\sigma_B^x - i\sigma_B^y) + (\sigma_A^x - i\sigma_A^y) \sigma_B^z}{2^{3/2}}, \quad T_{2,-1} := -\frac{\sigma_A^z (\sigma_B^x + i\sigma_B^y) + (\sigma_A^x + i\sigma_A^y) \sigma_B^z}{2^{3/2}} \quad (\text{A.22})$$

$$T_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_{2,-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\implies (\sigma_A^x + \sigma_B^x)(t) = e^{-9t^2/\tau_X^2} (\cos(3\omega_D t) (\sigma_A^x + \sigma_B^x) - \sin(3\omega_D t) [\sigma_A^y \sigma_B^z + \sigma_A^z \sigma_B^y]) \quad (\text{A.23})$$

$$\begin{aligned} \therefore \Delta\sigma(t) = & \frac{1}{4} \left[ I - \beta\omega_0\hbar \left\{ \cos(\omega_D\tau) e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(3\omega_D t) (\sigma_A^x + \sigma_B^x) - e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t) (\sigma_A^y \sigma_B^z + \sigma_A^z \sigma_B^y) \right. \right. \\ & \left. \left. + \sin(\omega_D\tau) \left( \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}} \sigma_A^x \sigma_B^x - \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}} \sigma_A^y \sigma_B^y + \sqrt{2} \sigma_A^z \sigma_B^z \right) \right\} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Para calcular el discord cuántico, debemos pasar este estado a su forma **normal de Bloch**<sup>1</sup>. Para lograr esto último, notemos que la matriz de correlación  $T_{ij}$  (ver ecuación 2.12) está dada por

$$T(t) = -\beta\omega_0\hbar \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}} \sin(\omega_D\tau) & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}} \sin(\omega_D\tau) & -e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t) \\ 0 & -e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t) & \sqrt{2} \sin(\omega_D\tau) \end{pmatrix} \quad (\text{A.25})$$

con lo cual, nuestro estado puede ser reescrito como sigue

$$\Delta\sigma(t) = \frac{1}{4} \left[ I + \alpha(t) (\sigma_A^x + \sigma_B^x) + T_{i,j}(t) \sigma_A^{(i)} \sigma_B^{(j)} \right]; \quad \alpha(t) = -\beta\omega_0\hbar \cos(\omega_D\tau) e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(3\omega_D t) \quad (\text{A.26})$$

Para simplificar un poco el análisis, definimos el siguiente conjunto de funciones y constantes

$$\begin{aligned} a &:= -\beta\omega_0\hbar \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}} \sin(\omega_D\tau) & b &:= \beta\omega_0\hbar \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}} \sin(\omega_D\tau) \\ c(t) &:= \beta\omega_0\hbar e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t) & d &:= -\sqrt{2}\beta\omega_0\hbar \sin(\omega_D\tau) \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

$$T(t) = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & c(t) \\ 0 & c(t) & d \end{pmatrix} \quad (\text{A.28})$$

Esta matriz es real y simétrica y por lo tanto es diagonalizable. Es fácil ver que el vector  $\vec{v}_1 = (1 \ 0 \ 0)^T$ , es un autovector a autovalor  $\lambda_x = a$ . Ahora nos queda encontrar los autovalores restantes, para esto escribimos el polinomio característico  $P(\lambda) := \det(T(t) - \lambda I)$

$$P(\lambda) = (a - \lambda)[(b - \lambda)(d - \lambda) - c^2(t)] = 0 \implies \lambda^2 - (b + d)\lambda + bd - c^2(t) = 0$$

$$\lambda_{\pm} = \frac{b + d \pm \sqrt{(b + d)^2 - 4(bd - c^2(t))}}{2} = \frac{b + d \pm \sqrt{(b - d)^2 + 4c^2(t)}}{2}$$

$$\begin{aligned} \implies \lambda_y(t) &= \beta\omega_0\hbar \left( \frac{\sqrt{2}+1}{2^{3/2}} \sin(\omega_D\tau) + \sqrt{\frac{11 + 6\sqrt{2}}{8} \sin^2(\omega_D\tau) + e^{-18t^2/\tau_x^2} \cos^2(\omega_D\tau) \sin^2(3\omega_D t)} \right) \\ \lambda_z(t) &= \beta\omega_0\hbar \left( \frac{\sqrt{2}+1}{2^{3/2}} \sin(\omega_D\tau) - \sqrt{\frac{11 + 6\sqrt{2}}{8} \sin^2(\omega_D\tau) + e^{-18t^2/\tau_x^2} \cos^2(\omega_D\tau) \sin^2(3\omega_D t)} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Los autovectores asociados se encuentran planteando la ecuación

$$(T(t) - \lambda_{y,z}(t)I)\vec{v}_{y,z} = 0 \quad (\text{A.30})$$

<sup>1</sup>En el apéndice A se muestra con mayor detalle como llevar un estado arbitrario a la forma de Bloch.

de la cual obtenemos

$$\begin{aligned}
v_{y,z}^{(1)} = 0, \quad v_y^{(2)} &= \frac{\frac{\sqrt{2}+3}{\sqrt{2}} - \sqrt{\frac{11+6\sqrt{2}}{4} + 4e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t)} - 2e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t)}{\frac{\sqrt{2}+3}{\sqrt{2}} + \sqrt{\frac{11+6\sqrt{2}}{4} + 4e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t)} + 2e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t)} v_y^{(3)} \\
&= \mathbf{a}(t) v_y^{(3)} \\
\implies \vec{v}_y &= \frac{(0, \mathbf{a}(t), 1)}{\sqrt{1 + \mathbf{a}^2(t)}} \tag{A.31}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
v_z^{(2)} &= \frac{\frac{\sqrt{2}+3}{\sqrt{2}} + \sqrt{\frac{11+6\sqrt{2}}{4} + 4e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t)} - 2e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t)}{\frac{\sqrt{2}+3}{\sqrt{2}} - \sqrt{\frac{11+6\sqrt{2}}{4} + 4e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t)} + 2e^{-9t^2/\tau_x^2} \cos(\omega_D\tau) \sin(3\omega_D t)} v_z^{(3)} = \mathbf{b}(t) v_z^{(3)} \\
\implies \vec{v}_z &= \frac{(0, \mathbf{b}(t), 1)}{\sqrt{1 + \mathbf{b}^2(t)}} \tag{A.32}
\end{aligned}$$

Las matrices de rotación asociadas son

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & v_y^{(2)} & v_z^{(2)} \\ 0 & v_z^{(3)} & v_y^{(3)} \end{pmatrix}, \quad R^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & v_y^{(2)} & v_y^{(3)} \\ 0 & v_z^{(2)} & v_z^{(3)} \end{pmatrix} \tag{A.33}$$

$$\therefore R^T T(t) R = \begin{pmatrix} \lambda_x & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_y(t) & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_z(t) \end{pmatrix} \tag{A.34}$$

Ahora volvemos a la ecuación A.26 y utilizamos la descomposición espectral de  $T(t)$ .

$$\begin{aligned}
\Delta\sigma(t) &= \frac{1}{4} [I + \alpha(t)(\sigma_A^x + \sigma_B^x) + \sum_k \lambda_k(t) \sum_{i,j} R_{i,k} \sigma_A^{(i)} R_{j,k}^T \sigma_B^{(j)}] \\
&= \frac{1}{4} [I + \alpha(t)(\sigma_A^x + \sigma_B^x) + \sum_k \lambda_k(t) \sum_i R_{i,k} \sigma_A^{(i)} \sum_j R_{j,k}^T \sigma_B^{(j)}] \\
&= \frac{1}{4} [I + \alpha(t)(\sigma_A^x + \sigma_B^x) + \sum_k \lambda_k(t) (R \hat{e}_k) \cdot \vec{\sigma}_A (R^T \hat{e}_k) \cdot \vec{\sigma}_B] \tag{A.35}
\end{aligned}$$

Invirtiendo las rotaciones  $R$  y  $R^T$ , obtenemos finalmente

$$\rho(t) := U_R^* \otimes U_{R^T}^* \Delta\sigma(t) U_R \otimes U_{R^T} = \frac{1}{4} [I + \alpha(t)(\sigma_A^x + \sigma_B^x) + \lambda_k(t) \sigma_A^{(k)} \sigma_B^{(k)}], \quad k = x, y, z \tag{A.36}$$

Nótese que el término de polarización no se vió afectado por la rotación efectuada. Esto se debe a que las rotaciones  $R$  y  $R^T$  son alrededor del eje  $x$ .

Hemos logrado escribir nuestro estado en la forma *normal de Bloch* y para encontrar el discord seguimos la idea presentada en [31] y desarrollada en el apéndice A que consiste en estudiar los extremos de la entropía condicional. Para un sistema de dos qubits, la entropía condicional  $S(A|B)$  está dada por:

$$S(A|B) = p_0 S(\rho_0) + p_1 S(\rho_1) \tag{A.37}$$

con

$$p_0 S(\rho_0^{(A)}) = \frac{1+p}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[ \left( 1 + \frac{r_+}{1+p} \right) \log \left( 1 + \frac{r_+}{1+p} \right) + \left( 1 - \frac{r_+}{1+p} \right) \log \left( 1 - \frac{r_+}{1+p} \right) \right] \right\} \quad (\text{A.38})$$

$$p_1 S(\rho_1^{(A)}) = \frac{1-p}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[ \left( 1 + \frac{r_-}{1-p} \right) \log \left( 1 + \frac{r_-}{1-p} \right) + \left( 1 - \frac{r_-}{1-p} \right) \log \left( 1 - \frac{r_-}{1-p} \right) \right] \right\} \quad (\text{A.39})$$

$$p := \alpha(t) \cos \phi \sin \theta, \quad r_{\pm} := \sqrt{(\alpha(t) \pm \lambda_x(t) \cos \phi \sin \theta)^2 + \lambda_y^2(t) \sin^2 \phi \sin^2 \theta + \lambda_z^2(t) \cos^2 \theta} \quad (\text{A.40})$$

donde las variables  $p$  y  $r_{\pm}$  se definen en el apéndice A.

Nuestro objetivo es minimizar  $S(A|B)$ , así que resulta natural estudiar la función en si y sus derivadas respecto a los ángulos  $\theta$  y  $\phi$ .

$$\frac{\partial p}{\partial \phi} = -\alpha(t) \sin \phi \sin \theta, \quad \frac{\partial p}{\partial \theta} = \alpha(t) \cos \phi \cos \theta \quad (\text{A.41})$$

$$\frac{\partial r_{\pm}}{\partial \phi} = \frac{\mp 2\lambda_1(t) \sin \phi \sin \theta (\alpha(t) \pm \lambda_1(t) \cos \phi \sin \theta) + \lambda_2^2(t) \sin 2\phi \sin^2 \theta}{2r_{\pm}} \quad (\text{A.42})$$

$$\frac{\partial r_{\pm}}{\partial \theta} = \frac{\pm 2\lambda_1(t) \cos \phi \cos \theta (\alpha(t) \pm \lambda_1(t) \cos \phi \sin \theta) + \lambda_2^2(t) \sin^2 \phi \sin 2\theta - \lambda_3(t)^2 \sin 2\theta}{2r_{\pm}} \quad (\text{A.43})$$

Ahora notamos que las variables  $p$  y  $r_{\pm}$  definidas en A.40, tienen las siguientes propiedades de simetría

$$p(\pi - \theta, \phi + \pi) = -p(\theta, \phi), \quad r_{\pm}(\pi - \theta, \phi + \pi) = r_{\mp}(\theta, \phi) \quad (\text{A.44})$$

con lo cual

$$S(A|B)(\pi - \theta, \phi + \pi) = S(A|B)(\theta, \phi) \quad (\text{A.45})$$

$$r_{\pm}(\theta, \phi \pm \pi) = r_{\mp}(\theta, \phi), \quad p(\theta, \phi \pm \pi) = -p(\theta, \phi) \implies S(A|B)(\theta, \phi \pm \pi) = S(A|B)(\theta, \phi) \quad (\text{A.46})$$

$$p(\theta, -\phi) = p(\theta, \phi), \quad r_{\pm}(\theta, -\phi) = r_{\pm}(\theta, \phi) \implies S(A|B)(\theta, -\phi) = S(A|B)(\theta, \phi) \quad (\text{A.47})$$

Las ecuaciones A.45, A.46 y A.46 sugieren la existencia de extremos en los siguientes puntos

$$(\theta_0, \phi_0) = \left( \frac{\pi}{2}, \pi \right), (\theta_1, \phi_1) = \left( \frac{\pi}{2}, 0 \right), \quad (\theta_2, \phi_2) = \left( \frac{\pi}{2}, 2\pi \right) \quad (\text{A.48})$$

La ecuación A.45 representa una simetría de paridad, lo que sugiere restringir nuestra búsqueda de extremos al 1er y 2do octante, con lo cual los pares  $(\theta_1, \phi_1)$  y  $(\theta_2, \phi_2)$  resultan ser redundantes.

Otra simetría que se encuentra es la siguiente

$$S(A|B)(-\theta, -\phi) = S(A|B)(\theta, \phi) \quad (\text{A.49})$$

Esto sugiere que debe haber un extremo en el punto

$$(\theta_3, \phi_3) = (0, 0) \quad (\text{A.50})$$

Usando las simetrías anteriores, encontramos otros extremos en

$$(\theta_4, \phi_4) = (0, \pi), \quad (\theta_5, \phi_5) = (0, 2\pi), \quad (\theta_6, \phi_6) = (\pi, \pi), \quad (\theta_7, \phi_7) = (\pi, 0), \quad (\theta_8, \phi_8) = (\pi, 2\pi) \quad (\text{A.51})$$

Para verificar que los pares  $(\theta_0, \phi_0)$  y  $(\theta_3, \phi_3)$  anulan las derivadas respecto a  $\theta$  y  $\phi$ , solo debemos evaluar dichas derivadas en la coordenadas aludidas. Es fácil ver que en  $(\theta_0, \phi_0)$  anula las ecuaciones A.41, A.42 y A.43, con lo cual

$$d_\phi S(A|B)(\theta_0, \phi_0) = d_\theta S(A|B)(\theta_0, \phi_0) = 0 \quad (\text{A.52})$$

Por otro lado

$$p(0, 0) = 0, \quad \left. \frac{\partial r_\pm}{\partial \phi} \right|_{(0,0)} = 0, \quad \left. \frac{\partial r_\pm}{\partial \theta} \right|_{(0,0)} = \frac{\mp 2\lambda_1(t)\alpha(t)}{r'}, \quad r' := r_\pm(0, 0) = |\lambda_3(t)|$$

$$\left. \frac{\partial S(A|B)}{\partial p} \right|_{(0,0)} = 0, \quad \left. \frac{\partial S(A|B)}{\partial r_+} \right|_{(0,0)} = \left. \frac{\partial S(A|B)}{\partial r_-} \right|_{(0,0)} \implies \left. d_\theta S(A|B) \right|_{(0,0)} = \left. d_\phi S(A|B) \right|_{(0,0)} = 0 \quad (\text{A.53})$$

Debido a que  $S(A|B)$  es  $\pi$ -periódica respecto a  $\phi$  y es una función continua, sabemos que debe existir un extremos en el intervalo  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\phi \in (0, \pi)$  (Teorema de Rolle). Ahora bien, el comportamiento sinusoidal de la entropía sugiere que dicho extremo se encuentra en  $(\theta_9, \phi_9) = \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ . La verificación de que tenemos un extremo en ese punto es inmediata.

$$p\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) = 0, \quad \left. \frac{\partial r_\pm}{\partial \phi} \right|_{\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)} = \frac{\mp 2\lambda_1(t)\alpha(t)}{\tilde{r}}, \quad \tilde{r} := r_\pm\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) = \sqrt{\alpha^2(t) + \lambda_2^2(t)}$$

$$\left. \frac{\partial r_\pm}{\partial \theta} \right|_{\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)} = 0, \quad \left. \frac{\partial S(A|B)}{\partial p} \right|_{\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)} = 0, \quad \left. \frac{\partial S(A|B)}{\partial r_+} \right|_{\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)} = \left. \frac{\partial S(A|B)}{\partial r_-} \right|_{\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)}$$

$$\therefore \left. d_\theta S(A|B) \right|_{\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)} = \left. d_\phi S(A|B) \right|_{\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)} = 0 \quad (\text{A.54})$$

Aparentemente hemos encontrado todos los extremos que las simetrías revelan. Algo importante a notar es que debido a que la entropía es invariante ante rotaciones, entonces el análisis presentando vale para cualquier rotación de A.36. En base a esto consideremos el estado A.36 a  $t = 0$ , esto es

$$\rho(0) = \frac{1}{4}[I + \alpha(0)(\sigma_A^x + \sigma_B^x) + \lambda_k(0)\sigma_A^{(k)}\sigma_B^{(k)}] \quad (\text{A.55})$$

Se tiene entonces que

$$p = \alpha(0) \cos \phi \sin \theta, \quad r_\pm = \sqrt{(\alpha(0) \pm \lambda_x(0))^2 \cos^2 \phi \sin^2 \theta + \lambda_y^2(0) \sin^2 \phi \sin^2 \theta + \lambda_z^2(0) \cos^2 \theta^2} \quad (\text{A.56})$$

Insertando estos valores en A.38 y A.39 obtenemos



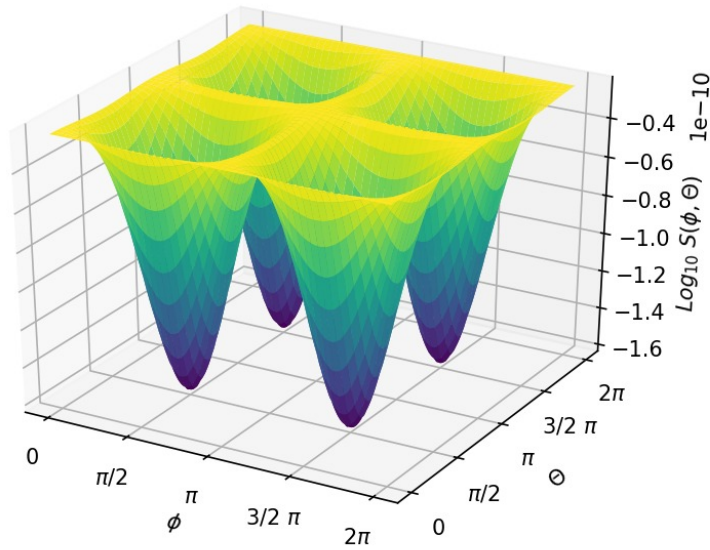


Figura A.1: Gráfico de la entropía relativa asociado al estado en A.55, en escala logarítmica.

En la figura A.1 podemos apreciar las simetrías de paridad y el comportamiento sinusoidal que se mencionó. También vemos que los extremos se encuentran donde el análisis lo indica, es decir en  $(\theta_0, \phi_0) = (\pi/2, \pi)$ ,  $(\theta_3, \phi_3) = (0, 0)$  y  $(\theta_9, \phi_9) = (\pi/2, \pi/2)$ . En este caso particular encontramos un mínimo absoluto en  $(\theta_9, \phi_9)$ , un mínimo relativo en  $(\theta_3, \phi_3)$  y un máximo absoluto en  $(\theta_0, \phi_0)$ . Los demás extremos son, tal y como se mencionó previamente, consecuencia de la periodicidad de  $S(A|B)$ . Algo sorprendente y que vale la pena destacar, es que los puntos donde yacen los extremos de  $S(A|B)$  no dependen del tiempo. En el capítulo 4 veremos que el punto  $(\theta_9, \phi_9)$  representa un mínimo absoluto para todo  $t$ .

# Bibliografía

- [1] Tabesh, F.T., Karpat, G., Maniscalco, S. et al. Time-invariant discord: high temperature limit and initial environmental correlations. *Quantum Inf Process* 17, 87 (2018). DOI: <https://doi.org/10.1007/s11128-018-1853-6>
- [2] H. Olliver, W. Zurek. Quantum Discord: A Measure of Quantumness of Correlations. (2001). *Phys. Rev. Letters* (88), 017901.  
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.017901>
- [3] L. Henderson, V. Vedral. Classical, Quantum and Total Correlations. (2001). *Journal of Physics A: Mathematical and General*. DOI: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/34/35/315>
- [4] Mahesh T.S., Sudheer Kumar C.S., Bhosale U.T. Quantum Correlations in NMR Systems. In: Fanchini F., Soares Pinto D., Adesso G. (eds) *Lectures on General Quantum Correlations and their Applications*. Quantum Science and Technology. Springer, Cham. (2017)
- [5] S. L. Braunstein, C. M. Caves, R. Jozsa, N. Linden, S. Popescu, and R. Schack *Phys. Rev. Lett.* 83, 1054 (1999)
- [6] E. B. Fel'dman, A. N. Pyrkov and A. I. Zenchuk. Solid-state multiple quantum NMR in quantum information processing: exactly solvable models. *The Royal Society*. 2012 Vol 370 (1976).  
DOI: <https://doi.org/10.1098/rsta.2011.0499>
- [7] J. Maziero, R. Auccaise, L. C. Céleri, D. O. Soares-Pinto, E. R. deAzevedo, T. J. Bonagamba, R. S. Sarthour, I. S. Oliveira & R. M. Serra. Quantum Discord in Nuclear Magnetic Resonance Systems at Room Temperature. *Brazilian Journal of Physics* volume **43**, 86–104(2013).  
DOI: <https://doi.org/10.1007/s13538-013-0118-1>
- [8] Kuznetsova, E.I., Yurischev, M.A. Quantum discord in spin systems with dipole–dipole interaction. *Quantum Inf Process* 12, 3587–3605 (2013).  
DOI: <https://doi.org/10.1007/s11128-013-0617-6>

- [9] Segnorile HH, Zamar RC. Quantum decoherence and quasi-equilibrium in open quantum systems with few degrees of freedom: application to  $^1\text{H}$  NMR of nematic liquid crystals. *J Chem Phys.* 2011 Dec 28;135(24):244509. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3668559>. PMID: 22225171.
- [10] H. H. Segnorile, C. E. González, R. C. Zamar. Adiabatic quantum decoherence in many non-interacting subsystems induced by the coupling with a common boson bath (2020). arXiv: <https://arxiv.org/abs/1912.12993>
- [11] F. D. Domínguez, C. E. González, H. H. Segnorile, R. C. Zamar. Irreversible decoherence of dipole interacting nuclear spins coupled with a phonon bath. *Phys. Rev. A* 93, 022120 (2016).  
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.93.022120>
- [12] Keller, Alexander. Spin-1 Behavior of Systems of Dipolar Coupled Pairs of Spin- $\frac{1}{2}$  Nuclei. *Advance in Magnetic and Optical Resonance*, Academic Press, Vol. 12,(1988)
- [13] Breuer, Heinz and Petruccione, Francesco . “The Theory of Quantum Measurement.” *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University, New York, 2006, pp. 87–91.  
DOI: <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199213900.001.0001>
- [14] Rivas, Ángel and Huelga, Susana. “Time Evolution in Open Quantum Systems.” *Open Quantum Systems*, Springer, Berlin, Heidelberg, 2012, pp. 21–26.  
DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-23354-8>
- [15] Blum, Karl. “Quantum Theory of Relaxation.” *Density Matrix and Its Applications* , vol. 64, Springer, Berlin, Heidelberg, 2012, pp. 275–287.  
DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-20561-3>
- [16] V. Gorini, et al. “Completely Positive Dynamical Semigroups of N-Level Systems .” *J. Math. Phys.* **17**,821, (1976)  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.522979>.
- [17] H. Breuer and F. Petruccione. “Quantum Master Equation.” *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University, New York, 2006, pp. 110–137.
- [18] H. Breuer and F. Petruccione. “Decoherence.” *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University, New York, 2006, pp. 220–225.
- [19] M. Goldman (1970) Introduction to Spin Temperature. In: *Spin Temperature and Nuclear Magnetic Resonance in Solids*. Oxford Univ. Press (Clarendon), London and New York.
- [20] W. G. Proctor and W. A. Robinson. *Phys. Rev* Vol 104, pag 1344. (1956).
- [21] E. M. Purcell. *Phys. Rev.* **81**, 156. (1951).

- [22] E. M. Purcell and R. V. Pound. Phys. Rev. **81**, 279. (1951). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.81.279>
- [23] A. Abragam and W. G. Proctor. Phys. Rev. **109**, 1441. (1958). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.109.1441>
- [24] J. Jeener, P. Broekaert. Physics Review. (1967). Vol. 157, Issue 2, pp. 232-240
- [25] Eisendrath, H., Stone, W., Jeener, J. Physical Review B (Solid State), Volume 17, Issue 1, January 1, 1978, pp.47-53. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.17.47>
- [26] The Journal of Chemical Physics 139, 154901 (2013); DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4824124>
- [27] Streltsov A. (2015) Quantum Correlations Beyond Entanglement. In: Quantum Correlations Beyond Entanglement. SpringerBriefs in Physics. Springer, Cham. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-09656-8>
- [28] Pirandola, S. Sci Rep 4, 6956 (2014). DOI: <https://doi.org/10.1038/srep06956>
- [29] S. Luo. Physical Review A 77(4). (2008). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.77.042303>
- [30] Mazhar Ali, A. R. P. Rau, and G. Alber. Phys. Rev. A **81**, 042105. (2010). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.81.042105>
- [31] D. Girolami and G. Adesso. Phys. Rev. A **83**, 052108. (2011). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.83.052108>
- [32] Hemant Katiyar, Soumya Singha Roy, T. S. Mahesh, and Apoorva Patel. Phys. Rev. A **86**, 012309. (2012). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.86.012309>
- [33] J. Maziero, T. Werlang, F. F. Fanchini, L. C. Céleri, and R. M. Serra. Phys. Rev. A **81**, 022116. (2010). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.81.022116>
- [34] ECS.Baylor.edu. JESD79-2b. JEDEC Solid State Technology Assoc. January 2005. Retrieved August 27, 2012.
- [35] N. Bloembergen. *On the interaction of nuclear spins in a crystalline lattice*. (1949). DOI: [https://doi.org/10.1016/0031-8914\(49\)90114-7](https://doi.org/10.1016/0031-8914(49)90114-7)
- [36] W. Zhang and D. G. Cory. Phys. Rev. Lett. **80**, 1324. (1998). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.1324>
- [37] G. S. Boutis, D. Greenbaum, H. Cho, D. G. Cory, and C. Ramanathan. Phys. Rev. Lett. **92**, 137201. (2004). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.137201>
- [38] D. Greenbaum, M. Kindermann, C. Ramanathan, and D. G. Cory. Phys. Rev. B **71**, 054403. (2005). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.054403>