UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA

Facultad de Ciencias
Instituto de Física

EQUILIBRIO TERMODINÁMICO DEL CAMINANTE CUÁNTICO UNIDIMENSIONAL

Para obtener el título de Magíster en Física

Autor:
Lic. Nicolás Díaz Negrín

Orientadores:
Dr. Raúl Donangelo (orientador)
Dr. Alejandro Romanelli (co-orientador)

Dedicado a mis padres, Estela y César,
por inculcar en mi el interés por el estudio.

Agradecimientos

En primer lugar quisiera agradecer a mis tutores, Raúl Donangelo y Alejandro Romanelli, quienes me permitieron trabajar junto a ellos, me guiaron durante todo el camino, y fueron pacientes con mis tiempos ante algunas dificultades que surgieron. Quisiera también agradecer a 2 colegas con quienes siempre estuvimos intercambiando ideas, Renato Portugal y Franklin Marquezino. Al programa de posgrado PEDECIBA, y a las secretarias Jimena y Ana, quienes estuvieron siempre dispuestas con la mejor onda a despejar mis dudas administrativas. A los entes que aportaron fondos para la financiación del trabajo: Agencia Nacional de Investigación e Innovación (ANII), Comisión Académica de Posgrado (CAP) y Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nivel Superior (CAPES). Agradecer también a los miembros del tribunal, Arturo Lezama, Daniel Ariosa, Pablo Monzón, Nicolás Rubido y Horacio Failache, por aceptar formar parte del mismo, por tomarse el tiempo de leer la tesis y marcarme correcciones para mejorar el trabajo.

A mis padres, Estela y César, y mis hermanos, Santi y Seba, que siempre están, se preocupan y me apoyan en cada paso que doy, no sólo en lo referente a mis estudios y mi formación, sino en cualquier ámbito de la vida. Esta tesis es, en gran parte, producto de la formación y del cariño que mis padres y hermanos me han brindado.

Un especial agradecimiento a mis compañeros de oficina y amigos, Sofi, Rey y Gonza, por infinitas consultas asociadas al posgrado, tanto específicas del trabajo como administrativas. Por todos los consejos, por aguantar mis malos humores en la oficina (que no fueron pocos), por estar siempre dispuestos a darme una mano, a evacuar mis dudas, y por los momentos de distracción compartidos. A Fede y a Santi de M., que también siempre han estado ahí, al firme, preguntando cómo iba, dándose un tiempo para tomar un café para despejar la mente y compartir gratos momentos. A compañeros que también siempre han estado pendientes de mi avance, a Marce, Lu, Rorro y Javi P. A Thomas, por los tiempos cedidos en Moderna para finalizar la tesis. A Majo, por todas las horas que pasamos en estos últimos años hablando de la maestría, por los consejos y por acompañarme en un proceso que, de una u otra forma, ha sido de superación constante.

Otro especial agradecimiento a una persona que ha estado infinitas veces a disposición para escucharme, aconsejarme y guiarme, y a quién aprecio también infinitamente, a

Made; esa "tía" de la vida que me dio la facultad y que siempre está ahí cuando la preciso. Agradecer también a Michael, que ante un traspié en el camino se tomó el tiempo de hablar conmigo de forma muy sincera, lo cual me hizo bien y aprecio.

Por último, pero bajo ningún concepto menos importante, a la persona que me ha acompañado durante gran parte de la maestría, quien me ha brindado todo su amor, su cariño, su compañía; toda su paciencia para aguantar mis bajones, y toda su alegría para sacarme de ellos. Por escucharme hasta el cansancio hablar de la tesis, por ensayar n veces conmigo la defensa (al punto de poder presentarla ella), por aconsejarme e incluso por inspirarme; nunca me hubiese imaginado tener una compañera tan linda a mi lado. Por todo eso y más, gracias Romi, ¡te amo!.

Índice general

1. Introducción **1**

I. Nociones Previas **7**

2. Introducción a Sistemas Cuánticos **9**

2.1. Postulados de la Mecánica Cuántica 9

2.1.1. Estados Mezclados 12

2.2. Propiedades del Operador Densidad 14

2.2.1. Elementos del Operador Densidad 14

2.2.2. Caracterización del Operador Densidad 15

2.2.3. Estados Mezclados y Puros 16

2.2.4. Operador Densidad Reducido 17

2.3. Enredo 18

2.3.1. Estado Puro 18

2.3.2. Estado Mezclado 20

2.3.3. Entropía de Von Neumann 21

2.3.4. Sistema Bipartito 23

2.3.4.1. Descomposición de Schmidt 23

3. Caminante Aleatorio **25**

3.1. Caminante Aleatorio Unidimensional 25

3.1.1. Media y Desviación Estándar 27

3.2. Procesos Markovianos. 29

3.2.1. Caminante Aleatorio en el N-Ciclo 31

4. Caminante Cuántico **35**

4.1. Introducción y Motivaciones 35

4.2. Caminante Cuántico Unidimensional 35

4.2.1. Espín como moneda 35

4.2.2. Operador Evolución 36

4.2.3. Mapa del Caminante Cuántico Unidimensional 39
4.2.4. Condiciones Iniciales: partícula localizada 40
4.2.5. Diagonalización del Operador Evolución **U** 42
4.2.6. Distribución de Probabilidad del CC Sobre la Línea 43
4.2.6.1. Velocidades de Fase y de Grupo 46
4.2.6.2. Comportamiento Asintótico de la Distribución de Probabilidad 47
4.2.6.3. Distribución de Probabilidad Promedio 48
4.3. Comparación del CC y CA: Desviación Estándar y Tiempo de Mezclado . 50
4.3.1. Desviación Estándar 50
4.3.2. Tiempo de Mezclado 52

II. Termodinámica del Caminante Cuántico **53**

5. Termodinámica del Caminante Cuántico en la Línea **55**
5.1. Distribución Global de Quiralidad (DGQ) 55
5.1.1. Enredo y Temperatura de Enredo 57
5.1.2. Caminante Inicialmente Localizado 63

6. Termodinámica del Caminante Cuántico en el N-Ciclo **67**
6.1. Evolución del Caminante Cuántico en el N-Ciclo 67
6.2. Operador Densidad Reducido 71
6.2.1. Operador en la Base de Fourier 72
6.2.2. Distribución de Probabilidad Promedio (DPP) del Operador Densidad Reducido 74
6.2.3. Caminante Inicialmente Localizado con Espín Arbitrario 75
6.3. Termodinámica del CC en el N-Ciclo 76
6.3.1. Temperatura de Enredo Asintótica 76
6.3.2. Temperatura Transitoria de Enredo 80
6.3.3. Comportamiento Markoviano del CC sobre el N-Ciclo 88

7. Conclusiones y Perspectivas **93**

III. Apéndices **97**

Bibliografía **109**

Índice de figuras

3.1. Representación gráfica de una red o grafo 30
3.2. Tiempo de Mezclado 34

4.1. Esfera de Bloch 42
4.2. Distribución de Probabilidad I 44
4.3. Distribución de probabilidad II 45
4.4. Desviación Estándar 51

5.1. Funciones Termodinámicas 62
5.2. Isotermas Asintóticas 64
5.3. Q(t) para estados simétricos 65

6.1. Función $f(N, \theta)$ 78
6.2. Isotermas Asintóticas 80
6.3. Temperatura de Enredo 82
6.4. Tiempos Característicos I 85
6.5. Tiempo Característicos II 87
6.6. Comportamiento de la Constante c 88

Nomenclatura

CA	Caminante aleatorio
CC	Caminante cuántico
DGQ	Distribución global de quiralidad
DPP	Distribución de probabilidad promedio
(γ, φ)	Ángulos sobre esfera de Bloch
δ_{ij}	Delta de Kronecker
$\mid \psi\rangle$	Estado Cuántico Puro en notación de Dirac
ρ	Matriz u operador densidad
$\rho_c(t)$	Matriz u operador densidad del espín
τ_ϵ	Tiempo de mezclado
θ	Sesgo del operador moneda
$\widetilde{\tau}_\epsilon$	Tiempo de termalización
tr_X	Traza sobre el espacio X
$(a_n(t), b_n(t))$	Coeficientes del espín en la posición n
$\mathbb{H}$	Operador Hamiltoniano
$\mathbb{I}_X$	Operador identidad en el espacio X
$\mathcal{H}$	Espacio de Hilbert
H	Matriz u operador de Hadamard
N	Número de nodos sobre el N-ciclo

S Entropía de Von Neumann

U Operador evolución

Resumen

El caminante cuántico sobre el N-ciclo ha sido extensamente estudiado desde su introducción, y su relevancia radica en la simplicidad de la red así como en su potencialidad para el desarrollo de algoritmos cuánticos. Aquí presentamos el estudio de las propiedades térmicas del sistema, siendo este abordaje distinto al usualmente empleado. La idea del estudio surge a partir del trabajo de Romanelli [42] en el cual, sabiendo que la distribución de probabilidad correspondiente al espacio de la quiralidad presenta un límite asintótico, podemos a partir de éste pensar al sistema en un equilibrio termodinámico, descrito por el ensemble canónico. En este contexto, el trabajo realizado consistió en extender la idea mencionada al caso del caminante cuántico sobre el N-ciclo. Así, estudiamos el régimen estacionario del sistema encontrando las expresiones analíticas que rigen a las funciones termodinámicas y obtuvimos el comportamiento sobre la línea en el límite en que $N \to \infty$. Investigamos también el régimen transitorio, introduciendo dos tiempos característicos: el *tiempo de mezclado* y el *tiempo de termalización*. Uno de los principales resultados del trabajo es la relación lineal existente entre estos, lo cual permite dar una nueva interpretación al *tiempo de mezclado*. Comparamos los resultados obtenidos con los reportados en la bibliografía.

Abstract

The quantum walk over the N-cycle has been extensively studied since it was introduced, and its importance relies on its simplicity as well as its potentiality in building new quantum algorithms. Here we present the thermal properties of the system, being this an unusual point of view. The idea was introduced by Romanelli in Ref.[42] in which, knowing that the quirality probability distribution presents an asymptotic behavior, we can think of the system as being in thermodynamic equilibrium, and so describe it using the canonical ensemble. In this context, the work presented here consisted in extending this idea to the quantum walk over the N-cycle. This way, we studied the stationary regime finding the analytic expressions that determine the thermodynamic functions of the system, and we obtained the line behavior in the limit $N \to \infty$. We also investigated the transient regime, focusing on two characteristic times: the *mixing time* and the *thermalization time*. One of the main results of this work is that this two times are linearly related, which provides us with a new way to interpret the *mixing time*. We also compared our results with the ones reported in the bibliography.

1. Introducción

La tesis aquí presentada se basa en el estudio de un sistema, el caminante cuántico (CC), cuya utilidad más relevante puede enmarcarse en la búsqueda de algoritmos cuánticos, y así, su principal aporte (aunque no el único) es en las áreas de computación e información cuánticas. Para comprender y contextualizar el objeto de estudio, es importante hacer una breve retrospección de las áreas del conocimiento involucradas: la computación clásica, el caminante aleatorio y su vinculación con la anterior, y la mecánica cuántica y el advenimiento junto con ella, de una nueva rama producto de la sinergia de las anteriores, la computación cuántica.

La computación clásica surge a partir de la máquina de Turing, desarrollada en 1936 por el matemático inglés Alan Turing. La misma es, de forma resumida, una construcción abstracta que trabaja sobre un conjunto finito de símbolos, los cuales puede manipular siguiendo un conjunto determinado de reglas dispuestas por el operador del dispositivo, lo que usualmente denominamos un algoritmo. Los desarrollos teórico realizados a partir de los trabajos de Turing, así como de otros investigadores que diseñaron dispositivos equivalentes (Church, Post, Gödel) condujeron al desarrollo de las computadoras personales (CP's) modernas. La relevancia de la máquina de Turing es tal que dado cualquier algoritmo que pueda ser aplicado en una CP, se puede construir una máquina de Turing capaz de implementar dicho algoritmo.

En el desarrollo de la computación surge la clasificación de problemas a resolver mediante el uso de las CP's según la complejidad de los mismos, área conocida como *teoría de la complejidad computacional*. A grandes rasgos hay dos clasificaciones vinculadas al tiempo requerido para la resolución de un problema[1]: los problemas tipo P y los tipo NP. Los tipo P son aquellos que pueden ser resueltos de forma efectiva (tiempos polinomiales), mientras que los NP son aquellos en los cuales se puede chequear una solución en particular de forma efectiva. A modo de ejemplo, no se conoce hasta el momento una solución efectiva mediante el uso de computación clásica para la factorización en primos de un número n cualquiera, mientras que si se agrega información y se nos brinda un

[1] Existe una amplia clasificación de problemas dependiendo, no sólo del tiempo requerido para encontrar o chequear soluciones, sino además de la capacidad espacial (memoria) de la CP utilizada.

número primo p, es fácil chequear si el mismo divide o no a n. Así, este problema se clasifica como NP. Una de las grandes preguntas abiertas en el campo de las ciencias de la computación es si $P = NP$, o si existen problemas en NP que no pueden resolverse de forma efectiva. En este contexto, una herramienta que ha sabido posicionarse en la creación de algoritmos para disminuir los tiempos de cómputos, es el caminante aleatorio (CA). Aunque es quizás más conocido por su introducción en el problema del movimiento Browniano[19], el mismo ha sido implementado en algoritmos aleatorios en los cuales se busca, por ejemplo, encontrar un objeto en particular en un conjunto desordenado. En este sentido, uno de los métodos con componente aleatoria más populares es el *Método de Monte Carlo* [50]. Desde el punto de vista tecnológico, la computación clásica presenta otra dificultad a partir de la denominada *ley de Moore*. La misma establece de forma empírica que el número de transistores (componente elemental de las CP's) utilizados en la elaboración de circuitos integrados se duplica cada dos años, lo cual conduce inexorablemente a construir dispositivos cada vez más pequeños en la elaboración de las CP's. Desde un punto de vista físico, dichos dispositivos van a quedar enmarcados, eventualmente, en el ámbito descrito por la física cuántica.

La física cuántica (o mecánica cuántica) se desarrolló a principios del siglo XX a partir de un conjunto de problemas abiertos en la física teórica que no podían ser explicados mediante el uso de las ideas consideradas hasta el momento: básicamente la mecánica Newtoniana y el electromagnetismo. Ejemplos de dichos problemas son la radiación del cuerpo negro y la catástrofe ultravioleta, el efecto fotoeléctrico, y las líneas de emisión y absorción de átomos, entre otros fenómenos. En las primeras décadas del siglo XX fueron surgiendo soluciones aisladas a estos problemas basadas en hipótesis más bien consideradas esotéricas o ad hoc, como fueron las hipótesis de Bohr para explicar las líneas de emisión del átomo de hidrógeno. Con el pasar del tiempo, y mediante evidencias empíricas, las ideas formuladas de cuantización de la energía, longitud de onda asociada a una partícula, etc. fueron ganando fuerza, concluyendo en la década del 30 en la primer formulación moderna de la mecánica cuántica debida a E.Schrödinger. En esta se establece que todo sistema cuántico puede ser descrito por una función de onda, la cual contiene toda la información posible del sistema, y que la misma, estando el sistema aislado, evoluciona de forma determinista mediante la ecuación de Schrödinger. A diferencia de toda formulación conocida hasta el momento, la teoría cuántica tiene la peculiaridad de requerir de una interpretación probabilística al introducir procesos de medición, la cual ha sido hasta el momento contrastada con gran precisión de forma empírica. La formulación presenta otras diferencias notorias al compararla con la física clásica, como la superposición de estados para describir el comportamiento de una partícula (y la

posibilidad de interferencia de los mismos), y el enredo existente en sistemas formados por más de un subsistema. Ambos fenómenos fueron explicados de forma pictórica por Schrödinger en su famosa paradoja, en la cual el gato está vivo y muerto mientras se mantenga cerrada la caja en la que se encuentra, es decir, mientras el sistema no sea observado. En función de estos fenómenos novedosos se empezó a pensar en la década del 80 en la posibilidad de desarrollar una teoría de la computación cuántica, la cual, como mencionamos, cuadraría naturalmente en la descripción de componentes pequeños, pero además, motivada por la posibilidad de encontrar algoritmos cuánticos que puedan resolver efectivamente problemas que hasta el momento no pueden ser resueltos mediante el empleo de CP's clásicas. Los trabajos de P. Benioff [6], R.Feynman [23] y D.Deutsch [16] fueron los pioneros en el área. Dentro de los algoritmos cuánticos se destacan el de Deutsch-Jozsa [17] y el de Shor [46], los cuales brindan una rapidez de resolución exponencial frente a cualquier algoritmo clásico conocido. El de Shor es particularmente relevante dado que puede resolver efectivamente la factorización en números primos de un número n cualquiera, problema en el que se basan varios sistemas de encriptación de datos usados actualmente, e.g., el RSA [24]. Por otro lado el algoritmo de Grover [26], correspondiente a un algoritmo de búsqueda en un conjunto desordenado de elementos, ofrece una mejora polinomial en la velocidad de resolución. En este contexto, se pensó en el uso del caminante cuántico para la creación de algoritmos eficientes de forma análoga a como el CA es utilizado en computación clásica. Introducido por Aharonov et al. [3], el caminante cuántico se hizo rápidamente de un lugar dentro de la computación cuántica al encontrar que se dispersa cuadráticamente más rápido que su contrapartida clásica. De esta forma, el mismo puede ser implementado en algoritmos de búsqueda como el de Grover previamente mencionado. Más aun, recientemente Childs [12] demostró que el CC puede ser implementado para reproducir cualquier tarea sobre una computadora cuántica, y por lo tanto posee carácter de computadora cuántica universal.

El desarrollo de computadoras cuánticas ha sido lento debido, fundamentalmente, a la difícil tarea de buscar metodologías que permitan controlar los efectos de decoherencia los cuales conllevan a que el estado se comporte de forma clásica. En este sentido existen actualmente grandes esfuerzos en desarrollar la computación cuántica por empresas de la talla de IBM y Google entre otras. IBM, de hecho, posee una plataforma de computación cuántica disponible mediante una nube, para que cualquier usuario pueda experimentar con ella. Recientemente la empresa anunció una mejora considerable en relación a los recursos disponibles en dicha plataforma [40]. De esta forma, la inminente construcción de computadoras cuánticas es, quizás, el principal motivo por el cual resulta relevante seguir investigando el caminante cuántico.

El caminante cuántico ha sido extensamente investigado a partir de su introducción [3]. El estudio del CC se divide entre el caminante de tiempo continuo y el de tiempo discreto. Mientras que el primero está definido sobre un espacio de posiciones y evoluciona según la ecuación de Schrödinger en el espacio de Hilbert correspondiente, el último requiere de un espacio adicional, usualmente denominado espacio de la moneda, para que la evolución del mismo sea unitaria. Así, la evolución de este se da también según la ecuación de Schrödinger pero sobre un espacio más grande compuesto por la parte espacial y la moneda. El trabajo de tesis trata el caso del CC de tiempo discreto que se desplaza en un espacio unidimensional, el N-ciclo.

Uno de los comportamientos más sorprendentes del CC es su capacidad de dispersarse cuadráticamente más rápido que su análogo clásico [47]. A partir de esto, el sistema ha sido estudiado en una gran variedad de topologías, dentro de las cuales se destacan la línea infinita, el N-ciclo y el hipercubo [30, 48]. En el trabajo de Aharonov et al.[2] se sentaron las bases para el estudio del CC sobre grafos finitos, introduciendo varios conceptos en analogía a los usados para el CA, dentro de los cuales se destaca para nuestro trabajo el *tiempo de mezclado*. El mismo mide el tiempo requerido por el sistema para que esté tan cerca como se desee de su límite asintótico. En el caso del CC sobre la línea, la distribución de probabilidad presenta límite asintótico [34, 41, 1] mientras que para grafos finitos es necesaria la introducción de la *distribución de probabilidad promedio* para obtener un comportamiento asintótico. El *tiempo de mezclado* del CC sobre el N-ciclo es de orden $\mathcal{O}(N\log(N))$ siendo casi cuadráticamente más rápido que el CA.

Nuestro trabajo aborda el problema desde un punto de vista distinto al usualmente empleado. Considerando el estado asintótico del CC, podemos pensar al sistema en equilibrio termodinámico, equilibrio al que se llega en la interacción de las partes del sistema: posiciones y moneda. La idea fue introducida por Romanelli en [42], en el cual introduce la *temperatura de enredo* para el CC sobre la línea como una cantidad que cuantifica el equilibrio del sistema. A partir de este trabajo, la idea fue extendida a casos más generales [44, 43], considerando siempre el límite asintótico del sistema. La tesis presentada investiga cuál es el comportamiento de las funciones termodinámicas para el CC sobre el N-ciclo, y la relación entre el tamaño del N-ciclo y el comportamiento del CC sobre la línea. Además, se estudia el régimen transitorio para establecer los tiempos característicos en los cuales las funciones termodinámicas alcanzan sus valores en equilibrio. En este sentido introducimos el *tiempo de termalización* y lo relacionamos con el *tiempo de mezclado*, encontrando que existe entre ellos una relación proporcional. La relación permite dar una nueva interpretación al *tiempo de mezclado* desde un punto de vista más físico.

Estudiamos también como son las dependencias del tiempo de mezclado con la precisión y el número de puntos sobre el N-ciclo y las comparamos con los resultados establecidos en la bibliografía. El estudio nos va a permitir establecer a partir de qué N el N-ciclo se mezcla como la línea. Finalmente estudiamos estos tiempos característicos para un proceso Markoviano obtenido como caso particular, y comparamos con resultados conocidos. Los principales resultados de la tesis fueron publicados en [18]

El trabajo está organizado de la siguiente manera: en el Cap.2 introducimos los conceptos cuánticos necesarios para el estudio del sistema. En los Caps.3 y 4 presentamos las ideas básicas del CA y CC respectivamente y en el Cap.5 repasamos la termodinámica del CC sobre la línea. Finalmente presentamos los resultados obtenidos en el estudio del CC sobre el N-ciclo en el Cap.6, y planteamos conclusiones y trabajos futuros en el Cap.7.

Parte I.

Nociones Previas

2. Introducción a Sistemas Cuánticos

En este capítulo vamos a presentar lo que consideramos son las herramientas básicas de mecánica e información cuánticas para que el lector pueda, de forma autocontenida, hacer un correcto seguimiento del trabajo realizado. Así, vamos a comenzar introduciendo los postulados de la física cuántica en la perspectiva de Schrödinger a través de los estados cuánticos y su evolución: desde cómo describir un estado cuántico sencillo, como una partícula aislada sin espín, hasta sistemas más complejos como partículas con espín, compuestos por muchas partículas, etc. Repasaremos qué información puede obtenerse a partir de un sistema cuántico y de qué forma. Esto nos va a posibilitar presentar una descripción más general mediante una herramienta de gran relevancia en el estudio de sistemas cuánticos abiertos, así como aquellos en los cuales no tenemos total conocimiento de en qué estado se encuentran: la matriz u operador densidad. Este no sólo presenta un manejo matemático relativamente sencillo, sino que además posibilita cuantificar algunas propiedades que de otra forma son difíciles de obtener. En esta dirección presentaremos un recurso característico de los sistemas cuánticos compuestos y de enorme relevancia en procesos de información cuántica, el enredo, y veremos de qué forma puede ser cuantificado.

2.1. Postulados de la Mecánica Cuántica

Vamos a presentar entonces un breve repaso de los postulados de la física cuántica en la descripción de Schrödinger, en la cual los estados evolucionan en el tiempo mientras que los operadores y observables asociados al sistema permanecen constantes [13].

Postulado 1.

Decimos que un sistema físico aislado está definido en un espacio vectorial complejo con producto interno, denominado espacio de Hilbert, el cual denotaremos como $\mathcal{H}$. De esta forma, cualquier estado cuántico que describe al sistema es un vector de norma 1 en dicho espacio vectorial.

Supongamos que $dim\,(\mathcal{H}) = N$, con N finito y sea$\{|v_n\rangle\}_{n=0:N-1}$ una base ortonormal del espacio, entonces cualquier estado puro a tiempo t queda definido por

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)\,|v_n\rangle\,, \tag{2.1.1}$$

donde los coeficientes $a_n \in \mathbb{C}$, y verifican la condición de normalización, i.e.:$\sum_n |a_n(t)|^2 = 1$.

Postulado 2.

Sea $\mathbb{H}$ el operador Hamiltoniano del sistema, la evolución del estado cuántico para un sistema aislado viene dada por la ecuación de Schrödinger:

$$\imath\hbar\frac{\partial\,|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \mathbb{H}\,|\psi(t)\rangle\,. \tag{2.1.2}$$

La ecuación anterior describe la evolución de tiempo continuo del sistema. En el caso en que $\mathbb{H}$ es constante en el tiempo (sistema aislado), la ecuación de Schrödinger puede resolverse para $|\psi(t)\rangle$ obteniéndose

$$|\psi(t_2)\rangle = \exp\left(-\imath\mathbb{H}(t_2 - t_1)/\hbar\right)|\psi(t_1)\rangle\,, \tag{2.1.3}$$

donde podemos definir el operador evolución $U(t_1, t_2)$ dado por

$$U(t_1, t_2) \equiv \exp(-\imath\mathbb{H}(t_2 - t_1)/\hbar), \tag{2.1.4}$$

y así

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_1, t_2)\,|\psi(t_1)\rangle\,. \tag{2.1.5}$$

Dado que $\mathbb{H}$ es hermítico (como veremos), es fácil ver que el operador U definido es unitario, y por lo tanto podemos concluir que todo sistema cuántico aislado evoluciona de forma unitaria. Esto implica que la norma del vector de estado se conserva en el tiempo lo cual, como veremos más adelante, corresponde a la conservación de la probabilidad.

Postulado 3.

Cualquier cantidad física tiene asociado un operador hermítico M denominado observable, que actúa sobre el espacio $\mathcal{H}$ y cuyos posibles valores vienen dados por los valores propios del operador. Dado que el Hamiltoniano está definido a partir de cantidades

físicas, este también resulta ser un operador hermítico; más aún, el mismo coincide en diversos problemas con la energía del sistema. ¿Cómo determinamos qué valor toma una cantidad física?

De forma general, las mediciones cuánticas quedan determinadas por un conjunto de operadores de medición, $\{M_m\}$ actuando en $\mathcal{H}$, donde m hace referencia a la posible medida obtenida en el proceso. Si el estado inmediatamente antes de la medición está dado por $|\psi(t)\rangle$, normalizado, la probabilidad de obtener el valor m y el estado inmediatamente posterior a la medida están dados por

$$p(m) = \left\langle \psi \left| M_m^\dagger M_m \right| \psi \right\rangle, \tag{2.1.6}$$

$$\left|\psi'(t)\right\rangle = \frac{M_m \left|\psi(t)\right\rangle}{\sqrt{\left\langle \psi \left| M_m^\dagger M_m \right| \psi \right\rangle}}. \tag{2.1.7}$$

El conjunto de operadores $\{M_m\}$ definen lo que denominamos una medida generalizada. En el caso en que queremos conocer qué valor se obtiene al medir un observable M, los operadores $\{M_m\}$ correspondientes poseen otras restricciones; dado que M es hermítico, el mismo es diagonalizable en una base ortonormal, de modo que

$$M = \sum_{m,i} m \left|m_i\right\rangle \left\langle m_i\right|, \tag{2.1.8}$$

donde podemos definir el proyector sobre el subespacio propio asociado a m, $P_m = \sum_i \left|m_i\right\rangle \left\langle m_i\right|$ con $i = 1 : g_m$ siendo g_m la degeneración del autovalor. Luego es fácil ver que P_m es hermítico y que $P_m P_{m'} = \delta_{mm'} P_m$, es decir que el conjuntos de operadores de medición definidos son proyectores ortogonales. Denominamos a este tipo de medidas, proyectivas. En este caso, la Ec.(2.1.7) adquiere la interpretación sencilla de ser el estado proyectado sobre el subespacio del valor medido del observable. Más aún, el valor esperado del observable M queda definido por

$$\langle M \rangle = \langle \psi | M | \psi \rangle, \tag{2.1.9}$$

que eligiendo adecuadamente la base del espacio puede ser escrito como

$$\langle M \rangle = tr\left(M \left|\psi\right\rangle \left\langle \psi\right|\right), \tag{2.1.10}$$

donde tr es la traza del operador. Dada que esta no depende de la base, la elección anterior no influye en el cálculo de la Ec.(2.1.10).

En el trabajo de tesis vamos a definir distintas distribuciones de probabilidad, todas ellas a partir del uso implícito de medidas proyectivas. El caso de las medidas generalizadas es particularmente útil en diversas situaciones, por ejemplo en problemas asociados a la distinguibilidad de estados [35].

Postulado 4.

El espacio de Hilbert correspondiente a un sistema compuesto, está definido por el producto tensorial de los espacios de Hilbert de las partes del sistema, i.e: $\mathcal{H} = \bigotimes_i \mathcal{H}_i$ con $\mathcal{H}_i$ el espacio vectorial de la i-ésima componente. Así, si $|\psi_i\rangle$ representa el estado en el espacio $\mathcal{H}_i$, el estado total viene dado por $|\psi\rangle = \bigotimes_i |\psi_i\rangle$.

Hasta aquí los postulados establecidos presuponen el conocimiento del estado $|\psi\rangle$ en el cual se encuentra el sistema. Un estado como el descrito, en el cual tenemos certeza de que el sistema se encuentra en dicho estado, se denomina un estado puro. En general, esta no es la situación usual; si pensamos que tenemos una máquina de hacer estados, y la configuramos para que su salida sea $|\psi\rangle$, debido al propio proceso de creación del estado (influencia del ambiente, desperfectos de la máquina) la salida del dispositivo no será siempre el estado $|\psi\rangle$ deseado; así, lo que podemos definir es un ensemble de estados $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$, donde p_i es la probabilidad clásica dada por el límite de la fracción de eventos en los cuales obtenemos el estado $|\psi_i\rangle$ cuando el número de estados construidos tiende a infinito. De esta forma, lo que tenemos es un conjunto de estados cuánticos en los cuales el sistema puede encontrarse con probabilidad clásica p_i. A continuación vamos a ver en qué forma se puede tratar esta situación, con el fin de obtener información de un sistema que no sólo es probabilístico en su descripción cuántica, sino que además no se tiene certeza de en qué estado puro se encuentra el mismo. Vamos a introducir entonces el operador o matriz densidad.

2.1.1. Estados Mezclados

Supongamos entonces que estamos trabajando con un sistema cuántico dado por el ensemble $\{p_k, |\psi_k\rangle\}$. ¿De qué forma podemos extraer información de un sistema como este?. El punto clave está en obtener los posibles valores de un observable con la probabilidad adecuada: ahora no sólo tenemos que considerar la probabilidad dada por la Ec.(2.1.6) a partir de un estado $|\psi_k\rangle$, sino que además hay que tener en cuenta la probabilidad clásica con la cual el sistema se encuentra en ese estado. Así, si tenemos un observable M con autovalores m (supongamos que son no degenerados con el fin de simplificar la notación), la probabilidad de obtener dicho valor viene dada por

$$p(m) = \sum_k p_k p(m \mid k), \tag{2.1.11}$$

donde $p(m \mid k)$ es la probabilidad de medir m dado que el sistema está en el estado $|\psi_k\rangle$, es decir

$$p(m \mid k) = \langle \psi_k | P_m | \psi_k \rangle = tr\left(P_m |\psi_k\rangle \langle \psi_k|\right). \tag{2.1.12}$$

Sustituyendo en la Ec.(2.1.11) tenemos que

$$p(m) = \sum_k p_k tr\left(P_m |\psi_k\rangle \langle \psi_k|\right) = tr\left(P_m \rho\right), \tag{2.1.13}$$

donde hemos usado la linealidad de la traza en la última igualdad y definimos

$$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|. \tag{2.1.14}$$

La Ec.(2.1.14) define el operador o matriz densidad, y describe lo que llamamos un estado mezclado o mezcla estadística si $p_k \neq 0$ para más de un valor de k. Observemos que en el caso en que $p_1 = 1$ y $p_k = 0$, $\forall k \neq 1$, entonces el ensemble está formado por un único estado, y la matriz densidad correspondiente describe un estado puro. De esta forma podemos describir tanto estados mezclados como puros mediante la matriz densidad. Más adelante veremos un criterio para establecer cuándo corresponde a un estado puro y cuándo a uno mezclado.

Habiendo obtenido el operador densidad a partir de un ensemble de estados puros, uno puede restablecer los postulados considerando la aplicación de cada uno de ellos sobre los estados que componen el ensemble. Los resultados obtenidos son tales que la acción de los mismos se da directamente sobre ρ, lo cual resulta particularmente útil cuando se desconoce el ensemble de estados que dan origen al operador densidad; como veremos más adelante y en el desarrollo de la tesis, un caso típico es cuando se trabaja con un sistema compuesto, llamémosle AB, y se desea conocer el estado de sólo una de las partes, A o B. Dado que no vamos a hacer uso explícito de la reformulación de los postulados en el desarrollo del trabajo de tesis, referimos al lector a [35] por mayor información. Así, vamos a concentrarnos en las propiedades del operador definido, en cómo definir un subestado como el antes mencionado, y en el estudio del enredo cuántico (definido más abajo) mediante el operador densidad.

2.2. Propiedades del Operador Densidad

2.2.1. Elementos del Operador Densidad

Vamos a comenzar interpretando los elementos del operador definido. Para ello, supongamos que tenemos una base normalizada del espacio de estados, $\{|u_n\rangle\}$ y veamos cómo quedan definidos en ella los elementos $\rho_{nm} = \langle u_n| \rho |u_m\rangle$. En primer lugar, los elementos diagonales están dados por

$$\rho_{nn} = \langle u_n| \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle\psi_k| |u_n\rangle = \sum_k p_k \langle u_n| \psi_k\rangle \langle\psi_k |u_n\rangle . \tag{2.2.1}$$

Si definimos $c_n^k \equiv \langle u_n |\psi_k\rangle$, entonces la ecuación anterior puede ser escrita como

$$\rho_{nn} = \sum_k p_k \left|c_n^k\right|^2 , \tag{2.2.2}$$

de forma que las entradas diagonales representan la probabilidad de encontrar al estado $|\psi_k\rangle$ en el estado $|u_n\rangle$ promediada en el ensemble. Una consecuencia de esto es que si los estados $|\psi_k\rangle$ están normalizados, entonces $\sum_n \rho_{nn} = 1$ (como veremos más adelante), propiedad que manifiesta la normalización del estado ρ.

Los elementos fuera de la diagonal por su parte, quedan definidos de forma análoga mediante

$$\rho_{nm} = \sum_k p_k c_n^k c_m^{k*}, \tag{2.2.3}$$

donde los factores $c_n^k c_m^{k*}$ cuantifican la posible interferencia entre los estados $|u_n\rangle$ y $|u_m\rangle$ en el estado $|\psi_k\rangle$. Luego, los elementos de ρ fuera de la diagonal son el promedio en el ensemble de los términos de interferencia. Cabe destacar que los mismos pueden ser nulos sin que cada uno de los $c_n^k c_m^{k*}$ sea nulo; es decir que el sistema puede tener interferencias características de los estados cuánticos, pero el promedio en el ensemble puede no presentar dichas interferencias. Así, un sistema clásico necesariamente posee elementos nulos fuera de la diagonal, mientras que si el operador densidad tiene dichos elementos nulos, no necesariamente representa un sistema clásico.

En lo que sigue vamos a caracterizar al operador densidad desligando su definición del ensemble de estados puros, dado que en muchas situaciones este se desconoce. Más aún, existen infinitos ensembles que pueden dar lugar a la misma matriz densidad, estando relacionados estos mediante operadores unitarios [35].

2.2.2. Caracterización del Operador Densidad

Dado un ensemble $\{p_k, |\psi_k\rangle\}$, con $\sum_k p_k = 1$, el operador ρ es la matriz densidad asociada al ensemble si y solo si se verifican las siguientes propiedades:

1. Traza uno: $tr(\rho) = 1$
2. Positividad: $\langle v\,|\rho v\rangle \geq 0 \;\forall\; |v\rangle \in \mathcal{H}$.

Demostración:

Supongamos primero que ρ es una matriz densidad, y probemos las propiedades de los items 1 y 2.

1. Dado $\rho = \sum_k p_k \,|\psi_k\rangle \,\langle\psi_k|$, entonces

$$tr(\rho) = \sum_k p_k tr\left(|\psi_k\rangle \,\langle\psi_k|\right) = \sum_k p_k \,\langle\psi_k|\,\psi_k\rangle = \sum_k p_k = 1. \tag{2.2.4}$$

Esta propiedad, como mencionamos previamente, refleja la normalización del estado, heredada a partir de la normalización de los estados $\{|\psi_k\rangle\}$.

2. Consideremos un estado arbitrario, $|v\rangle$, entonces

$$\langle v\,|\rho v\rangle = \sum_k p_k \,\langle v|\,\psi_k\rangle \,\langle\psi_k\,|v\rangle = \sum_k p_k \,|\langle v|\,\psi_k\rangle|^2 \geq 0, \tag{2.2.5}$$

lo cual concluye la prueba. Consideremos ahora un operador ρ que verifica las propiedades 1 y 2, y veamos que el mismo puede ser descrito mediante un ensemble de estados.

Dado que el operador es positivo, entonces es diagonalizable en una base de vectores propios, es decir que

$$\rho = \sum_k \lambda_k \,|\varphi_k\rangle \,\langle\varphi_k|\,, \tag{2.2.6}$$

con $\{\lambda_k, |\varphi_k\rangle\}$ el conjunto de valores y vectores propios del operador. Aplicando la propiedad de la traza, obtenemos que

$$\sum_k \lambda_k = 1, \tag{2.2.7}$$

de modo que encontramos que el ensemble $\{\lambda_k, |\varphi_k\rangle\}$ da lugar al operador densidad ρ.

Demostrado lo anterior, podemos caracterizar a un operador densidad como aquel que verifica las propiedades 1 y 2, quedando entonces desligado del ensemble que lo define.

2.2.3. Estados Mezclados y Puros

Como mencionamos más arriba, tanto los estados mezclados como los estados puros pueden ser representados por un operador densidad. Vamos a presentar aquí un criterio para determinar, dado ρ, si el estado correspondiente es uno u otro.

Sea ρ un operador densidad, entonces:

1. Si el estado es puro, $tr\left(\rho^2\right) = 1$
2. Si el estado es mezclado, $tr\left(\rho^2\right) < 1$.

Demostración:

1. Si el estado es puro, entonces $\rho = |\psi\rangle \langle\psi|$, de modo que

$$\rho^2 = |\psi\rangle \langle\psi| \, \psi\rangle \langle\psi| = |\psi\rangle \langle\psi| . \tag{2.2.8}$$

Luego,

$$tr\left(\rho^2\right) = tr\left(\rho\right) = 1. \tag{2.2.9}$$

2. Supongamos que el estado es mezclado, de forma tal que $\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle\psi_k|$. Dado que el operador es hermítico, existe una base ortonormal de vectores propios en la cual ρ es diagonal, i.e.:

$$\rho = \sum_k \lambda_k |\varphi_k\rangle \langle\varphi_k| , \tag{2.2.10}$$

de modo que

$$\rho^2 = \sum_k \lambda_k^2 |\varphi_k\rangle \langle\varphi_k| . \tag{2.2.11}$$

Luego, dado que $\sum_k \lambda_k = 1$, entonces

$$tr\left(\rho^2\right) = \sum_k \lambda_k^2 < 1. \tag{2.2.12}$$

Teniendo en cuenta que la traza es invariante frente a cambios de bases, concluimos que $tr\left(\rho^2\right) < 1$.

2.2.4. Operador Densidad Reducido

Supongamos que tenemos un sistema compuesto, cuyo estado está descrito por ρ_{AB}, y tenemos un observable M_A que actúa sobre el espacio de Hilbert correspondiente al sistema A. La pregunta que cabe preguntarse es, ¿de qué modo podemos definir un estado ρ_A mediante el cual, al medir el observable M_A, se obtengan los mismo resultados que al operar con el estado total ρ_{AB}?

Para contestar la pregunta, observemos en primer lugar que podemos definir un observable $\widetilde{M}_A = M_A \otimes \mathbb{I}_B$ que actúa sobre el estado ρ_{AB}, donde $\mathbb{I}_B$ es la identidad en el espacio B. Así, considerando la forma de calcular el valor esperado de un observable, nos gustaría encontrar una operación $f : \mathcal{H}_{AB} \to \mathcal{H}_A$ que defina el estado reducido del sistema, i.e. $\rho_A \equiv f(\rho_{AB})$, tal que

$$\langle M_A \rangle = tr_A \left(M_A f \left(\rho_{AB} \right) \right) = tr \left(\widetilde{M}_A \rho_{AB} \right) = \left\langle \widetilde{M}_A \right\rangle, \tag{2.2.13}$$

donde hemos utilizado la notación tr_A para el operador traza actuando sobre el espacio A y tr para el que actúa sobre el espacio compuesto. Consideremos $f\left(\rho_{AB}\right) = tr_B\left(\rho_{AB}\right)$ y veamos que cumple con la ecuación anterior. Sea $\{|a,b\rangle\}$ una base ortonormal en el espacio compuesto, donde $\{|a\rangle\}$ y $\{|b\rangle\}$ son respectivas bases en los espacio A y B. Entonces

$$\langle M_A \rangle = \sum_a \langle a| \left(M_A \sum_b \langle b| \rho_{AB} |b\rangle \right) |a\rangle = \sum_{a,b} \langle a,b| M_A \otimes \mathbb{I}_B \rho_{AB} |a,b\rangle = tr \left(\widetilde{M}_A \rho_{AB} \right)$$

y así

$$\langle M_A \rangle = \left\langle \widetilde{M}_A \right\rangle. \tag{2.2.14}$$

De esta forma probamos que $\rho_A \equiv tr_B\left(\rho_{AB}\right)$ está bien definida, dado que se pueden obtener las estadísticas correspondientes a los observables del espacio en cuestión. Más aún, podemos probar que esta función es la única que verifica la igualdad anterior. Para ello, supongamos que $f(\rho_{AB})$ es cualquiera y consideremos una base de operadores M_i sobre el espacio A con producto interno dado por $\langle X, Y \rangle = tr(XY)$. Luego podemos descomponer $f(\rho_{AB})$ en dicha base de la siguiente manera:

$$f(\rho_{AB}) = \sum_i tr_A \left(M_i f(\rho_{AB}) \right) M_i. \tag{2.2.15}$$

Haciendo uso de la Ec.(2.2.13) la cual queremos que verifique la función f, tenemos que

$$f(\rho_{AB}) = \sum_i tr\left(M_i \otimes \mathbb{I}_B \rho_{AB}\right) M_i, \tag{2.2.16}$$

y esta es precisamente la descomposición de tr_B en la base $\{M_i\}$, y por lo tanto $\rho_A \equiv tr_B\left(\rho_{AB}\right)$ queda unívocamente determinado. Cabe destacar que, aplicando el criterio para establecer si un estado es puro o mezclado se encuentra en general que $tr\left(\rho_A^2\right) < 1$, de modo que el operador reducido no puede en general escribirse como un estado puro.

2.3. Enredo

Los sistemas cuánticos presentan propiedades que son ajenas a la física clásica, como la superposición de estados, interferencia, el principio de incertidumbre y la imposibilidad de medir cualquier conjunto deseado de observables sin perturbar el estado del sistema. Todas estas características mencionadas pueden ser observadas en sistemas conformados por una única partícula. Cuando trabajamos con sistemas compuestos, cuya matemática se deriva a partir del postulado 4, encontramos otra propiedad característica de la física cuántica, el enredo (del inglés *entanglement*). El mismo ha jugado un rol fundamental en el desarrollo de la física teórica, generando fuertes controversias en cuanto a la validez de la teoría cuántica y sus consecuencias [20, 5], así como también en el ámbito tecnológico-experimental, siendo un recurso principal en una variedad de problemas vinculados a computación e información cuánticas: codificación densa [33], teleportación cuántica [8], criptografía cuántica [7], corrección de errores cuánticos [9] entre otros, y en experimentos tan relevantes para el desarrollo de la física como la detección de ondas gravitacionales [14].

Vamos a introducir la definición matemática asociada al enredo y sus consecuencias físicas en estados puros, extendiendo luego la definición para estados mezclados. Finalmente vamos a presentar una medida del enredo de un sistema, la entropía de enredo, con la cuál trabajaremos a lo largo de la tesis.

2.3.1. Estado Puro

Consideremos un sistema bipartito conformado por dos espacios $\mathcal{H}_\mathcal{A}, \mathcal{H}_\mathcal{B}$ de forma que el sistema queda definido, aplicando el postulado 4, en el espacio $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\mathcal{A} \otimes \mathcal{H}_\mathcal{B}$. Supongamos que tenemos un estado puro dado por

$$|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle \,. \tag{2.3.1}$$

Decimos que el estado puro así definido es un producto de estados y cuando este no puede ser escrito de esta forma decimos que está enredado. ¿Qué particularidad presenta físicamente un estado enredado?. Consideremos a modo de ejemplo el siguiente estado[1], correspondiente a un sistemas compuesto por dos partículas con espín 1/2:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right), \tag{2.3.2}$$

donde la notación $|\uparrow\downarrow\rangle$ es una forma abreviada de escribir $|\uparrow_A\rangle \otimes |\downarrow_B\rangle$, y $\{|\uparrow_A\rangle, |\downarrow_A\rangle\}$ y $\{|\uparrow_B\rangle, |\downarrow_B\rangle\}$ son respectivamente bases de los espacios $\mathcal{H}_\mathcal{A}$ y $\mathcal{H}_\mathcal{B}$, los cuales describen el espacio de dimensión 2 del espín de cada partícula. La Ec.(2.3.2) define un estado en el cual, a priori, no conocemos con qué espín se encuentra ninguna de las partículas, y, como puede comprobarse directamente, no puede ser escrito como producto de estados. Supongamos que medimos con qué espín se encuentra la partícula A usando las medidas proyectivas antes definidas; es decir, consideremos los proyectores $\{P_\uparrow = |\uparrow_A\rangle\langle\uparrow_A|, P_\downarrow = |\downarrow_A\rangle\langle\downarrow_A|\}$ y usando el postulado 3 calculemos cuál es el estado inmediatamente posterior a la medida y con qué probabilidad obtenemos cada estado posible. Así obtenemos que

$$p_\uparrow = 1/2, |\psi'\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle, \tag{2.3.3}$$

$$p_\downarrow = 1/2, |\psi'\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle. \tag{2.3.4}$$

con $p_{\uparrow,\downarrow}$ las probabilidades de encontrar a la partícula con espín hacia arriba o abajo respectivamente. Si luego de medir el observable sobre la primer partícula medimos el mismo observable sobre la segunda, vemos que el resultado está determinado, es decir, con probabilidad 1 encontramos a la partícula B con espín hacia abajo en el primer caso, y con espín hacia arriba en el segundo. Es decir que, dado un estado total sobre el cual a priori no teníamos ninguna información de ninguna de las partículas, y donde las mismas no interactúan y están, posiblemente, tan alejadas como se desee, al observar el estado de la primera el correspondiente estado de la segunda queda determinado, o sea, las medidas sobre uno y otro subsistema están correlacionadas. El resultado no se presenta en sistemas clásicos, en los cuales medir sobre una partícula no influye en las medidas

[1] Corresponde a uno de los estados de Bell [35], conjunto que define una base en el espacio de dos partículas con espín 1/2. Estos son también referidos como estados EPR por ser los utilizados en el artículo de Einstein, Podolsky y Rosen, en el cual afirman que la teoría cuántica era una teoría incompleta [20].

sobre otras más allá de la correlación clásica que estas puedan tener (e.g.: partículas ligadas), y así decimos que el sistema presenta correlaciones cuánticas, las cuales no pueden ser explicadas mediante probabilidades clásicas. Por otro lado, si consideramos el estado de la Ec.(2.3.1), y consideramos un proceso de medición similar al anterior, donde primero medimos un observable M_A correspondiente a la primer partícula y luego otro M_B correspondiente a la segunda, la primer medición no modifica el estado de la partícula B, con lo cual las mismas están descorrelacionadas. De forma general vamos a establecer que siempre que un estado puro de un sistema compuesto, no pueda ser escrito en alguna base como producto de estados cada uno identificado con cada subsistema, entonces el sistema posee las correlaciones cuánticas antes mencionadas, y decimos que el mismo está enredado.

2.3.2. Estado Mezclado

Consideremos ahora un estado mezclado en un espacio $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathcal{A}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{B}}$ como antes, dado por un producto de estados, i.e.:

$$\rho = \rho_A \otimes \rho_B, \tag{2.3.5}$$

con $\rho_{A,B}$ los estados mezclados de cada subsistema. Decimos que un estado como este es separable. De forma análoga a lo planteado para el estado puro de la Ec.(2.3.1), si medimos un observable $\widetilde{M}_A = M_A \otimes \mathbb{I}_B$ que actúa localmente sobre la partícula A, vemos que la medición no modifica el estado ρ_B posterior a la medida, y por lo tanto cualquier observable medido luego en B arrojará resultados descorrelacionados con los primeros. Así, definimos de forma general a un estado separable como una suma convexa de estados separables [51], dado por

$$\rho = \sum_i p_i \rho_{A,i} \otimes \rho_{B,i}, \tag{2.3.6}$$

donde $p_i > 0$, $\forall\, i$ y $\sum_i p_i = 1$. Aunque dicho estado presenta en general correlaciones al medir observables locales sobre uno y otro subsistema, dichas correlaciones pueden ser descritas en términos de p_i, y por lo tanto se consideran correlaciones clásicas. Luego, cualquier estado mezclado que no pueda ser escrito como en la Ec.(2.3.6) vamos a decir que es un estado enredado.

La capacidad de determinar, dado un estado genérico, si el mismo presenta o no enredo sigue siendo un campo activo de investigación [27], dado que no se conoce un resultado que abarque a cualquier estado mezclado en dimensión arbitraria. En el caso de es-

tados puros en un espacio bipartito, existe una herramienta (enunciada más adelante) denominada descomposición de Schmidt, y el número de Schmidt asociado, que permite distinguir de forma unívoca el enredo del sistema. Para estados mezclados por su parte, la descomposición de Schmidt no es válida, y lo más utilizado es el criterio de Peres [37] cuya efectividad para determinar si un estado es separable depende de la dimensión del espacio de Hilbert. Sin intención de profundizar aquí en estas cuestiones, las cuales no van a resultar necesarias en el desarrollo de la tesis, vamos a dar el siguiente paso en lo referente a la cuantificación del enredo; para ello vamos a introducir la entropía de Von Neumann, de la cual haremos uso en el desarrollo de la termodinámica del caminante cuántico.

2.3.3. Entropía de Von Neumann

Hasta el momento vimos las definiciones de enredo para estados puros y mezclados desde un punto de vista matemático, no obviando las consecuencias físicas asociadas a mediciones consecutivas del mismo observable en las subpartes del sistema. En lo que sigue vamos a introducir la entropía de Von Neumann, y algunas de las propiedades que esta presenta. Dado un estado cualquiera $\rho = \sum p_k \left|\psi_k\right\rangle \left\langle\psi_k\right|$, la entropía está definida por

$$S(\rho) = -tr\left(\rho \log \rho\right), \tag{2.3.7}$$

donde la traza se toma sobre el espacio en el cual está definido el operador densidad, y el logaritmo suele tomarse en base 2. Considerando el ensemble a partir del cual está definido el operador, la entropía cuantifica, de forma análoga a la entropía de Shannon para un variable aleatoria clásica, la incertidumbre que se tiene del sistema antes de medirlo, o equivalentemente, cuánta información se gana en promedio al realizar medidas sobre este [35]. Veamos algunas de las principales propiedades de S.

En primer lugar observemos que dado que ρ es un operador hermítico, existe una base de vectores propios ortonormales $\{\left|\varphi_i\right\rangle\}$ sobre la cual la matriz toma la siguiente forma,

$$\rho = \sum_i \lambda_i \left|\varphi_i\right\rangle \left\langle\varphi_i\right|, \tag{2.3.8}$$

con $\lambda_i \geq 0 \; \forall i$, y $\sum\limits_i \lambda_i = 1$ acorde a las propiedades características que vimos del operador densidad. Luego la entropía queda

$$S(\rho) = -\sum_i \lambda_i \log(\lambda_i), \tag{2.3.9}$$

expresión que coincide con la entropía de Shannon para una variable aleatoria cuyos posibles valores tienen probabilidad de aparición $p_i = \lambda_i$. Dado que S es invariante frente a transformaciones unitarias, o equivalentemente, los valores propios no dependen de la base en la cual se escribe la matriz ρ, entonces siempre podemos calcular la entropía según la Ec.(2.3.9) mediante el conocimiento del espectro de ρ. De esto podemos concluir una primer propiedad de S: $S(\rho) \geq 0$, $\forall\, \rho$, dado que $0 \leq \lambda_i \leq 1$. Más aún, podemos ver que $S(\rho)$ sólo es nulo si el estado es puro. Dicho estado podemos pensarlo como el caso límite de un ensemble formado por un único estado con probabilidad 1, i.e.: $\{p = 1, |\psi\rangle\}$; luego, sobre cualquier base ortonormal que posea a $|\psi\rangle$ como primer vector, el operador ρ sólo tiene el elemento $\rho_{1,1} \neq 0$, $\rho_{1,1} = 1$ y así $S(|\psi\rangle\langle\psi|) = 0$. Así:

- $S(\rho) \geq 0$ y $S(\rho) = 0 \Leftrightarrow \rho$ es puro.

Por otro lado si consideramos la cantidad $S(\rho\|\sigma) \equiv -tr\left(\rho \log\left(\frac{\sigma}{\rho}\right)\right)$, denominada entropía relativa y usada como medida de distinguibilidad entre estados cuánticos [35], se puede ver que la misma verifica que $S(\rho\|\sigma) \geq 0$, donde la igualdad se da para $\rho = \sigma$. Luego, tomando $\sigma = \frac{1}{d}\mathbb{I}$, con d la dimensión del espacio de Hilbert, entonces

$$S(\rho\|\sigma) = -S(\rho) + \log(d) \geq 0, \tag{2.3.10}$$

de donde podemos concluir que

- $S(\rho) \leq \log(d)$.

Los estados con la forma tomada para σ se denominan máximamente mezclados, dado que podemos pensar que los mismos provienen de un ensemble en el cual todos los estados son igualmente probables y por lo tanto el desconocimiento sobre el sistema es máximo. Una situación conocida en la cual este es el caso es el de un sistema termodinámico aislado, descrito por el ensemble microcanónico, para el cual todos los estados accesibles del sistema son equiprobables. Luego, considerando a S como una medida de enredo vemos que los estados máximamente mezclados son también máximamente enredados. De hecho, se define un estado máximamente enredado como aquel cuyo enredo no puede ser aumentado por medio de operaciones locales y comunicación clásica (LOCC por sus siglas en inglés, *local operator and classical communication*), lo cual es verificado por estados como el definido [49]. De esta forma observamos que el rango de valores tomados por S es tal que toma su mínimo valor para estados puros (o separables en el caso de

mezclas estadísticas) y su máximo valor para estados máximamente mezclados. Estas propiedades en conjunto con otras, como la monotonicidad de la entropía y convexidad (alguna de ellas prescindibles), conforman el comportamiento axiomático que se cree debe tener una función para cuantificar el enredo [28], y también son verificadas por la entropía de Von Neumann.

2.3.4. Sistema Bipartito

Estudiemos ahora el caso de un sistema bipartito, donde el estado que representa al sistema es puro, i.e., $\rho_{AB} = |\psi_{AB}\rangle \langle\psi_{AB}|$. Esto no sólo nos permite plantear la descomposición de Schmidt ya mencionada, a partir de la cual se puede establecer si existe o no enredo entre los subsistemas, sino que además es el caso con el cual vamos a trabajar en los siguientes capítulos.

2.3.4.1. Descomposición de Schmidt

Dado un estado cualquiera $|\psi_{AB}\rangle$ definido en $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, existen bases ortonormales $\{i_A\}, \{i_B\}$ en los espacios $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ tal que

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_i \lambda_i |i_A\rangle |i_B\rangle , \tag{2.3.11}$$

donde los coeficientes λ_i, denominados coeficientes de Schmidt, son no negativos y satisfacen $\sum_i \lambda_i^2 = 1$. Además llamamos número de Schmidt al número de coeficientes no nulos [35].

Teniendo en cuenta el resultado anterior, veamos de qué forma podemos cuantificar el enredo entre los subsistemas A y B. Para ello vamos a construir el operador densidad y a partir de este la entropía de enredo calculada sobre los estados reducidos, ρ_A y ρ_B. Así, considerando el estado dado por la Ec.(2.3.11), el operador densidad toma la siguiente forma:

$$\rho_{AB} = \sum_{i,j} \lambda_i \lambda_j |i_A\rangle \langle j_A| \otimes |i_B\rangle \langle j_B| , \tag{2.3.12}$$

a partir del cual los estados reducidos, $\rho_{A,B} = tr_{B,A}(\rho_{AB})$ quedan definidos por

$$\rho_A = \sum_i \lambda_i^2 |i_A\rangle \langle i_A| , \tag{2.3.13}$$

$$\rho_B = \sum_i \lambda_i^2 |i_B\rangle \langle i_B| . \tag{2.3.14}$$

Como podemos ver ambos estados poseen el mismo espectro, y por lo tanto ambos tiene la misma entropía de Von Neumann. Así, definimos el enredo del sistema a través de la entropía de la matriz densidad reducida, i.e.:

$$S = -tr_A\left(\rho_A \log(\rho_A)\right) = -tr_B\left(\rho_B \log(\rho_B)\right). \tag{2.3.15}$$

La descomposición de Schmidt permite, como ya habíamos mencionado, establecer de forma unívoca si un estado puro arbitrario de un sistema bipartito presenta o no enredo. Observemos que si el estado reducido es puro, es decir, si el número de Schmidt es 1, entonces el sistema tiene enredo nulo, mientras que si el estado reducido es una mezcla estadística (número de Schmidt mayor a 1), entonces el estado está enredado. Así, en el caso de un estado puro bipartito tenemos el siguiente resultado: sea ρ_{red} el estado reducido (ρ_A o ρ_B), entonces

$$tr(\rho_{red}^2) = 1 \iff \rho_{red}\ puro \iff |\psi_{AB}\rangle\ \ separable, \tag{2.3.16}$$

$$tr(\rho_{red}^2) < 1 \iff \rho_{red}\ mezclado \iff |\psi_{AB}\rangle\ \ enredado. \tag{2.3.17}$$

3. Caminante Aleatorio

El modelo de caminante aleatorio (CA) ha sido aplicado a una vasta gama de problemas pasando por las más diversas áreas, desde el estudio de valores accionarios en Economía [22], biodifusión en Ciencias Biológicas [52] y calificación de páginas *web* en Ciencias de la Computación [36], hasta Matemáticas, como técnica para la resolución de ecuaciones diferenciales parciales [53], y el estudio del movimiento Browniano en Física [19, 29] por citar sólo algunos ejemplos. En este capítulo vamos a introducir las principales ideas del modelo del CA enfocando nuestra atención en el caso unidimensional, dado que el mismo permite ilustrar de forma sencilla sus principales características y además, corresponde al sistema con el cual este trabajo de Tesis fue realizado.

3.1. Caminante Aleatorio Unidimensional

Supongamos que tenemos un caminante, el cual está restringido a moverse sobre una línea recta en pasos discretos; esto es, supongamos que tenemos una línea conformada por posiciones igualmente espaciadas, con l la distancia entre posiciones consecutivas; el caminante parte desde una posición arbitraria que podemos denotar como $x = 0$ sin pérdida de generalidad, quedando de esta forma definidas las restantes posiciones que puede alcanzar: $x = \{..., -2l, -l, 0, l, 2l, ...\}$. Luego realiza T[1] pasos decidiendo en forma probabilística para cada paso si se va a desplazar hacia la derecha o hacia la izquierda. Por ejemplo, podemos pensar que la decisión de cada paso está determinada por el lanzamiento de una moneda sesgada, la cual con probabilidad p da cara y con probabilidad $q = 1 - p$ da número, correspondiendo a desplazamientos del caminante hacia la derecha e izquierda respectivamente. De esta forma el proceso es estocástico, quedando definida la variable posición del caminante por T eventos aleatorios independientes. Así, si t_+ pasos fueron realizados hacia la derecha, y $t_- = T - t_+$ hacia la izquierda, la posición a la cual llega el caminante es,

$$d \equiv t_+ l - t_- l = (2t_+ - T)\, l, \tag{3.1.1}$$

[1] Podemos pensar en T como la variable "tiempo" del sistema; de esta forma decimos que el sistema es discreto en posiciones y tiempos.

pudiendo tomar la variable d valores positivos o negativos dependiendo de si se dan más pasos hacia la derecha o izquierda. Tomemos de ahora en más la cantidad $l = 1$. Observemos que con esta elección, en T pasos la posición queda restringida al intervalo $[-T, T]$ y es par si T es par e impar si T lo es, de forma que la suma $T + d$ es siempre par; esto implica, como veremos luego, que en tiempos T pares (impares) las posiciones impares (pares) no podrán ser alcanzadas por el caminante. Debido a que el proceso es estocástico, todo lo que podemos preguntarnos sobre el sistema es de índole probabilístico. Por ejemplo, podemos preguntarnos cuál es la probabilidad de encontrar al caminante en la posición d tras la realización de T pasos. Si sabemos que el caminante realizó t_+ pasos hacia la derecha, entonces, dado que cada paso es independiente de los otros, la probabilidad para una secuencia dada de pasos viene dada por,

$$p^{t_+}(1-p)^{t_-}. \tag{3.1.2}$$

Ahora bien, dado t_+ tenemos muchas secuencias distintas de pasos hacia la derecha e izquierda, las cuales, todas llevan al caminante a la posición d; el número de estas secuencias viene dado por:

$$C(T, t_+) = \frac{T!}{(T-t_+)!t_+!}, \tag{3.1.3}$$

correspondiente a todas las permutaciones de los T pasos que dan lugar a caminos distintos, cuya posición final es la misma. Dado que la probabilidad de cada secuencia viene dada por la Ec.(3.1.2) y todas ellas son independientes y mutuamente excluyentes, entonces luego de T pasos la probabilidad de realizar t_+ pasos hacia la derecha está dada por,

$$P(T, t_+) = \frac{T!}{(T-t_+)!t_+!} p^{t_+}(1-p)^{T-t_+}. \tag{3.1.4}$$

La Ec.(3.1.4) define la denominada *Distribución de Probabilidad Binomial*. Haciendo uso de la relación dada por la Ec.(3.1.1) podemos dejarla escrita en función de la posición d, obteniendo así,

$$P(T, d) = \begin{cases} \frac{T!}{(\frac{T+d}{2})!(\frac{T-d}{2})!} p^{\frac{T+d}{2}}(1-p)^{\frac{T-d}{2}}, & si\ T+d\ es\ par\ y\ |d| < T \\ 0, & si\ T+d\ es\ impar\ o\ |d| > T. \end{cases} \tag{3.1.5}$$

Vemos que la distribución de probabilidad queda definida sólo para las posiciones d

tales que $T \pm d$ es un número par en concordancia con lo mencionado a partir de la Ec.(3.1.1). Dicho comportamiento es debido a que, dado T, no existe una secuencia de pasos que permitan alcanzar las posiciones para las cuales $T \pm d$ es impar, resultando en una probabilidad nula para dichas posiciones. En lo que respecta a la normalización, tanto la Ec.(3.1.4) como la Ec.(3.1.5) nos permiten verificar que la distribución de probabilidad está correctamente normalizada; si sumamos en la primera de las ecuaciones para todos los $t_+ \in [0, T]$, vemos que dicha suma es igual a 1 haciendo uso del desarrollo del binomio de Newton,

$$(p+q)^N = \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{(N-n)!n!} p^n q^{N-n}, \tag{3.1.6}$$

y el hecho de que, en nuestro caso, $p + q = 1$. De esta forma, tenemos una distribución de probabilidad correctamente normalizada para describir al caminante unidimensional sobre una línea. En la siguiente sección, veremos el cálculo de los primeros momentos de esta distribución, la media y desviación estándar, los cuales nos serán de utilidad para comparar más adelante con los correspondientes al caminante cuántico. Como veremos, la desviación estándar en el caso cuántico requiere de menos pasos para "alcanzar"[2] una posición espacial determinada, lo cuál generó especial interés en el caminante cuántico en lo referente a su implementación en algoritmos de exploración de datos [26].

3.1.1. Media y Desviación Estándar

Como mencionamos en la sección anterior, el CA es un sistema estocástico determinado por el azar introducido en el lanzamiento de la moneda que determina hacia qué lado se traslada el caminante. Esto nos llevó naturalmente a describir el sistema mediante la distribución de probabilidad binomial, Ec.(3.1.5), la cual nos da la probabilidad de encontrar al caminante en la posición d tras realizar T pasos. Esto es, si tomamos un ensemble de caminantes todos iniciados en condiciones idénticas y dejamos que cada uno de ellos evolucione en forma independiente de los restantes, podemos definir la frecuencia relativa con la cual los caminantes llegan a la posición d tras T pasos; esta frecuencia, en el límite en que el número de caminantes en el ensemble tiende a infinito es, precisamente, $P(T, d)$. Así, uno puede preguntarse cuál es la posición más representativa del ensemble de caminantes y cuánto estos se dispersan en torno a dicha posición. Vamos a calcular

[2] En el caso cuántico el término no es preciso, ya que en este sistema no es el caminante el que se va trasladando como en el caso clásico, sino que es la función de onda determinada por la Ec. de Schrödinger la que se propaga, sólo pudiendo a partir de ella, determinar la probabilidad de encontrar al caminante en la posición de interés.

entonces, la media y desviación estándar del sistema. Para simplificar los cálculos, consideremos el caso $p = q = 1/2$ correspondiente a una moneda balanceada, no siendo esta simplificación relevante en los resultados globales obtenidos; para el caso más general se pueden ver las Refs.[32, 39, 45].

Para calcular la media, o valor esperado de la posición, hacemos uso de la Ec.(3.1.1). La misma queda determinada por

$$\overline{d} = \overline{(t_+ - t_-)\, l} = \left(\overline{t_+} - \overline{t_-}\right) \bar{l}. \tag{3.1.7}$$

Dado que $\bar{l} = l$, por ser l una distancia constante, y que $\bar{t}_+ = \bar{t}_-$ por estar trabajando con una moneda balanceada, entonces $\overline{d} = 0$. Este resultado era esperable, dado que en cada tiempo la probabilidad de dar un paso a la derecha o a la izquierda es la misma, con lo cual tras un tiempo T se dan (en promedio) tantos pasos hacia un lado como hacia el otro, determinando así que los caminantes lleguen al origen. Vale aclarar que esto no significa que todos los caminantes tengan como posición final $d = 0$, sino que hay tantos en la posición d como $-d$. Dicho esto, podemos entonces preguntarnos cómo se da esa distribución de caminantes en torno a la posición media, $d = 0$, para el caso que estamos trabajando. Calculamos entonces la desviación estándar de la siguiente manera; dado que $d = 0$, entonces $\sigma_d^2 = \overline{d^2}$. Reescribamos la Ec.(3.1.1) de la siguiente manera:

$$d = \sum_{j=1}^{T} \Delta_j, \tag{3.1.8}$$

donde Δ_j puede tomar los valores $\pm l$ según si el caminante se traslada a la derecha o izquierda. Luego,

$$\overline{d^2} = \sum_j \sum_{j'} \overline{\Delta_j \Delta_{j'}} = \sum_j \overline{\Delta_j^2} + \sum_{j' \neq j} \overline{\Delta_j \Delta_{j'}}. \tag{3.1.9}$$

Como los pasos j y j' son independientes, entonces $\overline{\Delta_j \Delta_{j'}} = \overline{\Delta}_j \overline{\Delta}_{j'} = 0$, dado que Δ_j puede tomar valores $\pm l$ con igual probabilidad, y así $\overline{\Delta}_j = 0$. Además $\overline{\Delta_j^2} = l^2$ independientemente de j, y por lo tanto la desviación estándar queda (con $l = 1$)

$$\sigma_d = \sqrt{T}. \tag{3.1.10}$$

Así, podemos considerar que, luego de T pasos podemos encontrar con una probabilidad alta, a los caminantes en el intervalo $[-\sigma_d, \sigma_d]$. Este resultado es, como ya mencionamos, relevante en problemas que requieren de la exploración de un conjunto dado de datos

(posiciones en nuestro planteo).

3.2. Procesos Markovianos.

El problema presentado en la sección anterior puede ser enmarcado dentro de la teoría de los *Procesos Markovianos*. En esta sección presentaremos al CA en este contexto, lo cual nos brindará herramientas de gran utilidad para presentar dos características del mismo: en primer lugar, la existencia y unicidad de una distribución de probabilidad límite, esto es, para $t \to \infty$, y en segundo lugar, una vez encontrada esta solución asintótica podemos preguntarnos cuáles son los tiempos característicos para los cuales el sistema, partiendo de una condición inicial dada, está tan cerca como se desee de su correspondiente límite asintótico; la respuesta está dada por el *tiempo de mezclado (mixing time*). Presentaremos estos dos aspectos para el CA en un N-Ciclo (el cual definimos más abajo), de forma de comparar en capítulos posteriores los resultados correspondientes a los sistemas cuántico y clásico. Previo a esto vamos a introducir brevemente algunos conceptos asociados a redes que nos serán de utilidad para el entendimiento de los aspectos presentados.

Una red o grafo es un conjunto discreto de nodos, o vértices (V), conectados por un conjunto de aristas o vínculos (E), que suele denotarse como $G(V, E)$. El número de nodos define el orden de la red y llamamos tamaño al número de aristas y se denotan, respectivamente, como $|V|$ y $|E|$. Las redes suelen representarse de forma gráfica por puntos y líneas tal y como se muestra en la Fig.3.1

Las mismas presentan distintas dinámicas y diversas propiedades en función de las relaciones existentes entre nodos y aristas. Decimos que la red es *regular* si todos los vértices tienen exactamente el mismo número de vínculos y llamamos *grado* a dicho número de conexiones (denotado como *deg*), e *irregular* en cualquier otro caso. Más adelante veremos otros conceptos de gran utilidad para la comprensión del tema. Para ampliar estas definiciones y otras propiedades el lector puede acudir a la Ref.[32].

Los procesos Markovianos poseen una propiedad fundamental, la cual podemos introducir a partir de los resultados que ya obtuvimos en la Sec.3.1. Recordemos la interpretación de la Ec.(3.1.3); la misma da el número de caminos distintos para los cuales en T pasos se realizan t_+ pasos hacia la derecha, definiendo así la posición final del CA. Si escribimos dicha ecuación en función de la posición final d, es fácil ver que la misma verifica la siguiente propiedad:

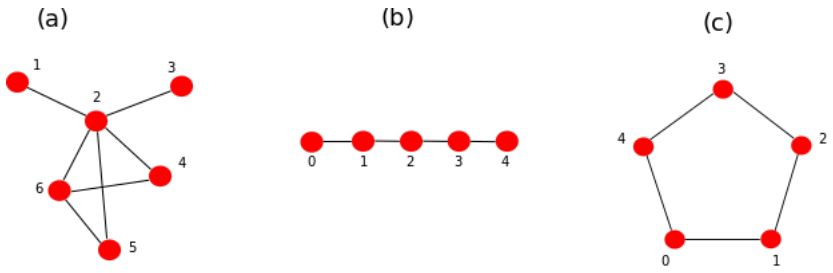

Figura 3.1.: **Representación gráfica de una red o grafo:** (a) Red irregular con $|V| = 6$ y $|E| = 7$. El grado del nodo 2 es 5, y el del nodo 5 es 2. (b) Red irregular (segmento de línea) con $|V| = 5$ y $|E| = 4$. El nodo 0 y el 4 tienen grado 1, mientras que los nodos 1,2 y 3 tienen grado 2. (c) Red regular (5-ciclo) con $|V| = 5$ y $|E| = 5$. Todos los puntos tienen el mismo grado, $deg = 2$.

$$C\left(T, \frac{T-d}{2}\right) = C\left(T-1, \frac{T-d}{2}\right) + C\left(T-1, \frac{T-d}{2}-1\right). \tag{3.2.1}$$

La relación anterior puede verificarse directamente haciendo uso de las expresiones factoriales vinculadas. Consideremos entonces la expresión para la distribución de probabilidad dada por la Ec.(3.1.5) y hagamos uso de la propiedad anterior; así tenemos lo siguiente,

$$\begin{aligned} P(T,d) = C(T, \frac{T-d}{2})p^{\frac{T+d}{2}}(1-p)^{\frac{T-d}{2}} &= C\left(T-1, \frac{T-d}{2}\right)p^{\frac{T+d}{2}-1}(1-p)^{\frac{T-d}{2}}p + \\ &+ C\left(T-1, \frac{T-d}{2}-1\right)p^{\frac{T+d}{2}}(1-p)^{\frac{T-d}{2}-1}(1-p) = \\ &= P(T-1,d-1)p + P(T-1,d+1)(1-p). \end{aligned} \tag{3.2.2}$$

La ecuación anterior nos dice que la probabilidad de alcanzar la posición d en T pasos viene dada por la probabilidad de alcanzar las posiciones vecinas ($d-1$ y $d+1$) en el tiempo anterior, multiplicadas respectivamente por las probabilidades de dar el paso a la derecha o izquierda (p y $1-p$); la misma expresa así la siguiente idea: si en T pasos el caminante alcanza la posición d es porque en $T-1$ pasos, o bien estaba en la posición $d-1$ o bien en la $d+1$, de forma tal de que en el siguiente paso puede llegar a la posición deseada. Esta situación deja en evidencia la idea de que para conocer la probabilidad de alcanzar un punto dado, sólo se necesita conocer la probabilidad de alcanzar, en un tiempo anterior, los puntos vecinos; la misma se denomina *Propiedad Markoviana*, también conocida como memoria limitada del sistema, dado que no se necesita saber

cuál fue la secuencia de puntos visitados para alcanzar la posición final, sólo se requiere de información asociada al tiempo inmediatamente anterior y a los puntos vecinos.

De forma general, decimos que un *proceso Markoviano* es un proceso estocástico que verifica la *propiedad Markoviana*, la cual podemos enunciar de la siguiente manera: dado una variable aleatoria discreta X tal que $\{X(t_0) = x_0, X(t_1) = x_1, ..., X(t-1) = x_{t-1}\}$, la probabilidad de que $X(t)$ tome el valor x_t condicionada a la secuencia de puntos $\{X(t_0) = x_0, X(t_1) = x_1, ..., X(t-1) = x_{t-1}\}$ verifica,

$$P\left(X(t) = x_t | X(t-1) = x_{t-1}, ..., X(t_0) = x_0\right) = P\left(X(t) = x_t | X(t-1) = x_{t-1}\right), \tag{3.2.3}$$

donde suponemos que los puntos x_{t-1} y x_t están conectados, o sea, la probabilidad de ir de uno a otro es mayor que cero. La Ec.(3.2.3) expresa lo antes mencionado: alcanzar un estado dado, no depende de toda la secuencia de estados que posibilita llegar al mismo, sólo del punto inmediatamente anterior en el tiempo, siendo éste vecino próximo. Por este motivo decimos que el sistema presenta una "memoria limitada".

3.2.1. Caminante Aleatorio en el N-Ciclo

Como vimos, podemos pensar al CA sobre la línea como una partícula que, de forma aleatoria, elige moverse hacia sus vecinos más cercanos. Si acotamos las posiciones definidas a un conjunto de nodos $\{0, 1, 2, ...N-1\}$, los mismos definen un segmento de recta a partir del cual podemos definir el CA sobre el N-ciclo haciendo que los puntos 0 y $N-1$ actúen como vecinos próximos, es decir, cerrando sobre sí mismo el segmento. De esta forma la dinámica de todos los puntos sobre la red tienen exactamente el mismo comportamiento: cuando el caminante está en una posición cualquiera, tiene probabilidad p de moverse en sentido horario y $q = 1 - p$ de moverse en sentido antihorario (ver Fig.3.1). La red así definida, es regular de grado 2 y posee, como veremos, distintas propiedades según la paridad del número de nodos.

Supongamos que tenemos a tiempo t_0 el vector

$$\vec{\mu}_0 = \vec{\mu}(t_0) = P_{t_0}\{X\} \equiv (P_{t_0}(0), P_{t_0}(1), ..., P_{t_0}(N-1)), \tag{3.2.4}$$

con X la variable aleatoria del sistema correspondiente a la posición del caminante definido sobre una red genérica. De esta forma las entradas del vector poseen la probabilidad de encontrar al caminante en las distintas posiciones a tiempo t_0, y por lo tanto deben verificar que $\sum_n P_{t_0}(n) = 1$. Llamaremos al vector $\vec{\mu}_t = \vec{\mu}(t)$ vector probabilidad, y lo

tomaremos como un vector fila. Para conocer cómo el mismo evoluciona en el tiempo, precisamos saber cuál es la matriz de transición del sistema, $\mathbb{M}(t)$, cuyas entradas tienen las probabilidades de transición, i.e., $\mathbb{M}_{jk}(t)$ es la probabilidad de que, estando en la posición j a tiempo t, se alcance la posición k en tiempo $t+1$. Así, tomando $t_0 = 0$ tenemos que

$$\vec{\mu}_1 = \vec{\mu}_0 \mathbb{M}(0), \tag{3.2.5}$$

o, para cada una de las entradas,

$$\mu_{1,i} = \sum_{j=1}^{N} \mu_{0,j} \mathbb{M}_{ji}(0). \tag{3.2.6}$$

De esta forma para que $\vec{\mu}_1$ sea un vector probabilidad, la matriz $\mathbb{M}(0)$ debe verificar que $\sum_{i=1}^{N} \mathbb{M}_{ji}(0) = 1$ y $\mathbb{M}_{ji}(0) > 0$, $\forall\, i, j$. En el caso en que la matriz de transición es estacionaria, i.e.: $\mathbb{M}(t) = \mathbb{M}(0)\, \forall\, t$, podemos encontrar el vector probabilidad en tiempos posteriores mediante sucesivas aplicaciones de $\mathbb{M}$ sobre la distribución de probabilidad inicial. Luego tenemos que a tiempo t, el vector probabilidad está dado por

$$\vec{\mu}_t = \vec{\mu}_0 \mathbb{M}^t. \tag{3.2.7}$$

La Ec.(3.2.7) es un mapa lineal donde la matriz de transición tiene dimensiones $N \times N$. Observemos que aunque las entradas del vector $\vec{\mu}_0$ corresponden a variables aleatorias, el vector como tal evoluciona de forma determinista mediante sucesivas aplicaciones de la matriz $\mathbb{M}$. Conociendo la matriz de transferencia, vamos a introducir otros dos conceptos asociados a redes que nos serán de utilidad para estudiar el comportamiento asintótico del sistema. Decimos que la matriz $\mathbb{M}$ es *irreducible* si para cualquier par de estados x_i y x_j de la variable aleatoria, existe un entero t tal que $\mathbb{M}^t_{ij} > 0$; es decir que cualquier par de puntos en la red están conectados para algún tiempo a través de transiciones de probabilidad. Por otro lado, definimos el período de un estado cualquiera x_i perteneciente a la red como

$$\mathcal{T}(x_i) = mcd\{t \geq 0 :\ \mathbb{M}^t_{ii} > 0\}, \tag{3.2.8}$$

con *mcd* el máximo común divisor. Para un red *irreducible,* se puede probar [32] que $\mathcal{T}(x_i) = \mathcal{T}(x_j)$, $\forall\, x_i, x_j \in V$. Así, definimos el período de una red irreducible como el período común a todos los puntos de la misma, y en ese caso decimos que la red es *periódica*, mientras que si todos los puntos de la red tienen período igual a 1, decimos

que la misma es *aperiódica*.

Dados estos conceptos, nos preguntamos qué ocurre con el sistema en el límite asintótico. Para ello investigamos en primer lugar si existe algún estado estacionario para este tipo de sistemas, y en segundo lugar cuáles son las condiciones de convergencia hacia dicho estado estacionario.

Así, partiendo de la evolución dada por la Ec.(3.2.7) nos preguntamos si existe, dada la condición inicial, una solución asintótica, i.e.: un vector probabilidad $\vec{\pi}$: $\lim_{t\to\infty} \vec{\mu}_t = \vec{\pi}$. Si el mismo existe, entonces debe cumplir que

$$\vec{\pi} = \vec{\pi}\mathbb{M}, \tag{3.2.9}$$

o sea que $\vec{\pi}$ es vector propio de $\mathbb{M}$ con valor propio $\lambda = 1$. Llamamos a dicho vector, *solución estacionaria* del sistema. Para el caso que nos concierne la matriz de transferencia está dada por[3],

$$\mathbb{M}_{ij} = \begin{cases} 1/deg(x_i) & si\ x_i \sim x_j \\ 0 & otro\ caso \end{cases}, \tag{3.2.10}$$

donde $deg(x_i)$ es el número de vecinos próximos al punto x_i, y denotamos dichos puntos como $x_i \sim x_j$ (x_i vecino próximo de x_j). Si definimos el vector $\vec{\pi}$: $\pi(x_i) = deg(x_i)$, podemos ver que el mismo es un estado estacionario:

$$\sum_j \pi_j \mathbb{M}_{ji} = \sum_{x_j \sim x_i} deg(x_j) \frac{1}{deg(x_j)} = deg(x_i). \tag{3.2.11}$$

Más aún, para que el mismo esté correctamente normalizado, definimos $\pi(x_i) = \frac{deg(x_i)}{2|E|}$, donde $|E|$ es el número de links en la red. Dado que en el caso de la línea o del N-ciclo $deg(x_i) = 2\ \forall x_i$, entonces la distribución de probabilidad estacionaria encontrada es uniforme. De esta forma encontramos al menos un estado estacionario, y se puede probar de forma general que el mismo es único para redes irreducibles. De todas formas esto no garantiza la convergencia del sistema hacia dicho estado. Para ello, se puede probar que si la cadena de Markov es irreducible y aperiódica [32], entonces existe un único estado estacionario hacia el cual el sistema converge independientemente de la condición inicial. Para el N-ciclo se verifica la condición de irreducibilidad para cualquier número de puntos, mientras que se requiere de un número impar de puntos para verificar la aperiodicidad[4]. Sabiendo de la existencia de un estado estacionario y que el sistema

[3] Esto es válido para todo *caminante aleatorio simple* sobre un grafo G(V,E).

[4] Se utiliza de forma frecuente el llamado modelo *lazy random walk* para hacer que una red periódica

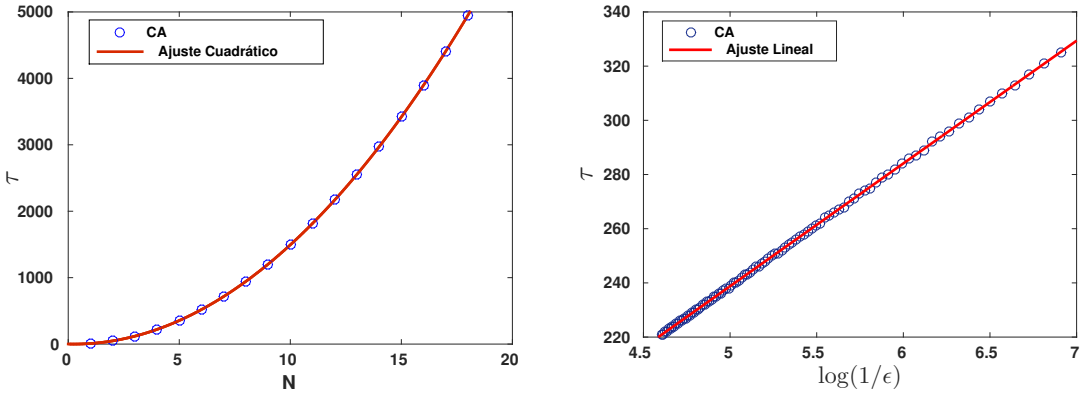

Figura 3.2.: **Tiempo de Mezclado**. Las figuras muestran el comportamiento del *tiempo de mezclado* para el CA sobre un N-ciclo (N impar). El panel izquierdo muestra la dependencia con el número de puntos del grafo (N), mientras que en el panel derecho se gráfica τ_ϵ vs. $\log(1/\epsilon)$. En color azul se representan los datos numéricos, y en rojo los correspondientes ajustes cuadrático y lineal. Los coeficientes de correlación de los ajustes son en ambos casos $R \approx 0{,}99$.

converge asintóticamente al mismo, nos va a interesar caracterizar la rapidez con que el mismo se acerca a su límite. Vamos a introducir entonces el *tiempo de mezclado* y enunciar el resultado para el caso de interés, el N-ciclo.

Definimos el *tiempo de mezclado* como el tiempo a partir del cual el estado del sistema está tan cerca como se desee del estado estacionario. Formalmente, dado $\epsilon > 0$ y $\vec{\mu}_0$, lo definimos mediante

$$\tau_\epsilon = \text{mín}\{T |\, \forall t \geq T, \vec{\mu}_0 : \|\vec{\mu}_t - \vec{\pi}\| < \epsilon\}. \tag{3.2.12}$$

En la ecuación anterior vemos que τ_ϵ depende de la precisión con que se quiere establecer que las distribuciones de probabilidad están cerca. Como medida de distancia entre las mismas es frecuente hacer uso de la norma dada por $\left\|\vec{d}_1 - \vec{d}_2\right\| = \sum_i |d_1(i) - d_2(i)|$, donde $\vec{d}_1$ y $\vec{d}_2$ son distribuciones de probabilidad definidas sobre un conjunto discreto de puntos. Bajo las mismas condiciones que aseguran la existencia y unicidad de $\vec{\pi}$, se puede acotar por arriba y por debajo al *tiempo de mezclado* lo cual conduce para el N-ciclo a: $\tau(\epsilon) = \mathcal{O}(N^2 log(1/\epsilon))$ [2].

se vuelva aperiódica, y garantizar así la unicidad de la distribución de probabilidad estacionaria. Por detalles sobre las definiciones y los teoremas pertinentes ver las Refs.[32, 45].

4. Caminante Cuántico

4.1. Introducción y Motivaciones

El caminante cuántico (CC) es la extensión del CA haciendo uso del formalismo de la Mecánica Cuántica para establecer la evolución del mismo. El mismo fue introducido en el trabajo de Y. Aharonov et al. [3], y ha sido desde entonces una importante herramienta en el desarrollo de la computación cuántica, aunque su uso no se ha limitado a dicha área siendo utilizado, por ejemplo, en el estudio de transiciones de fases [11]. La computación cuántica tuvo un gran auge a partir del trabajo de Shor [46] en el cuál se demuestra que una computadora cuántica podría, teóricamente, factorizar números semi-primos exponencialmente más rápido que cualquier computadora clásica. Luego, Grover [26] encontró un algoritmo cuántico que puede, a priori, buscar en un conjunto desordenado de elementos cuadráticamente más rápido que cualquier algoritmo clásico. La introducción del CC en la búsqueda de algoritmos cuánticos proviene del hecho de que su contrapartida clásica ha probado ser una gran herramienta en algoritmos clásicos [50, 25]; más aún, Childs [12] probó que el CC puede ser utilizado para la implementación de cualquier circuito cuántico que describa una operación unitaria, es decir, como computadora universal.

En este capítulo presentaremos las ideas básicas del CC: introducción del espín como moneda, evolución unitaria del CC, y propiedades de interés a comparar con el CA como la desviación estándar y el *tiempo de mezclado* introducidos en el capítulo anterior.

4.2. Caminante Cuántico Unidimensional

4.2.1. Espín como moneda

El caminante cuántico puede ser pensado como una partícula aislada sobre un grafo, que evoluciona de forma unitaria siguiendo la ecuación de Schrödinger. Ahora bien, requerimos de un análogo cuántico a la moneda, la cual permita establecer una correlación con los desplazamientos derecha e izquierda, esto es, midiendo el observable utilizado como moneda podremos determinar cuál será el desplazamiento del caminante. Dicho

observable es el espín de la partícula. Para el caso unidimensional, podemos pensar que el caminante es cualquier partícula con espín $s = \pm\hbar/2$ (de ahora en más tomaremos $s = \pm 1$), es decir, una partícula que posee dos estados ortogonales asociados al observable espín, los cuales denotaremos como $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ (espín hacia arriba y abajo respectivamente). Como veremos más adelante, sabiendo en cuál de estos dos estados se encuentra el espín, podremos determinar en qué sentido se dará la evolución de la función de onda. De todas formas esta no es la situación usual en mecánica cuántica; si el sistema evoluciona unitariamente entonces la función de onda estará determinada en cada instante por una superposición de estados, con lo cual la evolución va a estar dada por una función de onda que se propaga al mismo tiempo hacia la derecha y hacia la izquierda. Esto genera diferencias notorias con el análogo clásico: mientras que en éste último se da la evolución a través de la Ec.(3.2.7) de todas las posibilidades que tiene el caminante, pero sabiendo que sólo una de ellas ocurre en un experimento dado, en el caso del CC es la superposición de estados la que evoluciona, es decir, es el vector formado por las amplitudes de probabilidad, y no es hasta que se mide la posición de la partícula que se conoce su ubicación. Más aún, el fenómeno de interferencia generado por la evolución conjunta de los estados superpuestos es una marca típica de los sistemas cuánticos, y será responsable de comportamientos característicos del CC.

4.2.2. Operador Evolución

Ya sabemos que el espín tiene el rol que poseía la moneda en el CA, y que el sistema evoluciona de forma unitaria si se encuentra aislado. De esta forma, el caminante está definido en el espacio de Hilbert determinado por las posiciones de la red pero con un espacio de Hilbert auxiliar: el definido por el espín. Así, llamemos $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_e$ al espacio de Hilbert del sistema, el cuál está determinado por el producto tensorial de los espacios de las posiciones y del espín. Luego, un estado genérico que describa el sistema estará dado por:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} \left(a_n |\uparrow\rangle + b_n |\downarrow\rangle\right) |n\rangle \,, \tag{4.2.1}$$

donde N[1] es el número de vértices sobre la red, y hemos establecido una biyección entre los conjuntos formados por los nodos y por los elementos de la base del espacio $\mathcal{H}_x$. Dado un estado como el de la Ec.(4.2.1), queremos encontrar el operador unitario U,

[1] En el caso en que la red tenga infinitos vértices (e.g., la línea), n toma valores enteros en el intervalo $(-\infty, +\infty)$.

que determine, en aplicaciones sucesivas del mismo, la evolución del sistema. Para ello, tomemos el siguiente operador [47]:

$$U = \exp(-\imath p \sigma_z) \left(H \otimes \mathbb{I}_x\right), \tag{4.2.2}$$

y veamos cómo el mismo actúa sobre los estados de la base $|\uparrow\rangle |n\rangle$ y $|\downarrow\rangle |n\rangle$. En la Ec.(4.2.2) p es el operador momento y actúa sobre el espacio de las posiciones como $-\imath \frac{d}{dx}$ e $\mathbb{I}_x$ es la identidad en dicho espacio, mientras que σ_z y H actúan sobre el espacio del espín y son respectivamente las matrices de Pauli y de Hadamard; en la base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ las mismas tiene la siguiente representación:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{4.2.3}$$

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \tag{4.2.4}$$

En primer lugar observemos que el operador definido es efectivamente unitario. Para ello basta saber que los operadores involucrados son hermíticos y que $H^2 = \mathbb{I}_e$, con $\mathbb{I}_e$ la identidad en el espacio del espín. Luego,

$$UU^\dagger = \exp(-\imath p \sigma_z) \left(H \otimes \mathbb{I}_x\right) \exp(\imath p \sigma_z) \left(H \otimes \mathbb{I}_x\right) = \mathbb{I}. \tag{4.2.5}$$

Veamos ahora cuál es la acción de $H \otimes \mathbb{I}_x$ y el motivo para introducir el operador de Hadamard, y finalmente cómo actúa el operador exponencial, el cual vamos a denominar operador traslación. Tomemos la acción sobre el estado $|\uparrow\rangle |n\rangle$, siendo el procedimiento sobre $|\downarrow\rangle |n\rangle$ análogo. La identidad en el espacio $\mathcal{H}_x$ actúa sin efectos sobre $|n\rangle$, mientras que,

$$H |\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

es decir que,

$$H |\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle\right), \tag{4.2.6}$$

y de forma análoga podemos ver que,

$$H |\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle\right). \tag{4.2.7}$$

O sea que H actúa sobre la base de $\mathcal{H}_e$ llevándolos a una superposición equiprobable de los mismos. De esta forma, si tras la aplicación de la matriz de Hadamard medimos sobre la base en qué estado se encuentra el espín, lo encontramos con igual probabilidad, 1/2, en cualquiera de los dos estados. Si tenemos en mente (como veremos a continuación) que tener espín para arriba implica desplazarse hacia la izquierda y espín hacia abajo implica desplazamientos hacia la derecha, entonces la acción de H seguida de una medición sobre la base de vectores propios del operador σ_z, es equivalente a la acción de una moneda sin sesgo[2], tras la cual, obtenemos de forma equiprobable uno u otro estado (asumiendo que partimos de un estado localizado con espín sobre uno de lo estados propios de σ_z). Veamos a continuación cómo actúa el operador traslación sobre el estado $|\uparrow\rangle |n\rangle$.

Vamos a desarrollar la matriz exponencial, y tengamos en mente que $\sigma_z^2 = \mathbb{I}_e$, con lo cuál: $\sigma_z^{2k} = \mathbb{I}_e$ y $\sigma_z^{2k-1} = \sigma_z \; \forall \, k \in \mathbb{N}$. Así:

$$\exp(-ip\sigma_z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ip\sigma_z)^n}{n!} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{(-\imath p)^{2k} \otimes \mathbb{I}_e}{(2k)!} + \frac{(-\imath p)^{2k-1} \otimes \sigma_z}{(2k-1)!} \right]. \tag{4.2.8}$$

Dado que $p = -\imath \frac{d}{dx}$ y que $\sigma_z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$ (los estados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ son vectores propios de σ_z asociados a los posibles valores del espín, $s = \pm 1$), entonces obtenemos lo siguiente:

$$\exp(-\imath p\sigma_z) |\uparrow\rangle |n\rangle = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-d/dx)^n}{n!} \right) |\uparrow\rangle |n\rangle \, . \tag{4.2.9}$$

Si hacemos un desarrollo en serie de potencias de un estado $|n - \Delta n\rangle$ en torno a $|n\rangle$ y tomamos $\Delta n = 1$, se puede ver que la serie de potencias de dicho desarrollo es exactamente la de la Ec.(4.2.9) actuando sobre el estado $|n\rangle$, con lo cuál podemos concluir que

$$\exp(-\imath p\sigma_z) |\uparrow\rangle |n\rangle = |\uparrow\rangle |n-1\rangle \, , \tag{4.2.10}$$

y de forma análoga,

$$\exp(-\imath p\sigma_z) |\downarrow\rangle |n\rangle = |\downarrow\rangle |n+1\rangle \, . \tag{4.2.11}$$

Observamos entonces que la acción del operador es tal que, si sobre un estado posición dado sabemos cuál es el estado del espín, conocemos con certeza cuál será la posición en el

[2] De forma general se utiliza un operador $C(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{pmatrix}$, denominado operador moneda, donde $\theta \in [0, \pi/2]$ define el sesgo de la moneda.

siguiente paso. De todas formas insistimos en que, en el caso general, el estado del espín es una superposición de los estados ortogonales en su correspondiente espacio, con lo cuál el sistema evoluciona de forma simultánea en ambos sentidos. No es hasta que medimos en la base del espacio que conocemos la posición efectiva de nuestra partícula. Una observación interesante es que podemos recuperar, a partir de este formalismo, el correspondiente al CA; si partimos de un estado localizado con espín sobre uno de los estados $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, aplicamos H y medimos sobre dicha base, encontramos con igual probabilidad al espín hacia arriba o abajo, y por lo tanto con igual probabilidad el caminante se desplaza hacia la izquierda o derecha respectivamente. Aplicando en forma reiterada el procedimiento en cada paso, encontramos la distribución de probabilidad para el CA sin sesgo. En el caso general en el cual el espín está inicialmente en una superposición de estados, reiterando el procedimiento se obtiene la distribución sesgada del CA, donde las probabilidades p y $q = 1 - p$ están determinadas por el operador H y los coeficientes que definen la superposición inicial del estado del espín.

4.2.3. Mapa del Caminante Cuántico Unidimensional

Supongamos que a tiempo t, y habiendo permitido que el sistema evolucione de forma unitaria (aplicación sucesiva del operador U t veces), el mismo se encuentra descrito por un estado como el dado en la Ec.(4.2.1); tomemos $N = \infty$ de forma tal de describir al CC sobre la línea. Así, tras una nueva aplicación del operador unitario, el estado a tiempo $t+1$ tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
|\psi(t+1)\rangle &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} U\left[a_n(t)\,|\uparrow\rangle + b_n(t)\,|\downarrow\rangle\right]|n\rangle = \\
&= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-\imath p\sigma_z)\left[\left(\frac{a_n(t)+b_n(t)}{\sqrt{2}}\right)|\uparrow\rangle + \left(\frac{a_n(t)-b_n(t)}{\sqrt{2}}\right)|\downarrow\rangle\right]|n\rangle = \\
&= \sum_{n=-\infty}^{\infty}\left[\left(\frac{a_n(t)+b_n(t)}{\sqrt{2}}\right)|\uparrow\rangle\,|n-1\rangle + \left(\frac{a_n(t)-b_n(t)}{\sqrt{2}}\right)|\downarrow\rangle\,|n+1\rangle\right]. \quad (4.2.12)
\end{aligned}$$

Redefiniendo el índice de la suma, tenemos que

$$|\psi(t+1)\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\left[\left(\frac{a_{n+1}(t)+b_{n+1}(t)}{\sqrt{2}}\right)|\uparrow\rangle + \left(\frac{a_{n-1}(t)-b_{n-1}(t)}{\sqrt{2}}\right)|\downarrow\rangle\right]|n\rangle\,, \quad (4.2.13)$$

de forma tal que obtenemos el siguiente mapa, el cual nos da la evolución del sistema

para todo tiempo[3]:

$$a_n(t+1) = \frac{a_{n+1}(t) + b_{n+1}(t)}{\sqrt{2}}, \tag{4.2.14}$$

$$b_n(t+1) = \frac{a_{n-1}(t) - b_{n-1}(t)}{\sqrt{2}}. \tag{4.2.15}$$

El mismo es un sistema de ecuaciones recurrentes que puede resolverse conociendo las condiciones iniciales del sistema, i.e., el conjunto de coeficientes $\{a_n(t=0), b_n(t=0)\}, \forall n$ los cuales determinan la distribución de probabilidad inicial del CC. Debido a su simplicidad, este sistema es particularmente útil para resolver numéricamente la evolución del CC. A continuación veremos cómo describir de forma genérica el estado inicial de una partícula localizada, lo cuál nos permitirá aplicar la Ecs.(4.2.14,4.2.15) para buscar distintos comportamientos y características del sistema.

4.2.4. Condiciones Iniciales: partícula localizada

Supongamos que tenemos a tiempo $t = 0$ una partícula localizada en un punto cualquiera, el cual podemos tomar como el origen de las posiciones, $|n = 0\rangle$. Así, el estado inicial está definido por:

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} a_n(0) \\ b_n(0) \end{bmatrix} |n\rangle \, \delta_{n,0}, \tag{4.2.16}$$

con $|a_0(0)|^2 + |b_0(0)|^2 = 1$, indicando que la probabilidad de encontrar a la partícula en la posición $|0\rangle$ independientemente del estado del espín es 1. Ahora bien, en lo que refiere al estado del espín, la partícula puede encontrarse en cualquier superposición de los estados $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ sujeta a la condición anterior, donde los coeficientes $a_0(0)$ y $b_0(0)$ son, a priori, números complejos. Así, el estado del espín podemos escribirlo de la siguiente manera:

$$|\psi_e\rangle = |a_0| \exp(\imath\phi_a) |\uparrow\rangle + |b_0| \exp(\imath\phi_b) |\downarrow\rangle . \tag{4.2.17}$$

Dado que el estado es invariante frente a la multiplicación por una fase global, i.e. las cantidades medibles $|a_0|^2$ y $|b_0|^2$ quedan incambiadas frente a dicha multiplicación,

[3] En general, el mapa depende del sesgo de la moneda utilizada (θ) y toma la siguiente forma:

$$a_n(t+1) = a_{n+1}(t)\cos(\theta) + b_{n+1}(t)\sin(\theta)$$
$$b_n(t+1) = a_{n-1}(t)\sin(\theta) - b_{n-1}(t)\cos(\theta).$$

entonces podemos elegir el coeficiente $a_0 \in \mathbb{R}$ y definir un ángulo $\varphi = \phi_b - \phi_a$ de forma tal que el estado queda,

$$|\psi_e\rangle = |a_0|\,|\uparrow\rangle + |b_0|\exp(\imath\varphi)\,|\downarrow\rangle\,, \tag{4.2.18}$$

donde hemos omitido el factor $\exp(-\imath\phi_a)$ del lado izquierdo de la ecuación, precisamente por ser dicho factor irrelevante en la descripción del estado. Luego, si aplicamos la condición de normalización, tenemos que $|a_0|^2 + |x_b + \imath y_b|^2 = 1$, con $x_b = \Re\{b_0\}$ y $y_b = \Im\{b_0\}$. Observemos que la condición de normalización es entonces equivalente a la de un vector de norma 1 definido sobre una esfera, i.e. $|a_0|^2 + |x_b|^2 + |y_b|^2 = 1$, con lo cual podemos escribir los coeficientes a_0 y b_0 en coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned} a_0 &= \cos(\gamma'), \\ x_b &= \sin(\gamma')\cos(\varphi), \\ y_b &= \sin(\gamma')\sin(\varphi), \end{aligned} \tag{4.2.19}$$

donde γ' y φ son la colatitud y azimuth respectivamente, obteniendo así, el siguiente estado:

$$|\psi_e\rangle = \cos(\gamma')\,|\uparrow\rangle + \sin(\gamma')\exp(\imath\varphi)\,|\downarrow\rangle\,. \tag{4.2.20}$$

Observemos que si podemos definir los estados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$, entonces podemos escribir cualquier estado como combinación lineal de estos; el estado $|\uparrow\rangle$ se obtiene al tomar las coordenadas $(\gamma' = 0, \varphi)$, mientras que el estado $|\downarrow\rangle$ posee coordenadas $(\gamma' = \pi/2, \varphi = 0)$. Así, todos los estados que quedan definidos para $\gamma' > \pi/2$ son los mismos estados definidos para $\gamma' < \pi/2$ a menos de una fase global irrelevante (estados idénticos frente al cambio de coordenadas $(\gamma, \varphi) \to (\pi - \gamma, \varphi + \pi)$). Luego, basta con definir $\gamma' = \gamma/2$ para obtener todos los estados en el espacio de Hilbert de dimensión 2, correspondiendo así para cada punto un único estado dado por:

$$|\psi_e\rangle = \cos(\gamma/2)\,|\uparrow\rangle + \sin(\gamma/2)\exp(\imath\varphi)\,|\downarrow\rangle\,, \tag{4.2.21}$$

donde $\gamma \in [0, \pi]$ y $\varphi \in [0, 2\pi]$. La Ec. (4.2.21) da lugar a una representación gráfica denominada *Esfera de Bloch*, en la cual los ángulos γ y φ definen la orientación del estado $|\psi_e\rangle$ sobre la esfera (Fig.4.1). La construcción es tal que, los estados ortonormales son opuestos sobre la esfera, e.g., los estados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$; más aún, el estado definido por la Ec.(4.2.21) y su opuesto sobre la esfera corresponden a los vectores propios de la matriz

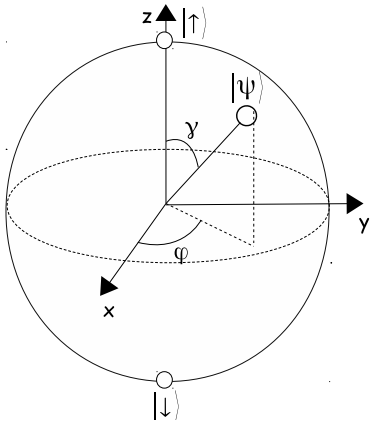

Figura 4.1.: **Esfera de Bloch**. Representación gráfica de un estado puro de un sistema cuántico definido por dos estados ortogonales. Los ángulos (γ, φ) definen la dirección del estado $|\psi\rangle$ sobre la superficie de la esfera. El estado $|\uparrow\rangle$ está definido por el par $(0, \varphi)$ mientras que $|\downarrow\rangle$ está dado por (π, φ). Cualquier par de estados ortonormales son opuestos sobre la esfera de Bloch.

de Pauli en la dirección definida por los ángulos (γ, φ), siendo dichos vectores propios, ortonormales.

4.2.5. Diagonalización del Operador Evolución U

En la Sec.(4.2.3) vimos una forma particular de encontrar el estado del sistema para cualquier tiempo conociendo las condiciones iniciales del caminante, por ejemplo, las descritas en la sección anterior. Esta forma, la cual hace uso uso del mapa dado por las Ecs.(4.2.14,4.2.15) es particularmente útil para la resolución numérica del problema, debido a la sencillez con la cual puede ser llevada a código de programación en diversos lenguajes. Aquí veremos brevemente un método de resolución que nos permite, en algunas situaciones (e.g.: redes finitas), atacar el problema desde un punto de vista analítico: la diagonalización del operador evolución.

Como vimos en la Sec.(4.2.3), el estado del sistema a tiempo t, puede ser obtenido tras la aplicación t veces del operador evolución,

$$|\psi(t)\rangle = U^t |\psi(0)\rangle \,, \tag{4.2.22}$$

con $|\psi(0)\rangle$ la condición inicial del caminante. En general resulta difícil la evaluación analítica de U^t, pero si somos capaces de encontrar una base de vectores propios $\left(\{|\phi_k\rangle\}_{k\in X\subseteq\mathbb{N}}\right)$ sobre la cual el operador sea diagonal, y sus correspondientes valores propios $\left(\{\lambda_k\}_{k\in X\subseteq\mathbb{N}}\right)$

entonces,

$$U^t = \sum_k \lambda_k^t \left|\phi_k\right\rangle \left\langle\phi_k\right| , \tag{4.2.23}$$

dado que cualquier función aplicada a un operador diagonal actúa directamente sobre sus elementos diagonales. Así, basta con descomponer el estado inicial del sistema en la base de vectores propios encontrada para evaluar rápidamente cuál es el estado en cualquier tiempo. Para el caso del caminante, el sistema es invariante frente a traslaciones espaciales (podemos elegir el origen del mismo de forma arbitraria sin perdida de generalidad) con lo cual la parte espacial del operador U (el operador traslación) es diagonalizable mediante una transformada de Fourier discreta [38]; la parte correspondiente al espín, por su lado, puede obtenerse trazando el operador U sobre las coordenadas espaciales, y así hallar los vectores propios que la diagonalizan. De esta forma los vectores propios en el espacio $\mathcal{H}$ corresponden al producto tensorial de los vectores propios de $\mathcal{H}_x$ con los de $\mathcal{H}_e$. Los cálculos correspondientes a la diagonalización para el caso del CC sobre la línea se desarrollan detalladamente en el Apéndice A. En el Cap.6 vamos a mostrar una forma equivalente de diagonalización en el caso trabajado del CC en el N-ciclo. De todas formas presentamos aquí la idea dado que vamos a hacer uso en la próxima sección de los valores y vectores propios, $\{\lambda_k, \left|\phi_k\right\rangle\}_{k\in X\subseteq\mathbb{N}}$, quedando los planteos realizados sujetos a la existencia de los mismos.

4.2.6. Distribución de Probabilidad del CC Sobre la Línea

Como mencionamos al final de la Sec.(4.2.2), el CC es tal que el estado inicial del mismo evoluciona de forma determinista, mientras que el correspondiente estado inicial del CA lo hace aleatoriamente. De todas formas, el carácter probabilístico de los sistemas cuánticos está en la raíz de su formulación y experimentación, quedando determinado el mismo por las amplitudes de probabilidad de la función de onda. Así, si tenemos a tiempo t un estado dado por

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \sum_n \left[a_n(t)\left|\uparrow\right\rangle + b_n(t)\left|\downarrow\right\rangle\right]\left|n\right\rangle , \tag{4.2.24}$$

podemos definir diversas distribuciones de probabilidad siguiendo los postulados de la Mecánica Cuántica. Por ejemplo, las respectivas probabilidades de encontrar el caminante en una posición dada y con espín hacia arriba o hacia abajo, quedan definidas por:

$$P_n^{\uparrow}(t) = \left|\langle n\uparrow\left|\psi(t)\right\rangle\right|^2 = \left|a_n(t)\right|^2 , \tag{4.2.25}$$

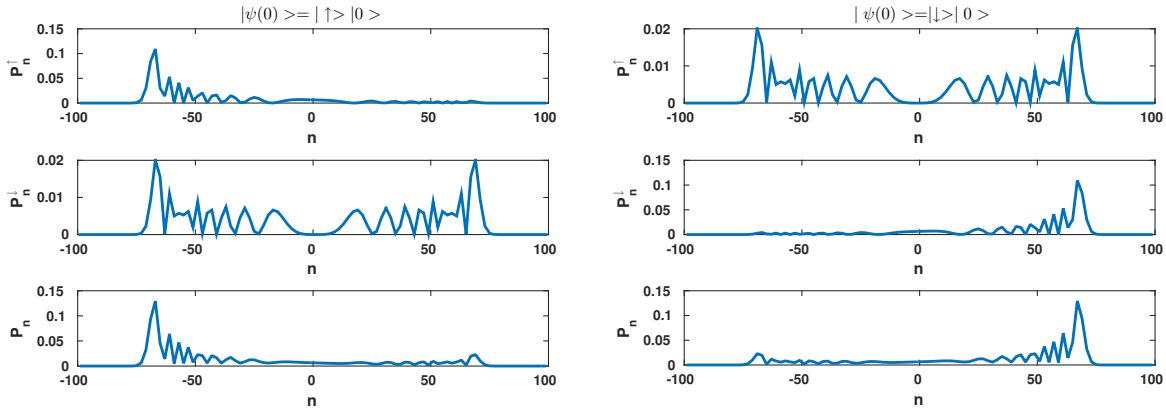

Figura 4.2.: **Distribución de Probabilidad I**. En los paneles del lado izquierdo (caso (a)) se grafican las distribuciones de probabilidad $P_n^{\uparrow}, P_n^{\downarrow}$ y P_n a tiempo $t = 100$ cuando el estado inicial del sistema está dado por $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle\,|0\rangle$, y los paneles del lado derecho (caso (b)) muestran las mismas distribuciones para $|\psi(0)\rangle = |\downarrow\rangle\,|0\rangle$ (en ambos casos se excluyen los valores sobre las posiciones impares dado que son nulos). Cabe destacar la simetría encontrada entre ambos casos, la cual se explica debido a que la elección de la correlación existente entre el estado del espín y el desplazamiento es arbitrario, estando determinado por la elección del operador traslación en la Ec.(4.2.2). En el caso (a) la distribución está fuertemente sesgada hacia las posiciones negativas, mientras que en el caso (b) el sesgo es hacia las posiciones positivas.

$$P_n^{\downarrow}(t) = |\langle n\downarrow|\psi(t)\rangle|^2 = |b_n(t)|^2\,, \tag{4.2.26}$$

donde $\langle n\uparrow| = \langle n|\,\langle\uparrow|$ y análogamente $\langle n\downarrow| = \langle n|\,\langle\downarrow|$. A partir de las anteriores, podemos obtener la distribución de probabilidad espacial independiente del estado del espín sumando las contribuciones de ambas, es decir:

$$P_n(t) = |a_n(t)|^2 + |b_n(t)|^2\,. \tag{4.2.27}$$

La Fig.4.2 muestra las distribuciones correspondientes a las Ecs.(4.2.25-4.2.27) para dos condiciones iniciales distintas donde la evolución está dada, en ambos casos, por el uso de una moneda sin sesgo. Como podemos observar, las dos distribuciones son diferentes, siendo una la simétrica de la otra. Esto es coherente con lo mencionado previamente de que espín hacia arriba (abajo) corresponde a desplazamientos hacia la izquierda (derecha), y puede entenderse probabilísticamente analizando las interferencias que se dan, las cuales definen las amplitudes $a_n(t)$ y $b_n(t)$. Recordemos que la correlación establecida

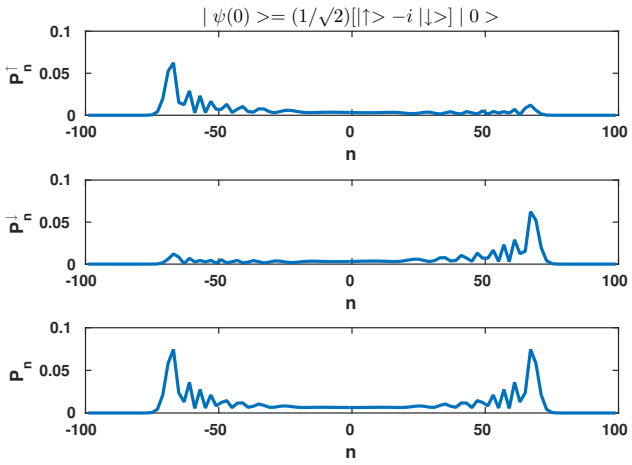

Figura 4.3.: **Distribución de probabilidad II**. Gráficas de las distribuciones $P_n^{\uparrow}, P_n^{\downarrow}$ y P_n a tiempo $t = 100$ para un estado inicial $|\psi(0)\rangle = 1/\sqrt{2}\,[|\uparrow\rangle - \imath\,|\downarrow\rangle]\,|0\rangle$. La distribución espacial (panel inferior) es simétrica para este caso, producto del factor $\imath$ introducido en el estado inicial, el cuál evita la interferencia destructiva encontrada en los casos (a) y (b) de la Fig.4.2. Por este motivo, el estado inicial empleado suele denominarse estado simétrico.

entre el estado del espín y el sentido en que se desplaza la función de onda es determinado por un proceso de medición sobre $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, con lo cual es de esperarse que $|a_n|^2$ sea predominante frente a $|b_n|^2$ en el caso (a) y vice versa en el caso (b). Analicemos el caso (a) para el cual $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle\,|0\rangle$, siendo el correspondiente a $|\psi(0)\rangle = |\downarrow\rangle\,|0\rangle$ análogo. Al aplicar el operador U, obtenemos:

$$|\psi(1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow\rangle\,|1\rangle + |\downarrow\rangle\,|-1\rangle\right], \tag{4.2.28}$$

donde la superposición es producto de la acción del operador H. Ahora bien, al realizar el siguiente paso, vimos en las Ecs.(4.2.6,4.2.7) que H da en ambos casos superposiciones equiprobables de los estados, pero introduce un signo negativo al actuar sobre el estado $|\downarrow\rangle$, mientras que no lo hace al actuar sobre $|\uparrow\rangle$. Dicho signo genera que existan cancelaciones de los términos que contribuyen al estado $|\downarrow\rangle$ mientras que los correspondientes a $|\uparrow\rangle$ siempre contribuyen positivamente; este fenómeno de interferencia constructiva sobre los estados con espín hacia arriba y destructiva sobre estados con espín hacia abajo es el responsable de la prevalecencia del coeficiente a_n frente al b_n. El caso (b) es completamente análogo. En lo que respecta al panel medio del caso (a) (superior del caso (b)), puede verse que las distribución $P_n^{\downarrow}$ $\left(P_n^{\uparrow}\right)$ es simétrica con respecto a las posición $|1\rangle$

($|-1\rangle$). Esto puede puede verificarse de forma rápida escribiendo la evolución del estado $|\psi(1)\rangle$ en la Ec.(4.2.28) para los siguientes tiempos, tal y como hicimos previamente. Vemos también que la escala de valores que toma esta distribución es al menos un orden menor con respecto a $P_n^{\uparrow}$ ($P_n^{\downarrow}$); de esta forma, la distribución independiente del espín está fundamentalmente determinada por la correspondiente al espín que define el estado inicial del sistema. La Fig.4.3 muestra las mismas distribuciones para un estado inicial simétrico. En este caso, la unidad imaginaria introducida en el estado inicial es la responsable de evitar las cancelaciones de términos antes mencionada, produciendo que en cada paso los módulos de $a_n(t)$ y $b_{-n}(t)$ sean iguales para todas las posiciones n sobre la red [30, 38].

Este análisis nos permite extraer algunas conclusiones relevantes; por un lado, vemos cómo el fenómeno de interferencia, característico de los sistemas cuánticos, aparece en el sistema, y más aún, cómo el mismo genera un comportamiento bien distinto al caso del CA; en este último se llegaba, bajo ciertas restricciones sobre la red, a un estado asintótico independiente del estado inicial del sistema, mientras que observamos que el CC tiene un comportamiento fuertemente dependiente de la condición inicial. De hecho, ni siquiera existe en general un estado asintótico para el CC, tal y como veremos más adelante [2, 34]. Previo a eso, vamos a analizar la evolución de la función de onda pensando en la misma como un paquete de ondas, la cuál propaga la información a una cierta velocidad de grupo. Este análisis nos va a permitir entender mejor el comportamiento de la distribución de probabilidad mostrada, por ejemplo, en la Fig.4.3.

4.2.6.1. Velocidades de Fase y de Grupo

En el Apéndice A se detalla el procedimiento para diagonalizar el operador evolución U del CC sobre la línea. Este análisis nos permite encontrar el espectro de energías del sistema, y a partir del mismo obtener las velocidades características de este. Recordemos que para un paso temporal, el operador evolución está relacionado con el Hamiltoniano $\mathbb{H}$ del sistema mediante $U = \exp(-\imath\mathbb{H})$ ($\hbar = 1$); así, conociendo la forma diagonal de U y aplicando logaritmo sobre la misma obtenemos el espectro de energías del sistema. En el Apéndice A calculamos los valores propios de U, los cuales están dados, para cada longitud de onda, por:

$$\lambda_k = \begin{cases} \exp(\imath\omega_k) \\ \exp(-\imath(\omega_k + \pi)) \end{cases}, \tag{4.2.29}$$

con $k \in [-\pi, \pi]$, y por lo tanto concluimos que las energías correspondientes son

$$E_k = \begin{cases} -\omega_k \\ \omega_k + \pi \end{cases}, \tag{4.2.30}$$

donde ω_k queda definida por la relación de dispersión, $\sin(\omega_k) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin(k)$ (ver Apéndice A). A partir de la Ec.(4.2.30) definimos entonces las velocidades de fase y grupo dadas respectivamente por $v_f = E_k/k$ y $v_g = \frac{dE_k}{dk}$. Haciendo uso de la relación de dispersión, las mismas toman entonces las siguientes expresiones,

$$v_f^- = -\frac{1}{k}\arcsin\left(\frac{\sin k}{\sqrt{2}}\right), \tag{4.2.31}$$

$$v_f^+ = v_f^- + \pi/k, \tag{4.2.32}$$

correspondientes a los vectores propios del operador $\widetilde{H}_k$ (ver Apéndice A), y

$$v_g^{\pm} = \frac{\pm\cos(k)}{\sqrt{1+\cos^2(k)}}. \tag{4.2.33}$$

Observemos que $\left|v_g^{\pm}\right| \leq 1/\sqrt{2} \equiv v_{g,max}$, definida para los valores $k = 0$ y $\pm\pi$. Si observamos la distribución de probabilidad mostrada en el panel inferior de la Fig.4.3, vemos que los picos de la misma están ubicados precisamente sobre las posiciones $\frac{\pm t}{\sqrt{2}}$ (en el caso mostrado $t = 100$) correspondientes entonces, a la máxima propagación con la cual el sistema puede transmitir información. Más aún se puede ver que la distribución está básicamente definida en el intervalo $[-t/\sqrt{2}, t/\sqrt{2}]$, siendo este el intervalo de mayor interés en el límite asintótico [34]. Así, la forma de la distribución de probabilidad para el CC muestra un comportamiento bien distinto a la correspondiente al CA, la cual tiende a una distribución Gaussiana cuando el tiempo tiende a infinito.

4.2.6.2. Comportamiento Asintótico de la Distribución de Probabilidad

Al igual que como hicimos con el CA, podemos preguntarnos si existe para el CC un estado asintótico estacionario, es decir, un estado tal que aplicaciones sucesivas del operador U lo dejan invariante. Para el CA, vimos que esto equivalía a que la matriz de transición, la cual determina la evolución del vector probabilidad, tuviera un vector propio asociado al valor propio 1. ¿Existe un estado con esas características para el operador unitario U?. La respuesta está, precisamente, en la unitariedad del operador. Calculemos la distancia entre estados en tiempos consecutivos, y veamos qué pasa con esta cantidad en el límite en que $t \to \infty$; si existe un estado límite, entonces dicha cantidad debería

tender a cero. Esta distancia viene dada por:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\left\||\psi(t+1)\rangle - |\psi(t)\rangle\right\|^2 &= \frac{1}{2}\left(\langle\psi(t+1)| - \langle\psi(t)|\right)\left(|\psi(t+1)\rangle - |\psi(t)\rangle\right) = \\ = 1 - \frac{1}{2}\langle\psi(t) \mid \psi(t+1)\rangle - \frac{1}{2}\langle\psi(t) \mid \psi(t+1)\rangle^* &= 1 - \Re\left(\langle\psi(t) \mid \psi(t+1)\rangle\right) = \\ = 1 - \Re\left(\langle\psi(t) \mid U\psi(t)\rangle\right) &= 1 - \Re\left(\langle\psi(0) \mid U\psi(0)\rangle\right), \end{aligned} \tag{4.2.34}$$

con lo cual vemos que la misma no depende del tiempo, y así, no existe un límite asintótico para $|\psi(t)\rangle$, es decir que U al ser unitario preserva la norma antes calculada. Más allá de esto, el contexto cuántico nos obliga a preguntarnos qué ocurre con el límite de la distribución de probabilidad (Ec.(4.2.27)), dado que el argumento anterior no excluye la posibilidad de que la misma sí posea un límite. Debido a que, tanto $|\psi(t)\rangle$ como la propia distribución quedan definidas en el tiempo por los valores propios de U, los cuales tienen la forma $\exp(\imath\theta_j t)$, se puede probar que ambos tiene un comportamiento cuasi-periódico [38], es decir que existen infinitos tiempos para los cuales están arbitrariamente cerca de sus estados iniciales. Sin embargo, podemos hacer uso de un concepto que posibilita la convergencia de la distribución de probabilidad con la cual se desee trabajar, la *Distribución de Probabilidad Promedio* (DPP).

4.2.6.3. Distribución de Probabilidad Promedio

La misma está definida mediante:

$$\overline{P}_k(t) = \frac{1}{t}\sum_{t'=0}^{t} P_k(t'). \tag{4.2.35}$$

Dicha definición corresponde al concepto natural de muestrear sobre el sistema; esto es, si uno mide el sistema en un tiempo randómico en el intervalo $[0, t]$, y repite este procedimiento muchas veces para cada tiempo partiendo siempre del mismo estado inicial, entonces la distribución experimental obtenida es exactamente la dada por la Ec.(4.2.35) cuando el número de repeticiones tiende a infinito. A continuación vamos a probar un resultado de gran relevancia para los capítulos siguientes, a saber, la existencia de una distribución asintótica para la DPP dada por la Ec.(4.2.35).

Sea $\{\lambda_j, |\phi_j\rangle\}_{j\in X\subseteq\mathbb{N}}$ el conjunto de valores y vectores propios del operador unitario U, y consideremos un estado inicial escrito en la base de vectores propios dado por $|\psi(0)\rangle = \sum_{j\in X}\psi_j\,|\phi_j\rangle$. Vamos a calcular la DPP a tiempo t y estudiar su límite asintótico

[2]. Comencemos viendo cómo queda a tiempo t el estado del sistema, y a partir del mismo la distribución espacial dada por la Ec.(4.2.27). Así, tenemos que

$$|\psi(t)\rangle = U^t |\psi(0)\rangle = \sum_k \lambda_k^t |\phi_k\rangle \langle\phi_k| \left(\sum_j \psi_j |\phi_j\rangle \right), \tag{4.2.36}$$

y haciendo uso de la ortonormalidad $\langle\phi_k|\phi_j\rangle = \delta_{k,j}$ obtenemos:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j \lambda_j^t \psi_j |\phi_j\rangle . \tag{4.2.37}$$

De esta manera la distribución espacial queda

$$\begin{aligned} P_k(t) &= |\langle k\uparrow|\psi(t)\rangle|^2 + |\langle k\downarrow|\psi(t)\rangle|^2 = \\ &= \sum_{i,j} \psi_i \psi_j^* \lambda_i^t \lambda_j^{t*} \left[\langle k\uparrow|\phi_i\rangle \langle\phi_j|k\uparrow\rangle + \langle k\downarrow|\phi_i\rangle \langle\phi_j|k\downarrow\rangle \right]. \end{aligned} \tag{4.2.38}$$

Luego, aplicando la DPP sobre la Ec.(4.2.38) observamos que la única dependencia temporal está en las potencias de los valores propios. Así, estudiemos qué ocurre con la dependencia de la siguiente expresión

$$\frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} \left(\lambda_i \lambda_j^* \right)^t . \tag{4.2.39}$$

Separemos en dos casos: (1) $\lambda_i = \lambda_j$, o sea que $\lambda_i \lambda_j^* = 1$, y (2) $\lambda_i \neq \lambda_j$. Los términos que contribuyen a (1) dan 1 como resultado del promedio, mientras que los que contribuyen a (2) podemos desarrollarlos como una progresión geométrica, obteniendo

$$\left| \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} \left(\lambda_i \lambda_j^* \right)^t \right| = \frac{\left| 1 - \left(\lambda_i \lambda_j^* \right)^T \right|}{T \left| 1 - \lambda_i \lambda_j^* \right|} \leq \frac{2}{T \left| 1 - \lambda_i \lambda_j^* \right|} \underset{T\to\infty}{\longrightarrow} 0. \tag{4.2.40}$$

Dado que el módulo de un número tiende a cero si y sólo si el número tiende a cero, entonces obtenemos que el límite de la DPP queda:

$$\Pi_k = \sum_{i,j/\lambda_i=\lambda_j} \psi_i \psi_j^* \left[\langle k\uparrow|\phi_i\rangle \langle\phi_j|k\uparrow\rangle + \langle k\downarrow|\phi_i\rangle \langle\phi_j|k\downarrow\rangle \right], \tag{4.2.41}$$

donde hemos definido $\Pi_k = \lim_{T\to\infty} \overline{P}_k(T)$. Observemos, tal y como ya habíamos adelantado, que el comportamiento asintótico depende del estado inicial a través de los coeficientes

$\psi_i \equiv \langle \phi_i | \psi(0) \rangle$. De esta forma vemos que si el estado inicial es cualquiera de los vectores propios, entonces el límite de la DPP está determinado únicamente por dicho estado, lo cual es esperable debido a que el mismo es un estado estacionario del sistema.

4.3. Comparación del CC y CA: Desviación Estándar y Tiempo de Mezclado

Hasta el momento vimos algunas de la diferencias que presenta el CC al compararlo con el CA; estudiamos la distribución de probabilidad del CC para una condición inicial localizada y encontramos un comportamiento bien distinto al CA; la misma presenta picos en torno a los tiempos definidos por la velocidad de grupo máxima del sistema, difiriendo así del conocido comportamiento Gaussiano que presenta el CA para tiempos largos. Luego estudiamos el comportamiento asintótico de la distribución encontrando que, para un grafo finito, el sistema no posee una distribución de probabilidad límite lo cual nos llevó a introducir la DPP para la cual sí existe dicha distribución, y vimos además la fuerte dependencia que esta última presenta con el estado inicial del sistema. Todas estas propiedades son bien distintas a las encontradas en el Cap.3 para el CA. Para concluir la comparación de ambos sistemas vamos a presentar otras dos cantidades que que permiten estudiar y comparar sus comportamientos: la desviación estándar, la cual vamos a introducir por ser una de las cantidades características que muestra diferencias entre los sistemas y por el interés que despertó este resultado en el desarrollo del CC, y por otro lado el *tiempo de mezclado*, el cual nos va a permitir evaluar los tiempos característicos en los cuales el CC se aproxima al estado asintótico, Ec.(4.2.41), y por lo tanto nos va a posibilitar el estudio de la termodinámica del CC, el cual presentaremos e investigaremos en los siguientes capítulos.

4.3.1. Desviación Estándar

En el Cap.3 presentamos la distribución de probabilidad generada por un número muy grande de experimentos realizados del CA sobre una red lineal, y vimos cuál es la dispersión característica, a tiempo t, de dicha distribución. Encontramos que la misma, dada por la desviación estándar, tiene una dependencia de la forma $\sigma = \sqrt{t}$, lo cuál implica que en t pasos podemos encontrar al caminante con probabilidad alta en el intervalo $\pm\sqrt{t}$. Vamos a presentar numéricamente cuál es el comportamiento de la correspondiente desviación para el CC sobre la línea, cuando el estado inicial es simétrico en el espacio del espín y el caminante parte del origen (ver Fig.4.3). Bajo estas consideraciones la posición

media es nula, de forma que la desviación estándar viene dada por

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_{k=-\infty}^{\infty} k^2 P_k(t)}, \tag{4.3.1}$$

La Fig.4.4 muestra el comportamiento de la desviación para el CC (en color azul) junto con la correspondiente al CA (en color rojo).

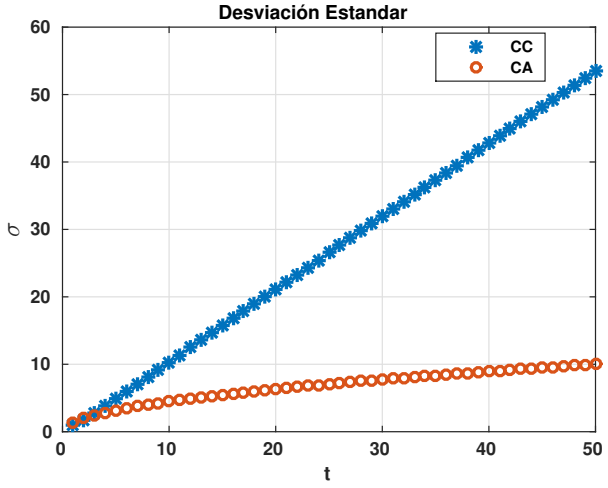

Figura 4.4.: **Desviación Estándar**. Se muestran las curvas para el CC (asterisco azul) y CA (círculo rojo). La desviación del CA va como $\sigma \sim \sqrt{t}$, mientras que para el CC es cuadráticamente más rápida, i.e., $\sigma \sim t$.

Como puede observarse, la desviación del CC es lineal con el tiempo, siendo este un comportamiento cuadráticamente más rápido en comparación con el CA, lo cual implica que para un tiempo dado, el CC se dispersa hasta una posición que es proporcional al cuadrado de la posición correspondiente al CA. Esta rapidez por encima del sistema clásico es relevante en la implementación del caminante en algoritmos de búsqueda, en los cuales se desea explorar un conjunto de puntos en el menor número posible de aplicaciones del algoritmo. Así, el CC presenta ventajas en este sentido frente al CA.

El comportamiento lineal mostrado en la Fig.4.4 se asemeja a un comportamiento balístico, esto es, al de una partícula libre que se mueve con velocidad unitaria de forma que tras t pasos se encuentra en la posición $k = t$. Esto implica que[4] $x_{rms} \equiv \sqrt{\langle x^2 \rangle} = t$, mientras que para el CC tenemos $x_{rms} = \sigma(t) = 0{,}54t$, donde 0,54 es la velocidad

[4]Definimos la cantidad x_{rms} para caracterizar el desplazamiento estadístico del comportamiento balístico y poder compararlo con el correspondiente al CC y CA, dado que $\sigma = 0$ (el sistema es determinista).

dada por la pendiente de la curva $\sigma(t)$. De esta forma[5] el CC posee en este sentido, un comportamiento similar al de una partícula clásica libre, a diferencia del CA para el cuál la cantidad $x_{rms} \propto \sqrt{t}$. De todas formas no hay que olvidar el carácter cuántico de nuestro sistema; el mismo se propaga en ambos sentidos pudiendo, probabilísticamente, ser encontrado en distintas posiciones, a diferencia de la partícula libre la cual alcanza de forma determinista su posición.

4.3.2. Tiempo de Mezclado

Para comparar el *tiempo de mezclado* de los sistemas clásico y cuántico, vamos a utilizar la misma noción introducida en el Cap.3, pero haciendo uso de la DPP como distribución de probabilidad dependiente del tiempo en lugar de la distribución de probabilidad clásica, y estudiar cuánto tiempo le lleva al sistema estar a una cantidad ϵ arbitrariamente pequeña cerca de su límite asintótico. Así, definimos el *tiempo de mezclado cuántico* como

$$\tau_\epsilon = \text{mín}\{T/\ \forall t \geq T, |\psi(0)\rangle\ ,\ D(\overline{P}_k(t), \Pi_k) \leq \epsilon\}, \tag{4.3.2}$$

donde $D(\overline{P}_k(t), \Pi_k)$ es una distancia definida sobre el espacio de las distribuciones de probabilidad; en el Cap.6 vamos a introducir una distancia en particular con la cual trabajaremos el caso del N-ciclo y presentaremos el comportamiento de $\tau_\epsilon(N)$. En general es difícil obtener expresiones analíticas para τ_ϵ, pero se pueden encontrar cotas así como también estudiar sus dependencias numéricamente [2]. Para el caso del N-ciclo $\tau_\epsilon = \mathcal{O}(\frac{N\log(N)}{\epsilon})$ [38], con lo cual vemos, al compararlo con el correspondiente al CA, que el CC converge casi cuadráticamente más rápido que el CA para un ϵ dado, mientras que al fijar N, el caminante clásico se mezcla más rápidamente que el cuántico al variar ϵ.

En el Cap.6 vamos a trabajar con el *tiempo de mezclado* para el N-ciclo, el cual nos ayudará a interpretar algunas de la cantidades que vamos a introducir al estudiar la termodinámica del caminante.

[5] Consideramos los casos para los cuales $\langle x \rangle = 0$ para el CC y el CA, lo cual resulta en $\sigma = x_{rms}$.

Parte II.

Termodinámica del Caminante Cuántico

5. Termodinámica del Caminante Cuántico en la Línea

En el capítulo anterior estudiamos algunas de las características más relevantes del caminante cuántico, enfocándonos en particular, en aquellas que están relacionadas con el trabajo de esta tesis. Vimos que a partir de la evolución unitaria del sistema, podíamos encontrar un mapa que describe de forma sencilla cómo evolucionan en el tiempo los coeficientes que cuantifican el espín de la partícula para cada punto de la red espacial (Ecs.(4.2.14,4.2.15)). Dado que el sistema es cuántico, los módulos al cuadrado de estos coeficientes son interpretados como las probabilidades de encontrar a la partícula con espín hacia arriba o abajo, en la posición correspondiente, lo cuál nos permite introducir diversas distribuciones de probabilidad como las ya presentadas en el Cap.4. Sobre la distribución de probabilidad espacial, nos preguntamos si la misma poseía o no un límite asintótico, resultando negativa la respuesta para todo sistema definido sobre un grafo finito. Sin embargo existen casos, como el CC sobre la línea, para el cual la distribución sí presenta un límite asintótico, tal y como se demuestra en el trabajo de Nayak y Vishwanath [34] para una condición inicial localizada con espín hacia arriba y una moneda de Hadamard, siendo el tratamiento utilizado extensible a cualquier condición inicial localizada [1]. La existencia de este comportamiento asintótico permite dar al problema una visión termodinámica, mediante la cual se puede, no sólo cuantificar dicho estado límite, sino además estudiar cómo el mismo es alcanzado. En este capítulo vamos a presentar las ideas fundamentales del trabajo de Romanelli [42], en el cual se introdujo el estudio de la termodinámica del CC sobre la línea. Esto nos va a dar los elementos necesarios para luego introducir el trabajo de tesis realizado.

5.1. Distribución Global de Quiralidad (DGQ)

En el Cap.4 fueron introducidas las distribuciones de probabilidad $P_n^{\uparrow}(t)$ y $P_n^{\downarrow}(t)$ las cuales dan la probabilidad de encontrar a la partícula en el nodo n con espín hacia arriba y abajo respectivamente. Vamos a definir la *Distribución Global de Quiralidad (DGQ)* como la dupla $(P_L(t), P_R(t))$ donde

$$P_L(t) \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} P_n^{\uparrow}(t), \tag{5.1.1}$$

$$P_R(t) \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} P_n^{\downarrow}(t). \tag{5.1.2}$$

Las mismas dan la probabilidad de encontrar a la partícula con espín hacia arriba (abajo) sumando la contribución de todas las posiciones. Teniendo en cuenta las Ecs.(4.2.25,4.2.26) y el mapa dado por las Ecs.(4.2.14,4.2.15) podemos encontrar la evolución de estas distribuciones, obteniendo un mapa con la siguiente forma [41]:

$$\begin{bmatrix} P_L(t+1) \\ P_R(t+1) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\theta & \sin^2\theta \\ \sin^2\theta & \cos^2\theta \end{pmatrix} \begin{bmatrix} P_L(t) \\ P_R(t) \end{bmatrix} + \Re\left[Q(t)\right] \sin 2\theta \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \tag{5.1.3}$$

donde

$$Q(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n(t) b_n^*(t). \tag{5.1.4}$$

La matriz de dimensión 2×2 que aparece en la Ec.(5.1.3) puede ser interpretada como una matriz de transición de un CA clásico, dado que cumple los requerimientos para serlo: todos sus elementos son positivos, y la suma de los elementos de cualquier fila o columna da 1. Por otro lado el término que posee $Q(t)$ es la marca característica del sistema cuántico, dado que el mismo está definido a partir de las interferencias $a_n(t)b_n^*(t)$ las cuales son nulas en el caso clásico. Así, cuando $Q(t) = 0$, la Ec.(5.1.3) representa un proceso Markoviano, tal y como los que tratamos en el Cap.3. Sin embargo, el sistema no necesariamente es clásico dado que $Q(t)$ puede ser nulo sin que $a_n(t)b_n^*(t) = 0$, $\forall\, n \in \mathbb{Z}$. Así, la evolución de la DGQ está dada por un término difusivo, correspondiente al comportamiento clásico, y un término de interferencia característico de los sistemas cuánticos, el cual mantiene la unitariedad de la evolución. En [41], Romanelli calcula el comportamiento asintótico de esta distribución, encontrando que

$$\begin{bmatrix} \Pi_L \\ \Pi_R \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + 2\Re(Q_0)/\tan\theta \\ 1 - 2\Re(Q_0)/\tan\theta \end{bmatrix}, \tag{5.1.5}$$

donde

$$\begin{aligned} \Pi_L &\equiv \lim_{t\to\infty} P_L(t), \\ \Pi_R &\equiv \lim_{t\to\infty} P_R(t), \\ Q_0 &\equiv \lim_{t\to\infty} Q(t). \end{aligned} \tag{5.1.6}$$

La Ec.(5.1.5) puede obtenerse directamente al sustituir los valores asintóticos, Ec.(5.1.6) en el mapa para la DGQ. El resultado obtenido es llamativo debido a la unitariedad de la evolución y más aún teniendo en cuenta el resultado expuesto en el Cap.4 para caminantes definidos sobre grafos finitos; sin embargo, se sabe que el CC sobre la línea presenta comportamiento asintótico [34], correspondiente a una distribución de probabilidad que está tan cerca como se desee de una distribución uniforme. Así, la DGQ posee un límite asintótico característico de comportamientos difusivos, pero con una dependencia en el término de interferencia, propio del carácter cuántico del sistema. Cabe destacar que si $Q_0 = 0$, entonces $\Pi_L = \Pi_R = 1/2$ con lo cual la distribución asintótica es uniforme, comportamiento que se presenta típicamente en los sistemas clásicos, tal y como vimos en el Cap.3.

5.1.1. Enredo y Temperatura de Enredo

Como mencionamos en el Cap.2, el concepto de enredo no sólo es característico de los sistemas cuánticos compuestos, sino que ha probado tener gran relevancia en el desarrollo de procesos de información y computación cuánticas, como por ejemplo, teleportación cuántica [8], criptografía [7], etc. Vamos a introducir el enredo del CC, y vamos a ver que podemos relacionarlo con una temperatura que va a caracterizar el equilibrio del sistema.

Veamos en primer lugar por qué el sistema presenta enredo. Supongamos que el caminante parte de un estado inicial puro no enredado, es decir $|\psi_0\rangle = |\psi_x\rangle \otimes |\psi_e\rangle$, con $|\psi_x\rangle \in \mathcal{H}_x$ y $|\psi_e\rangle \in \mathcal{H}_e$. Si el operador evolución pudiera ser escrito como un producto tensorial de operadores, donde cada uno de ellos actúa en los espacios $\mathcal{H}_x$ y $\mathcal{H}_e$, entonces el estado para cualquier tiempo posterior seguiría siendo separable (esta situación corresponde al caso en el cual las partes del sistema no interactúan, y por lo tanto cada una de ellas evoluciona según la ecuación de Schrödinger correspondiente a su espacio); dado que esto no ocurre para el CC (ver Ec.(4.2.2)), la evolución unitaria necesariamente introduce enredo en el sistema, producto de la interacción entre el espín y las posiciones. Vamos a definir la matriz densidad reducida del sistema, la cual nos va a permitir, no sólo construir la termodinámica del mismo, sino también cuantificar el enredo a través

de la entropía de Von Neumann [1, 10] presentada en el Cap.2.

Dado un estado puro del sistema a tiempo t como el de la Ec.(4.2.1) del Cap.4, definimos la matriz densidad como:

$$\begin{aligned}\rho = |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)| = \\ = \sum_n \sum_{n'} \left(a_n(t)|0\rangle + b_n(t)|1\rangle\right)|n\rangle \left\langle n'\right| \left(a^*_{n'}(t)\langle 0| + b^*_{n'}(t)\langle 1|\right) = \\ = \sum_{n,n'} \left(a_n(t)a^*_{n'}(t)|0\rangle\langle 0| + b_n(t)b^*_{n'}(t)|1\rangle\langle 1| + a_n(t)b^*_{n'}(t)|0\rangle\langle 1| + a^*_{n'}(t)b_n(t)|1\rangle\langle 0|\right)|n\rangle\left\langle n'\right|,\end{aligned} \tag{5.1.7}$$

y a partir de la misma, definimos la matriz densidad reducida como:

$$\rho_c \equiv tr_x(\rho), \tag{5.1.8}$$

donde $tr_x(\rho) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \langle n|\rho|n\rangle$ define el estado del espín independientemente de la posición. Si operamos sobre la Ec.(5.1.7), recordando que $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$, obtenemos que el mismo está dado por:

$$\rho_c(t) = \begin{pmatrix} P_L(t) & Q(t) \\ Q^*(t) & P_R(t) \end{pmatrix}, \tag{5.1.9}$$

con las entradas definidas mediante

$$P_L(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |a_n(t)|^2, \tag{5.1.10}$$

$$P_R(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |b_n(t)|^2, \tag{5.1.11}$$

$$Q(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n(t)b^*_n(t). \tag{5.1.12}$$

Como era de esperar, el estado del espín queda determinado por los mismos coeficientes definidos al introducir la DGQ, Ecs.(5.1.1,5.1.2), dado que esta fue obtenida considerando las contribuciones de todas las posiciones, que es precisamente lo que hace el operador tr_x al actuar sobre ρ. Así, vemos a partir de los valores asintóticos encontrados en la sección anterior, que el estado que describe el espín posee un límite estacionario. Este estado

estacionario nos permite pensar en la introducción de un parámetro que cuantifique el equilibrio del sistema que, como veremos más adelante, va a resultar ser la temperatura. Previo a esto, consideremos la entropía de Von Neumann como medida del enredo (entropía de enredo), dada por:

$$S(\rho) = -tr(\rho_c \log(\rho_c)). \tag{5.1.13}$$

Calculemos los valores propios del operador $\rho_c(t)$ de forma de poder evaluar la Ec.(5.1.13), los cuales también nos serán de utilidad para evaluar cómo el sistema alcanza el equilibrio. Dadas las Ecs.(5.1.9 - 5.1.12) es sencillo ver que los mismos vienen dados por:

$$\lambda_\pm = \frac{1}{2}\left[1 \pm \sqrt{1 - 4\left(P_L(t)P_R(t) - |Q(t)|^2\right)}\right].$$

Luego la entropía de enredo queda determinada por los valores propios de $\rho_c(t)$ mediante la expresión

$$S(\rho) = -\lambda_+ \log(\lambda_+) - \lambda_- \log(\lambda_-), \tag{5.1.14}$$

y conociendo los valores asintóticos de la DGQ, Ec.(5.1.6), podemos conocer también la entropía asintótica

$$S_0 = -\Lambda_+ \log(\Lambda_+) - \Lambda_- \log(\Lambda_-), \tag{5.1.15}$$

con $\Lambda_\pm = \lim_{t\to\infty} \lambda_\pm = \frac{1}{2}\left[1 \pm \sqrt{1 - 4\left(\Pi_L\Pi_R - |Q_0|^2\right)}\right]$. Considerando la Ec.(5.1.5), los valores propios asintóticos toman la siguiente forma:

$$\Lambda_\pm = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\chi}, \tag{5.1.16}$$

con

$$\chi \equiv |Q_0|^2 + \left[\Re(Q_0)/\tan\theta\right]^2, \tag{5.1.17}$$

variando en el intervalo $[0, 1/4]$, considerando que $0 < \Lambda_+\Lambda_- \leq 1/4$. Así, vemos que la entropía únicamente depende del término de interferencia asintótico, el cual como veremos más adelante, sólo depende de las condiciones iniciales del problema. En particular, cabe destacar que cuando $\chi = 0$, esto es cuando $Q_0 = 0$, entonces la entropía resulta $S_0 = \log(2)$, correspondiente al proceso difusivo asintótico en el cuál el sistema posee 2 posibles estados equiprobables, resultando en un estado máximamente mezclado que, como vimos

en el Cap.(2), es también un estado máximamente enredado.

La existencia de una entropía asintótica nos indica que, tras un régimen transitorio, el sistema alcanza el equilibrio pudiendo así introducir la termodinámica del mismo. Para poder describir de forma completa el estado estacionario desde un punto de vista termodinámico, requerimos de la vinculación entre el Hamiltoniano del sistema, y la matriz densidad correspondiente. La principal propuesta en el trabajo de Romanelli [42], es que en analogía con un modelo de movimiento Browniano cuántico [31], dicha vinculación está dada por el ensemble canónico, i.e.:

$$\rho_c(\infty) = \frac{1}{\mathcal{Z}_c} \exp\left(-\beta H_c\right), \tag{5.1.18}$$

donde $\beta = 1/k_B T$, $\mathcal{Z}_c$ es la función de partición del sistema y H_c su Hamiltoniano. Sea $\{|\phi_+\rangle, |\phi_-\rangle\}$ la base de vectores propios de ρ_c en la cual H_c y ρ_c son diagonales, y llamemos, sin pérdida de generalidad, $\pm E_0$[1] a los valores propios del Hamiltoniano, los cuales representan la energía de enredo; entonces tenemos:

$$\Lambda_\pm \equiv \frac{\exp(\pm\beta E_0)}{\exp(\beta E_0) + \exp(-\beta E_0)}, \tag{5.1.19}$$

definiendo así la temperatura de enredo $T = 1/k_B\beta$. A través de la Ec.(5.1.19) vemos que sólo vamos a definir el cociente entre la temperatura (T) y la energía (E_0), tomando $k_B = 1$ o absorbiendo la constante dentro de la definición de E_0. La propuesta podemos pensarla de la siguiente manera: si uno prepara un ensemble de sistemas formados por el espín y las posiciones como el ambiente en el cual el espín se traslada, y centra su atención en la evolución del mismo, el espín es entonces un sistema abierto que intercambia energía con su entorno (los grados de libertad están enredados); de esta forma, si el estado del espín ha de alcanzar un equilibrio, podemos pensar que el mismo, estando en contacto térmico con el entorno, intercambia energía hasta alcanzar una temperatura de equilibrio, i.e., la temperatura de enredo. Dicho proceso es naturalmente descrito por el ensemble canónico en sistemas estadísticos. Así, podemos pensar a la temperatura de enredo como un parámetro que caracteriza y cuantifica el equilibrio del sistema.

Llamemos $\tilde{\rho}_c$ a la forma diagonal de la matriz densidad asintótica; luego, la misma tiene la siguiente forma:

[1] Las energías de un sistema con dos posibles niveles siempre pueden tomarse como $\{E_0, -E_0\}$ mediante una adecuada elección del "nivel cero" de energía.

$$\tilde{\rho}_c = \begin{pmatrix} \Lambda_+ & 0 \\ 0 & \Lambda_- \end{pmatrix} = \frac{1}{\exp(\beta E_0) + \exp(-\beta E_0)} \begin{pmatrix} \exp(\beta E_0) & 0 \\ 0 & \exp(-\beta E_0) \end{pmatrix}, \tag{5.1.20}$$

donde $\{\Lambda_+, \Lambda_-\}$ son, respectivamente, las probabilidades de encontrar al sistema en los estados propios $\{|\phi_+\rangle, |\phi_-\rangle\}$ con energía $\pm E_0$. El operador encontrado es el mismo que describe matemáticamente a un espín con momento magnético en una región donde existe un campo magnético. Esto reafirma la idea de poder considerar a nuestro sistema como los grados de libertad que describen al espín en un baño térmico, a temperatura T, definido por los muchos grados de libertad del espacio de las posiciones.

A partir del ensemble introducido para describir la quiralidad del sistema, podemos construir toda la termodinámica que de él se desprende. Así, podemos evaluar distintas cantidades extensivas e intensivas del sistema, como por ejemplo: la energía libre de Helmholtz (A), la energía interna (U) y la entropía (S_0). Conociendo la función de partición, dada por

$$\mathcal{Z}_c = \exp(\beta E_0) + \exp(-\beta E_0) = 2\cosh(\beta E_0), \tag{5.1.21}$$

las cantidades mencionadas están dadas por:

$$A = -\frac{1}{\beta}\ln(2\cosh(\beta E_0)) = \frac{T}{2}\ln\left(\frac{1}{4} - \chi\right), \tag{5.1.22}$$

$$U = -E_0 \tanh(\beta E_0) = -2E_0\sqrt{\chi}, \tag{5.1.23}$$

$$S_0 = \beta U - \beta A. \tag{5.1.24}$$

Nuestra atención en este trabajo va a estar centrada en el parámetro intensivo $T = 1/\beta$, el cual se puede obtener a partir de la Ec.(5.1.19) como

$$T = 2E_0 / \ln\left(\frac{1 + 2\sqrt{\chi}}{1 - 2\sqrt{\chi}}\right). \tag{5.1.25}$$

Como vemos a partir de las Ecs.(5.1.22 - 5.1.25) la cantidades introducidas dependen del parámetro χ, el cual contiene el término asintótico de interferencia. De esta forma, vemos una vez más cómo las características cuánticas del problema juegan un rol preponderante en el sistema. La Fig.5.1 muestra el comportamiento de dos cantidades de nuestro interés, la temperatura de enredo asintótica y la entropía en función del paráme-

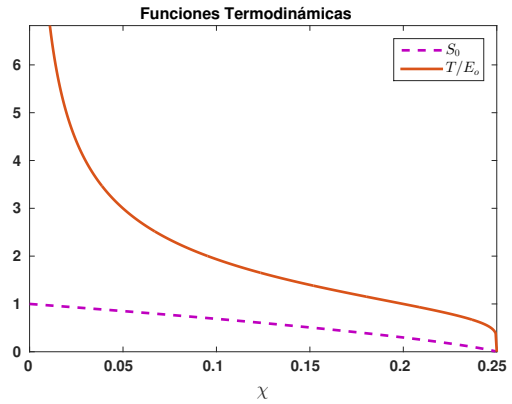

Figura 5.1.: **Funciones Termodinámicas**. Se muestran las curvas termodinámicas del estado asintótico del sistema; en color violeta y línea discontinua se grafica la entropía (enredo), mientras que en color rojo y línea continua se muestra el comportamiento de la temperatura de enredo. Ambas variables están normalizadas por log(2).

tro adimensionado χ. La entropía, tomada como una medida de nuestro desconocimiento sobre el sistema previo a observarlo, muestra un máximo para $\chi = 0$ ($Q_0 = 0$) correspondiente a un estado máximamente mezclado, i.e. $\rho = \frac{1}{2}I$, mientras que para $\chi = 1/4$ ($|Q_0|^2 = \Pi_L \Pi_R$) el estado es puro y por lo tanto la entropía es nula (sabemos en qué estado se encuentra el sistema), tomando valores intermedios en cualquier otro caso. Los resultados coinciden con lo establecido en el Cap.2, a partir de la descomposición de Schmidt. Por otro lado, dado que la temperatura se introduce como un parámetro de equilibrio en la interacción entre el sistema y el entorno, podemos esperar que la misma sea más grande cuánto más correlacionado estén estos últimos. Dado que la entropía misma es una medida de dicha correlación (enredo), vemos que efectivamente la temperatura es más grande para valores más chicos de χ.

Como veremos más adelante, este parámetro sólo depende de las condiciones iniciales del sistema con lo cual, a priori, uno puede elegir la condición inicial para obtener algún valor asintótico deseado de energía, entropía o temperatura. En la siguiente sección presentaremos algunos resultados de las funciones termodinámicas introducidas, con especial interés en la temperatura, los cuales nos serán de utilidad para comparar con el caso del CC sobre el N-ciclo.

5.1.2. Caminante Inicialmente Localizado

Vamos a presentar el comportamiento de las funciones termodinámicas en el límite asintótico para el caso del CC inicialmente localizado, dado que corresponde al caso desarrollado en el siguiente capítulo correspondiente al trabajo de tesis. De todas formas, cabe destacar que Romanelli [42] investiga también el comportamiento asintótico cuando el estado inicial corresponde a una distribución Gaussiana en el espacio de las posiciones con quiralidad arbitraria, así como el régimen transitorio del sistema a partir del mapa que da la evolución del caminante cuántico, con condiciones iniciales localizadas.

El caso del CC inicialmente localizado fue desarrollado en el Cap.4, donde vimos que el estado inicial puro de la partícula puede escribirse haciendo uso de la representación geométrica de la esfera de Bloch, válido para representar estados de cualquier sistema cuántico con dimensión 2. Así, escribimos el estado inicial del caminante como:

$$|\psi(0)\rangle = [\cos(\gamma/2)\,|\uparrow\rangle + \sin(\gamma/2)\exp(\imath\varphi)\,|\downarrow\rangle]\,|0\rangle\,, \tag{5.1.26}$$

en el cual suponemos sin pérdida de generalidad, que el caminante está en la posición $|n\rangle = |0\rangle$ a $t = 0$, y recordemos que los ángulos $\gamma \in [0, \pi]$ y $\varphi \in [0, 2\pi]$ definen la orientación del vector sobre la esfera de Bloch (ver Fig.4.1). A partir de dicha condición inicial, y suponiendo que la moneda utilizada es la de Hadamard, se puede encontrar el estado asintótico del sistema siguiendo el método desarrollado por Nayak y Vishwanath [34], en el cual se resuelve analíticamente el problema del CC localizado con estado inicial $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle\,|0\rangle$. El caso general, dado por la Ec.(5.1.26) se desarrolla de forma detallada en el trabajo de G. Abal et al. [1], en el cual se encuentra que

$$Q_0 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\left[\cos\gamma + \sin\gamma\left(\cos\varphi - \imath\sqrt{2}\sin\varphi\right)\right]. \tag{5.1.27}$$

La Ec.(5.1.27) nos permite obtener la cantidad χ definida en la Ec.(5.1.17) mediante la cual podemos evaluar todas las cantidades termodinámicas introducidas previamente. Observemos entonces que

$$\Re(Q_0) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)[\cos\gamma + \sin\gamma\cos\varphi]\,, \tag{5.1.28}$$

$$\Im(Q_0) = -\frac{1}{2}\left(\sqrt{2} - 1\right)\sin\gamma\sin\varphi, \tag{5.1.29}$$

con lo cual

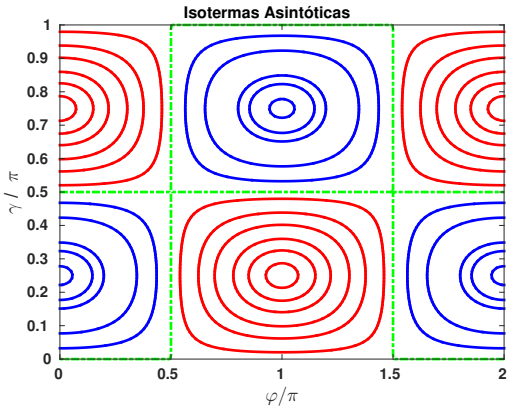

Figura 5.2.: **Isotermas Asintóticas**. La figura muestra las curvas de nivel del parámetro χ. Se observan 4 regiones distintas con temperaturas "frías" ($T < T_0$) en color azul y "calientes" ($T > T_0$) en color rojo. Las isotermas "frías" tienen valores correspondientes a $T/T_0 = 0{,}66, 0{,}68, 0{,}7, 0{,}8$ y $0{,}9$ con sentido creciente desde adentro hacia afuera, mientras que las "calientes" tienen valores $T/T_0 = 1{,}08, 1{,}3, 1{,}6, 2{,}2, 3{,}2$ y $6{,}6$ con sentido creciente desde afuera hacia adentro. Las líneas de color verde corresponden a $T/T_0 = 1$.

$$|Q_0|^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\left[1 + \sin^2\gamma \sin^2\varphi + \sin 2\gamma \cos\varphi\right], \tag{5.1.30}$$

y así el parámetro χ queda definido para cualquier condición inicial localizada y una moneda de Hadamard como:

$$\chi = \chi_0\left(1 + \cos\varphi \sin 2\gamma\right), \tag{5.1.31}$$

con $\chi_0 = \frac{3}{4} - \frac{1}{\sqrt{2}}$. Vamos a introducir una temperatura característica

$$T_0 = 2/\ln\left(\frac{1 + 2\sqrt{\chi_0}}{1 - 2\sqrt{\chi_0}}\right), \tag{5.1.32}$$

correspondiente a las condiciones iniciales $\varphi = \{\pi/2, 3\pi/2\}$ o $\gamma = \{0, \pi/2, \pi\}$. Las mismas como veremos, dividen el comportamiento de las curvas de nivel de la temperatura asintótica en el espacio de las condiciones iniciales (φ, γ). Como puede verificarse en la Fig.4.1, estas condiciones iniciales corresponden a los planos $y = 0$ y $z = 0$ sobre la esfera de Bloch. La Fig.5.2 muestra el comportamiento de las curvas de nivel de χ, que, tal y como podemos ver a partir de las Ecs.(5.1.22 - 5.1.25) son también curvas de nivel de las cantidades correspondientes. De ahora en más nos vamos a referir a las mismas como isotermas asintóticas. En la misma se distinguen 4 zonas: 2 "calientes" para las cuales la

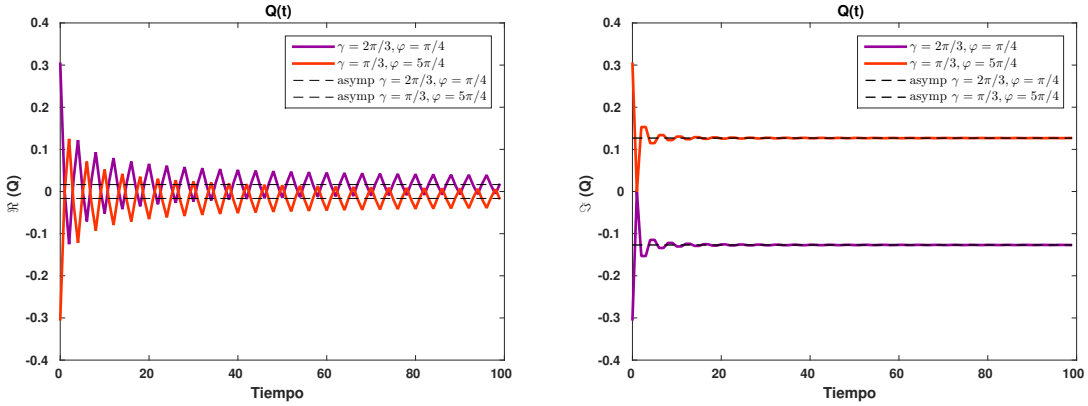

Figura 5.3.: **Q(t) para estados simétricos**. En el panel izquierdo se muestra la parte real de $Q(t)$ para estados simétricos sobre la esfera de Bloch, mientras que en el panel derecho se grafican las correspondientes partes imaginarias. Los estados corresponden a las condiciones iniciales: $(2\pi/3, \pi/4)$ en color azul y $(\pi/3, 5\pi/4)$ en color verde donde la evolución esta dada por la moneda de Hadamard, $\theta = \pi/4$. Las líneas discontinuas en color negro representan los valores asintóticos, los cuales pueden obtenerse a partir de las Ecs.(5.1.28,5.1.29). A partir de las figuras se observa que $Q_{(\gamma,\varphi)}(t) = -Q_{(\pi-\gamma,\varphi+\pi)}(t)$, comportamiento que se evidencia en la Fig.5.2.

temperatura es mayor a T_0, y 2 "frías" correspondientes a temperaturas por debajo de T_0; dicho valor delimita las regiones, tal y como puede verse en color verde en el gráfico. La simetría encontrada corresponde a la invarianza de χ frente al cambio simultáneo de los ángulos $(\gamma, \varphi) \to (\pi - \gamma, \varphi \pm \pi)$. Este cambio corresponde a estados opuestos sobre la esfera de Bloch, los cuales como mencionamos en el capítulo anterior, son estados ortonormales en el espacio de Hilbert; esto es, si $P_1(\gamma, \varphi)$ y $P_2(\pi - \gamma, \varphi \pm \pi)$ son los puntos sobre la esfera de Bloch que representan a los estados $|\psi_{P_1}\rangle$ y $|\psi_{P_2}\rangle$, entonces sus coordenadas sobre la esfera verifican:

$$[X_1(\gamma,\varphi), Y_1(\gamma,\varphi), Z_1(\gamma,\varphi)] = -\left[X_2(\pi-\gamma,\varphi+\pi), Y_2(\pi-\gamma,\varphi+\pi), Z_2(\pi-\gamma,\varphi+\pi)\right],$$

mientras que los estados en el espacio de Hilbert cumplen que

$$\langle \psi_{P_1} | \psi_{P_2} \rangle = 0.$$

Es esperable que el comportamiento asintótico de estos estados sea el mismo dado que no hay diferencia en la dinámica del sistema si el mismo parte inicialmente de uno u

otro estado. Como ya mencionamos en el capítulo anterior, si el estado inicial localizado es $|\psi_{P_1}\rangle$ o su opuesto sobre la esfera de Bloch, $|\psi_{P_2}\rangle$, entonces un sistema es el rotado del otro, rotación que no modifica la física del problema. Este resultado lo podremos corroborar de forma analítica en el siguiente capítulo en el cual veremos que la simetría $(\gamma, \varphi) \to (\pi - \gamma, \varphi \pm \pi)$ deja invariante (a menos de un signo) al coeficiente Q_0 y por lo tanto al parámetro χ para cualquier moneda utilizada. En la Fig.5.3 se muestra a modo de ejemplo este comportamiento para el caso $\theta = \pi/4$ con condición inicial $\gamma = 2\pi/3$, $\varphi = \pi/4$ y el estado simétrico $\gamma = \pi/3$, $\varphi = 5\pi/4$.

Las ideas hasta aquí presentadas nos van a permitir desarrollar la termodinámica del CC sobre el N-ciclo tal y como veremos en el siguiente capítulo.

6. Termodinámica del Caminante Cuántico en el N-Ciclo

6.1. Evolución del Caminante Cuántico en el N-Ciclo

La evolución del CC sobre el N-ciclo puede obtenerse partiendo de la correspondiente al caminante sobre la línea, la cual presentamos en el Cap.4. Como ya explicamos, este último está descrito por un mapa para los coeficientes que definen el espín de la partícula en cada posición como función del tiempo y está dado por:

$$a_n\left(t+1\right) = a_{n+1}\left(t\right)\cos\theta + b_{n+1}\left(t\right)\sin\theta, \tag{6.1.1a}$$

$$b_n\left(t+1\right) = a_{n-1}\left(t\right)\sin\theta - b_{n-1}\left(t\right)\cos\theta, \tag{6.1.1b}$$

donde recordemos que los coeficientes $a_n(t)$ y $b_n(t)$ están respectivamente correlacionados con desplazamientos del caminante hacia la izquierda y derecha tras la aplicación del operador evolución del sistema, y sus módulos al cuadrado definen las probabilidades de encontrar a la partícula en la posición $|n\rangle$ con espín hacia arriba y abajo correspondientemente, mientras que el parámetro $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$ por su parte, define el sesgo del operador utilizado como moneda ($\theta = \frac{\pi}{4}$ define la moneda sin sesgo de Hadamard, Ec.(4.2.4)). El N-ciclo sigue exactamente la misma dinámica establecida por el mapa, Ecs.(6.1.1a,6.1.1b) con la diferencia de que posee un número finito (N) de puntos, de forma tal que el vecino a la derecha del punto N-ésimo es el primer punto, y el vecino a la izquierda del primero es el N-ésimo. Así, imponiendo estas condiciones de borde en las Ecs.(6.1.1a,6.1.1b) obtenemos la topología deseada. Luego, si identificamos los sitios de la red con subíndices que van desde 0 a $N-1$, basta con tomar los subíndices módulo N (e.g. $0 = N \; mod \, N$) para obtener la periodicidad buscada [2, 4]. Cabe observar aquí que la condición de borde establecida introduce, a priori, diferencias respecto al comportamiento del CC sobre la línea; si dejamos que el sistema evolucione por un tiempo suficientemente grande (mayor que $\sqrt{2}N$) la superposición de los frentes de onda que se propagan en uno y otro sentido interfieren generando cambios respecto al CC sobre la línea en la función de onda

resultante, y por lo tanto en la distribución de probabilidad sobre el red.

Previo a imponer las condiciones antes mencionadas, vamos a desacoplar el sistema de ecuaciones. Para ello, despejamos $b_{n+1}(t)$ de la primera de las ecuaciones, y la sustituimos en la segunda cuidando de evaluar el coeficiente en la posición y tiempo adecuados. Así tenemos que:

$$b_{n+1}(t) = \frac{1}{\sin(\theta)} \left[a_n(t+1) - a_{n+1}(t) \cos(\theta) \right],$$

$$b_n(t+1) = \frac{1}{\sin(\theta)} \left[a_{n-1}(t+2) - a_n(t+1) \cos(\theta) \right], \tag{6.1.2}$$

$$b_{n-1}(t) = \frac{1}{\sin(\theta)} \left[a_{n-2}(t+1) - a_{n-1}(t) \cos(\theta) \right]. \tag{6.1.3}$$

Luego, sustituyendo las Ecs. (6.1.2 y 6.1.3) en la Ec.(6.1.1b), obtenemos:

$$\frac{1}{\sin(\theta)} \left[a_{n-1}(t+2) - a_n(t+1) \cos(\theta) \right] =$$
$$= a_{n-1}(t) \sin(\theta) - \frac{\cos(\theta)}{\sin(\theta)} \left[a_{n-2}(t+1) - a_{n-1}(t) \cos(\theta) \right].$$

Reordenando términos y tras una breve manipulación algebraica, obtenemos la siguiente ecuación:

$$a_n(t+1) - a_n(t-1) = \cos(\theta) \left[a_{n+1}(t) - a_{n-1}(t) \right]. \tag{6.1.4}$$

La evolución para el coeficiente $b_n(t+1)$ sigue una ecuación idéntica a la desarrollada anteriormente; como ya hemos establecido, esto es producto de que el sistema es invariante en lo que respecta a los sentidos derecha e izquierda y por lo tanto, a la identificación de los coeficientes con dichos sentidos. Dada esta simetría entre los coeficientes, trabajaremos de ahora en más con la evolución para los $a_n(t)$ manteniendo en mente que los desarrollos que hagamos son igualmente aplicables a los $b_n(t)$. La Ec.(6.1.4) es una ecuación recurrente de segundo orden en el tiempo, mientras que las ecuaciones definidas en el sistema dado por las Ecs.(6.1.1a,6.1.1b) son de primer orden. De esta forma, es necesario conocer el coeficiente a_n en dos tiempos para poder resolver la primera, mientras que se requiere de a_n y b_n en un tiempo para resolver el sistema de ecuaciones.

Impongamos ahora las condiciones de borde antes mencionadas; al tomar los subíndices espaciales módulo N, obtenemos la relación $a_0(t) \equiv a_N(t)$, con lo cual las ecuaciones para

los coeficientes $a_n(t)$ quedan de la siguiente manera:

$$\begin{cases} a_n(t+1) - a_n(t-1) = \cos(\theta)\left[a_{n+1}(t) - a_{n-1}(t)\right], & 0 < n < N-1 \\ a_0(t+1) - a_0(t-1) = \cos(\theta)\left[a_1(t) - a_{N-1}(t)\right], & n = 0 \\ a_{N-1}(t+1) - a_{N-1}(t-1) = \cos(\theta)\left[a_0(t) - a_{N-2}(t)\right], & n = N-1 \end{cases} \tag{6.1.5}$$

Si definimos el vector $\overrightarrow{A}(t) = [a_0(t), a_1(t), ..., a_{N-1}(t)]^T$ entonces podemos escribir el sistema de la Ec.(6.1.5) mediante la siguiente forma matricial:

$$\overrightarrow{A}(t+1) - \overrightarrow{A}(t-1) = M\overrightarrow{A}(t), \tag{6.1.6}$$

donde M es una matriz cuadrada cíclica de dimensiones $N \times N$ dada por:

$$M = \cos(\theta)\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & ... & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & ... & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & ... & 0 & 0 \\ . & . & . & . & ... & . & . \\ . & . & . & . & ... & . & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & ... & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & ... & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Este tipo de sistemas lineales, dados por matrices cíclicas, son sencillos de diagonalizar lo cual nos permite desacoplar las distintas posiciones. Siguiendo la Ref.[15] los valores y vectores propios de la matriz M vienen dados por:

$$\lambda_k = 2\imath\cos(\theta)\sin(\frac{2\pi k}{N}), \tag{6.1.7}$$

$$v_{kl} = \frac{1}{\sqrt{N}}\exp(\frac{2\pi\imath kl}{N}), \tag{6.1.8}$$

siendo v_{kl} la componente l del vector propio asociado a λ_k, con los índices k, l variando entre 0 y $N-1$. Procedemos entonces a resolver la Ec.(6.1.6) en la base que diagonaliza a la matriz M. Para hacer esto, notemos en primer lugar que la matriz formada por los vectores propios (la matriz cambio de base) es unitaria, i.e, para $k \neq l$

$$\sum_j v_{kj}v_{lj}^* = \frac{1}{N}\sum_j \exp\left[\frac{2\pi\imath j(k-l)}{N}\right] = \frac{1}{N}\left[\frac{1-\exp(2\pi\imath(k-l))}{1-\exp\left(\frac{2\pi\imath(k-l)}{N}\right)}\right] = 0,$$

dado que $|k-l| < N$, $k-l \in Z$ y por lo tanto $\exp(2\pi\imath(k-l)) = 1$ mientras que $\exp\left(\frac{2\pi\imath(k-l)}{N}\right) \neq 1$. Por otro lado, si $k = l$ entonces:

$$\sum_j v_{kj} v_{lj}^* = \frac{1}{N} \sum_j \exp\left(\frac{2\pi\imath j(k-k)}{N}\right) = 1.$$

O sea que $\sum_j v_{kj} v_{lj}^* = \delta_{kl}$, o en su forma matricial, $VV^* = Id_N$. Observemos que el operador unitario V definido es el cambio de base dado por la *transformada de Fourier discreta*. Si se observa el procedimiento seguido en el Apéndice A, podemos notar que esta es precisamente la base que diagonaliza a la parte espacial del operador evolución U, con lo cual es de esperar que los resultados obtenidos por uno y otro método sean equivalentes, tal y como veremos. Luego, podemos multiplicar por la izquierda a la Ec.(6.1.6) por la matriz V^* obteniendo la siguiente expresión:

$$V^* \overrightarrow{A}(t+1) - V^* \overrightarrow{A}(t-1) = V^* M V V^* \overrightarrow{A}(t),$$

la cual, definiendo el conjunto de vectores dependientes del tiempo $\overrightarrow{C}(t) = V^* \overrightarrow{A}(t)$ toma la siguiente forma:

$$\overrightarrow{C}(t+1) - \overrightarrow{C}(t-1) = D\overrightarrow{C}(t), \tag{6.1.9}$$

con $D = V^* M V$ la matriz diagonal del sistema, lo cual permite escribir la Ec.(6.1.9) para cada una de sus componentes, obteniéndose:

$$c_k(t+1) - c_k(t-1) = \lambda_k c_k(t). \tag{6.1.10}$$

La Ec.(6.1.10) describe una relación de recurrencia de segundo orden, homogénea y con coeficientes constantes, cuya solución viene dada por las raíces de su polinomio característico [21]. Así, la solución general es:

$$c_k^{L,R}(t) = \alpha_k^{L,R} \exp(\imath\Omega_k t) + \beta_k^{L,R} (-1)^t \exp(-\imath\Omega_k t), \tag{6.1.11}$$

con $\alpha_k^{L,R}$ y $\beta_k^{L,R}$ coeficientes constantes, donde L y R hacen referencia a si el coeficiente c_k es calculado a partir de los $\{a_k\}$ o $\{b_k\}$, y Ω_k queda definido a partir de la Ec.(6.1.7).

$$\sin(\Omega_k) \equiv \cos(\theta)\sin(\frac{2\pi k}{N}) = \frac{\lambda_k}{2\imath}. \tag{6.1.12}$$

Observemos que la Ec.(6.1.11) queda completamente determinada al conocer los coeficientes $\{\alpha_k^{L,R}, \beta_k^{L,R}\}$, los cuales podemos obtener a partir de las condiciones iniciales del

sistema, i.e:

$$\alpha_k^{L,R} = \frac{c_k^{L,R}(1) + c_k^{L,R}(0)\exp(-\imath\Omega_k)}{2\cos(\Omega_k)}, \tag{6.1.13}$$

$$\beta_k^{L,R} = \frac{c_k^{L,R}(0)\exp(\imath\Omega_k) - c_k^{L,R}(1)}{2\cos(\Omega_k)}. \tag{6.1.14}$$

donde los coeficientes $c_k^{L,R}(0)$ y $c_k^{L,R}(1)$ pueden obtenerse a partir de $a_k(0)$ y $b_k(0)$. Finalmente, podemos recuperar la evolución para los coeficientes que definen la quiralidad del sistema invirtiendo la ecuación lineal $\overrightarrow{C}(t) = V^* \overrightarrow{A}(t)$ (y la análoga para el vector $\overrightarrow{B}(t)$ definido a partir de los coeficientes $b_k(t)$), obteniendo:

$$\begin{cases} a_n(t) & = \sum_{l=0}^{N-1} v_{nl} c_l^L(t), \\ b_n(t) & = \sum_{l=0}^{N-1} v_{nl} c_l^R(t). \end{cases} \tag{6.1.15}$$

6.2. Operador Densidad Reducido

En el capítulo anterior introdujimos el operador densidad reducido, el cual nos permite estudiar la *distribución global de quiralidad,* o sea, el estado que describe el espín del CC cuando consideramos la contribución de todas las posiciones, y nos posibilita también cuantificar a partir del mismo el enredo entre los grados de libertad del espacio de las posiciones con los correspondientes al espín. Más aún, presentamos su comportamiento asintótico y definimos a partir de este la temperatura de enredo asintótica como parámetro que cuantifica el equilibrio del sistema. En lo que sigue, la idea es introducir el mismo tratamiento presentado para el CC sobre la línea en el caso del N-ciclo. Ahora bien, vimos en el Cap.4 que el N-ciclo no presenta límite asintótico, y por lo tanto no podemos estudiar la termodinámica del mismo exactamente como hicimos en el caso de la línea. Para eludir esta dificultad, vamos a considerar el operador densidad promediado, introducido también en el Cap.4, el cual sí presenta un comportamiento asintótico. Así, considerando el método desarrollado en la sección anterior para resolver analíticamente el CC sobre el N-ciclo, vamos a calcular a continuación cómo queda el operador densidad y su promedio temporal en este formalismo, y estudiar, a partir de este último la termodinámica del sistema.

6.2.1. Operador en la Base de Fourier

Como ya vimos en el Cap.5, el estado del espín puede ser obtenido a partir de la matriz densidad del sistema trazando en el espacio de las posiciones, obteniendo así

$$\rho_c(t) = \begin{pmatrix} P_L(t) & Q(t) \\ Q^*(t) & P_R(t) \end{pmatrix}, \tag{6.2.1}$$

donde,

$$\begin{aligned} P_L(t) &= \sum_n |a_n(t)|^2 , \\ P_R(t) &= \sum_n |b_n(t)|^2 , \\ Q(t) &= \sum_n a_n(t) b_n^*(t), \end{aligned} \tag{6.2.2}$$

con $P_L(t) + P_R(t) = 1$, siendo esta igual a la probabilidad de encontrar al caminante con espín hacia arriba o abajo en alguna de las posiciones definidas, y $Q(t)$ el término de interferencia. El conjunto de estos coeficientes definen la *distribución global de quiralidad* (DGQ) introducida en el Cap.5. Dada la relación entre los coeficientes $\{a_n(t), b_n(t)\}$ y $\{c_n^L(t), c_n^R(t)\}$ (Ecs.(6.1.15)), vamos a escribir los coeficientes que definen la DGQ en función de estos últimos. Así tenemos que

$$\begin{aligned} P_L(t) = \sum_n a_n(t) a_n^*(t) = \sum_n \sum_{k,k'} v_{nk} v_{k'n}^* c_k^L(t) c_{k'}^{L*}(t) = \\ = \sum_{k,k'} \delta_{kk'} c_k^L(t) c_{k'}^{L*}(t) = \sum_k \left| c_k^L(t) \right|^2 . \end{aligned} \tag{6.2.3}$$

De forma análoga,

$$P_R(t) = \sum_k \left| c_k^R(t) \right|^2 , \tag{6.2.4}$$

y finalmente,

$$Q(t) = \sum_n a_n(t) b_n^*(t) = \sum_n \sum_{k,k'} v_{nk} v_{k'n}^* c_k^L(t) c_{k'}^{R*}(t) =$$

$$= \sum_{k,k'} \delta_{kk'} c_k^L(t) c_{k'}^{R*}(t) = \sum_k c_k^L(t) c_k^{R*}(t). \tag{6.2.5}$$

En todos los cálculos anteriores hicimos uso de la unitariedad del operador V. A modo de ejemplo vamos a desarrollar, haciendo uso de la Ec.(6.2.3), cómo queda el coeficiente $P_L(t)$; los cálculos correspondientes a $P_R(t)$ y $Q(t)$ son similares y se desarrollan en detalle en el Apéndice B. Así, dada la evolución del coeficiente $c_k^L(t)$ tenemos que

$$\begin{aligned} P_L(t) &= \sum_k \left| \alpha_k^L \exp\left(\imath \Omega_k t\right) + \beta_k^L (-1)^t \exp\left(-\imath \Omega_k t\right) \right|^2 = \\ &= \sum_k \left|\alpha_k^L\right|^2 + \left|\beta_k^L\right|^2 + \alpha_k^L \beta_k^{L*} (-1)^t \exp\left(2\imath \Omega_k t\right) + \alpha_k^{L*} \beta_k^L (-1)^t \exp\left(-2\imath \Omega_k t\right) = \\ &= \sum_k \left(\left|\alpha_k^L\right|^2 + \left|\beta_k^L\right|^2 + (-1)^t 2\Re\left\{ \alpha_k^L \beta_k^{L*} \exp\left(2\imath \Omega_k t\right) \right\} \right), \end{aligned} \tag{6.2.6}$$

donde, recordemos, los coeficientes $\{\alpha_k^{L,R}, \beta_k^{L,R}\}$ son constantes definidas a partir de las condiciones iniciales y están dadas por las Ecs.(6.1.13,6.1.14). Observemos entonces que los dos primeros términos son independientes del tiempo, mientras que el tercer sumando es oscilatorio. De esta manera podemos asegurar que el estado que describe al espín no tiene un límite asintótico, y por lo tanto el sistema no alcanza un equilibrio. El resultado es esperable en función de lo desarrollado en capítulos previos, donde vimos que en general los sistemas cuánticos no poseen un límite para $t \to \infty$. Dado este resultado, cabe destacar aquí una primer diferencia entre el CC sobre la línea y sobre el N-ciclo, ya que el primero sí posee estado y distribución asintóticas [34, 41]. En el caso de la línea, la distribución de probabilidad está caracterizada por picos en torno a las posiciones $\pm\frac{t}{\sqrt{2}}$ los cuales van disminuyendo al pasar el tiempo, alcanzando finalmente, una distribución que está tan cerca como se quiera de una distribución uniforme. Para el N-ciclo por su parte, el hecho de que la red sobre la cual se mueve el caminante sea finita, es determinante en no permitir que la distribución se estacione debido a las interferencias que se dan entre los frentes de las funciones de onda correspondientes a espín hacia arriba y abajo una vez que estos se encuentran en el punto (aproximadamente) diametralmente opuesto a la posición inicial.

En la siguiente sección vamos a calcular la DPP de la DGQ, lo cual nos va a permitir realizar un estudio análogo al presentado en el Cap.3, particularmente, los regímenes transitorio y estacionario del sistema y la termodinámica asociada a estos.

6.2.2. Distribución de Probabilidad Promedio (DPP) del Operador Densidad Reducido

Apliquemos la DPP introducida en el Cap.4, Ec.(4.2.35) sobre los coeficientes que definen la DGQ; nuevamente vamos a seguir presentando los cálculos para $P_L(t)$ dejando los restantes para el Apéndice B. Como mencionamos previamente, los dos primeros sumandos en la Ec.(6.2.6) no tienen dependencia temporal, con lo cual el promedio los deja invariantes, mientras que sobre el tercer sumando actúa de la siguiente manera,

$$\frac{1}{t}\sum_{t'=0}^{t-1}\sum_{k}(-1)^{t'}2\Re\left\{\alpha_k^L\beta_k^{L*}\exp(2\imath\Omega_k t')\right\} =$$

$$= \frac{2}{t}\sum_{k}\Re\left\{\alpha_k^L\beta_k^{L*}\sum_{t'=0}^{t-1}\exp\left[(2\Omega_k+\pi)\,\imath t'\right]\right\} = \frac{2}{t}\sum_{k}\Re\left\{\alpha_k^L\beta_k^{L*}\left(\frac{1-\exp\left[i(2\Omega_k+\pi)t\right]}{1+\exp\left(i2\Omega_k\right)}\right)\right\}.$$

Luego

$$\overline{P}_L(t) = \sum_k\left(\left|\alpha_k^L\right|^2+\left|\beta_k^L\right|^2\right)+\frac{2}{t}\xi(t), \tag{6.2.7}$$

donde, $\xi(t)\equiv\sum_{k=0}^{N-1}\Re\left\{\alpha_k^L\beta_k^{L*}\mathfrak{F}_k(t)\right\}$, con $\mathfrak{F}_k(t)=\frac{1-\exp((2\Omega_k+\pi)\imath t)}{1+\exp(2\imath\Omega_k)}$. Observemos que $\mathfrak{F}_k(t)$ no posee singularidades dado que para ello Ω_k debería tomar los valores $\pm\pi/2$, mientras que Ω_k esta definido para los intervalos $[-\pi/4,\pi/4]$ y $[3\pi/4,-3\pi/4]$ (ver Ec.(6.1.12)). Como ya mencionamos, la función $\xi(t)$ oscila en el tiempo, de modo que $\frac{1}{t}\xi(t)\underset{t\to\infty}{\to}0$. De esta forma podemos re-escribir la Ec.(6.2.7) como

$$\overline{P}_L(t) = \Pi_L+\frac{2}{t}\xi(t),$$

y de manera análoga se pueden calcular $\overline{P}_R(t)$ y $\overline{Q}(t)$ obteniéndose una matriz densidad reducida con la siguiente forma,

$$\overline{\rho}_c(t) = \overline{\rho}_c(\infty)+\frac{2}{t}\begin{pmatrix}\xi(t) & \varsigma(t)\\ \varsigma^*(t) & -\xi(t)\end{pmatrix}, \tag{6.2.8}$$

donde $\varsigma(t)$ también es una función oscilatoria, cuya expresión se desarrolla en el Apéndice B, y $\overline{\rho}_c(\infty)$ contiene la parte asintótica del operador, y está definida por:

$$\overline{\rho}_c(\infty) = \begin{pmatrix}\Pi_L & Q_0\\ Q_o^* & \Pi_R\end{pmatrix}, \tag{6.2.9}$$

con Π_L, Π_R y Q_0, respectivamente, los límites cuando $t \to \infty$ de $\bar{P}_L(t), \bar{P}_R(t)$ y $\bar{Q}(t)$. Encontramos así, que la DPP aplicada sobre el estado del sistema tiene un límite asintótico, el cual nos va a permitir establecer y estudiar la termodinámica del sistema. Cabe destacar que hasta aquí no han sido impuestas las condiciones iniciales, con lo cual la Ec.(6.2.8) es válida tanto para condiciones localizadas como distribuidas en el espacio. En la siguiente sección vamos a trabajar con condiciones iniciales localizadas. Como veremos en este caso, el límite asintótico coincide con el correspondiente al CC en una línea para el caso en que $N \to \infty$. En lo que sigue desarrollamos estos aspectos, y presentamos los principales resultados de este trabajo en el límite $t \to \infty$.

6.2.3. Caminante Inicialmente Localizado con Espín Arbitrario

Supongamos que tenemos como condición inicial al caminante ubicado en la posición $x = 0$ con espín arbitrario. Como vimos, podemos expresar esto de la siguiente manera,

$$\begin{bmatrix} a_n(0) \\ b_n(0) \end{bmatrix} = \delta_{n0} \begin{bmatrix} \cos(\gamma/2) \\ \exp(\imath\varphi)\sin(\gamma/2) \end{bmatrix}, \tag{6.2.10}$$

donde los ángulos φ y γ definen el espín de la partícula sobre la esfera de Bloch. Vamos a calcular estas condiciones iniciales en los coeficientes $\{c_k^{L,R}\}$ para poder obtener el operador densidad reducido dado por la Ec.(6.2.8).

Para ello, hagamos uso nuevamente de la relación entre los coeficientes $\{a_k, b_k\}$ y $\{c_k^L, c_k^R\}$ para determinar las condiciones iniciales en la base que diagonaliza la parte espacial del sistema. Así, usando las Ecs.(6.1.15) y (6.2.10) podemos encontrar los coeficientes $\{c_k^L, c_k^R\}$ a tiempo $t = 0$ y $t = 1$. Hagamos el cálculo detallado para c_k^L:

$$c_k^L(0) = \sum_{l=0}^{N-1} v_{kl}^* a_l(0) = \sum_{l=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(-\frac{2\pi\imath kl}{N}\right) \delta_{l0} \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{N}} \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right), \tag{6.2.11}$$

$$c_k^L(1) = \sum_{l=0}^{N-1} v_{kl}^* a_l(1) = \sum_{l=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(-\frac{2\pi\imath kl}{N}\right) \Big[\delta_{l+1,0} \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) \cos\theta +$$
$$+\delta_{l+1,0} \exp(\imath\varphi) \sin\left(\frac{\gamma}{2}\right) \sin\theta\Big] = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(\frac{2\pi\imath k}{N}\right) \left[\cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) \cos\theta + \exp(\imath\varphi) \sin\left(\frac{\gamma}{2}\right) \sin\theta\right]. \tag{6.2.12}$$

En esta última ecuación para el cálculo de $c_k^L(1)$, hemos utilizado el mapa dado por la Ec.(6.1.1a) para determinar $a_l(1)$. De forma análoga podemos obtener los coeficientes provenientes del espín hacia abajo, resultando finalmente en el siguiente conjunto de

coeficientes:

$$c_k^L(0) = \frac{\cos(\gamma/2)}{\sqrt{N}}, \tag{6.2.13}$$

$$c_k^L(1) = \frac{\exp\left(\frac{2\pi\imath k}{N}\right)\left[\cos(\gamma/2)\cos\theta + \exp(\imath\varphi)\sin(\gamma/2)\sin\theta\right]}{\sqrt{N}}, \tag{6.2.14}$$

$$c_k^R(0) = \frac{\exp(\imath\varphi)\sin(\gamma/2)}{\sqrt{N}}, \tag{6.2.15}$$

$$c_k^R(1) = \frac{\exp\left(-\frac{2\pi\imath k}{N}\right)\left[\cos(\gamma/2)\sin\theta - \exp(\imath\varphi)\sin(\gamma/2)\cos\theta\right]}{\sqrt{N}}. \tag{6.2.16}$$

Con estos coeficientes vamos a obtener en la siguiente sección las expresiones analíticas para el estado asintótico del sistema, lo cual nos va a permitir estudiar la dependencia del mismo con el número de puntos que definen al N-ciclo. En particular, vamos a ver bajo qué condiciones podemos re-obtener el comportamiento del CC sobre la línea.

6.3. Termodinámica del CC en el N-Ciclo

6.3.1. Temperatura de Enredo Asintótica

De forma análoga a lo propuesto por Romanelli [42] para el CC sobre la línea, vamos a suponer que el estado asintótico del espín está determinado por la distribución canónica, a partir de la cual podemos definir la temperatura de enredo. Así, siguiendo lo desarrollado en el Cap.5, los valores propios de $\rho_c(\infty)$ vienen dados por

$$\overline{\Lambda}_{\pm}(\infty) = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\chi},$$

con

$$\chi \equiv \frac{1}{4} - \left(\Pi_L\Pi_R - |Q_0|^2\right). \tag{6.3.1}$$

Igual que para el CC sobre la línea, el término de interferencia sólo aparece en el parámetro χ. Si asociamos a los valores propios el ensemble canónico encontramos que la temperatura queda definida mediante

$$T = 2E_0/\ln\left(\frac{1+2\sqrt{\chi}}{1-2\sqrt{\chi}}\right), \tag{6.3.2}$$

la cual, como ya vimos, únicamente depende de la función χ. En la ecuación anterior

sólo queda definido el cociente entre la temperatura y la energía, la cual no conocemos a priori. Más adelante vamos a definir una temperatura T_0 y estudiar el cociente $\frac{T}{T_0}(\chi)$.

Analicemos cómo se comporta la temperatura para las condiciones iniciales desarrolladas en la sección anterior. Para ello, vamos a hacer uso de los cálculos realizados en el Apéndice B de los coeficientes Π_L, Π_R y Q_0 dónde obtuvimos:

$$\Pi_L = 1 - \Pi_R, \tag{6.3.3}$$

$$\begin{aligned}\Pi_R = &\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos^2\theta\cos\gamma - \frac{1}{4}\sin\gamma\sin 2\theta\cos\varphi\right) f(N,\theta) \\ &+ \left(\frac{1}{4}\sin\gamma\sin 2\theta\cos\varphi - \cos^2\theta\sin^2(\gamma/2)\right) g(N,\theta),\end{aligned} \tag{6.3.4}$$

$$\begin{aligned}Q_0 = &\frac{1}{4}\left(\exp(-\imath\varphi)\sin\gamma\sin^2\theta + \frac{1}{2}\cos\gamma\sin 2\theta\right) f(N,\theta) \\ &+\frac{1}{4}\left(\exp(\imath\varphi)\sin\gamma\sin^2\theta + \frac{1}{2}\cos\gamma\sin 2\theta\right) h(N,\theta),\end{aligned} \tag{6.3.5}$$

donde las funciones $f(N,\theta), g(N,\theta)$ y $h(N,\theta)$ están definidas por,

$$f(N,\theta) = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\left(\frac{1}{1-\cos^2\theta\sin^2(\frac{2\pi k}{N})}\right), \tag{6.3.6}$$

$$g(N,\theta) = \frac{1}{\cos^2\theta}\left(f(N,\theta) - 1\right), \tag{6.3.7}$$

$$h(N,\theta) = \frac{2}{\cos^2\theta} + \left(1 - \frac{2}{\cos^2\theta}\right) f(N,\theta). \tag{6.3.8}$$

Como podemos observar a partir de las Ecs.(6.3.4 - 6.3.8) la dependencia del estado de equilibrio con el número de puntos sobre el N-ciclo, está dada únicamente por la función $f(N,\theta)$. Dicha función tiene un límite bien definido cuando $N \to \infty$ dado por,

$$\lim_{N\to\infty} f(N,\theta) = \frac{1}{\sin\theta}. \tag{6.3.9}$$

Más aún, la función tiene una convergencia muy rápida hacia su límite, donde unas pocas unidades de N son suficientes para acercarse con gran precisión al valor asintótico. A modo de ejemplo, tomemos el caso de una moneda de Hadamard para la cual la suma

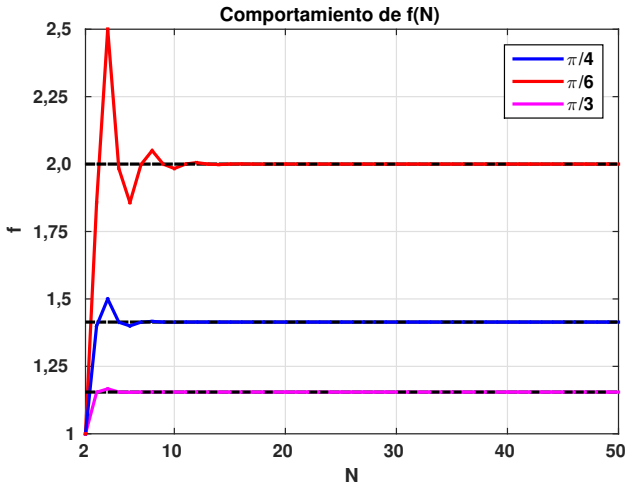

Figura 6.1.: **Función f(N, θ)**.Se muestra el comportamiento de $f(N,\theta)$ en función de la posición para los ángulos $\theta = \pi/4$ (azul), $\theta = \pi/6$ (rojo) y $\theta = \pi/3$ (violeta). Las líneas de color negro en punto y raya identifican los límites correspondientes a cada una de las funciones, dados por $1/\sin\theta$.

en la Ec.(6.3.6) tiene una expresión analítica dada por,

$$f(N,\pi/4) = \begin{cases} \frac{(1+\sqrt{2})^N+(1-\sqrt{2})^N}{(1+\sqrt{2})^N-(1-\sqrt{2})^N}\sqrt{2}, & para\ N\ impar \\ \frac{(1+\sqrt{2})^{N/2}+(1-\sqrt{2})^{N/2}}{(1+\sqrt{2})^{N/2}-(1-\sqrt{2})^{N/2}}\sqrt{2}. & para\ N\ par \end{cases} \tag{6.3.10}$$

Observemos que al tomar límite en la expresión anterior, se obtiene $f(N,\pi/4) \underset{N\to\infty}{\to} \sqrt{2} \equiv 1/\sin(\pi/4)$. Supongamos que queremos encontrar para qué valor de N, $f(N,\pi/4)$ está a $\epsilon = 0{,}001$ de su valor asintótico; haciendo el cálculo numérico obtenemos que dicha condición se cumple a partir de $N = 9$. La Fig.(6.1) muestra el comportamiento de $f(N,\theta)$ para $\theta = \pi/4, \pi/6, \pi/3$.

Haciendo uso de la Ec.(6.3.2) para θ fijo, podemos estudiar cómo son las isotermas de enredo asintóticas como función de los ángulos γ y φ que definen el estado inicial del espín. Las mismas están determinadas por la función $\chi(\gamma,\varphi)$ la cual, usando las Ecs.(6.3.4,6.3.5) tiene la siguiente expresión,

$$\chi = [h\,(N,\theta) - f(N,\theta)]^2 \sin^2\varphi \sin^2\gamma \sin^4\theta/16 + \\ + [h\,(N,\theta) + f(N,\theta)]^2 \left(\cos\varphi \sin\gamma \sin\theta + \cos\gamma \cos\theta\right)^2/16. \tag{6.3.11}$$

Como es de esperar, esta función presenta invarianza frente al siguiente cambio simultáneo de los ángulos sobre la esfera de Bloch, $(\gamma, \varphi) \to (\pi - \gamma, \varphi + \pi)$ correspondiente a estados opuestos sobre la misma. Como ya mencionamos, esto indica la equivalencia física existente entre estos pares de estados debido a la elección arbitraria que da lugar a desplazamientos del caminante a uno y otro lado. De esta forma, alcanza con estudiar sólo los estados pertenecientes a una hemisfera, siendo simétricos los resultados obtenidos para la otra. Tomemos entonces $\gamma \in [0, \pi]$ y $\varphi \in [-\pi/2, \pi/2]$.

Para estudiar las isotermas definidas por la Ec.(6.3.2), precisamos conocer el valor del parámetro E_0 correspondiente a uno de los niveles de energía del Hamiltoniano H_c. Para obviar esto, definimos el valor característico $\chi_0 \equiv \chi(\pi, \varphi) = \chi(0, \varphi)$,

$$\chi_0 \equiv [h\,(N,\theta) + f\,(N,\theta)]\,\frac{\cos^2\theta}{16}, \tag{6.3.12}$$

y a partir del mismo una temperatura característica, T_0, obtenida al sustituir χ_0 en la expresión, Ec.(6.3.2). De esta forma podemos definir las isotermas de enredo relativas a esta temperatura característica,(T/T_0).

La Fig.6.2 muestra las curvas de nivel de la temperatura asintótica de enredo normalizada por T_0. Ambos paneles muestran el comportamiento de las isotermas para dos caminantes sobre N-ciclos con $N = 3$ (izquierda) y $N = 100$ (derecha) para una moneda de Hadamard. En ambos casos se observan dos regiones distintas, definidas por $T < T_0$ en color azul (zonas "frías") y $T > T_0$ en rojo (zonas "cálidas"). La línea discontinua en color verde corresponde a $T = T_0$. Al comparar los patrones de estas regiones para los dos caminantes, vemos la similitud que presentan los mismos; como ya mencionamos, esto es producto del rápido comportamiento que presenta la función $f\,(N,\theta)$ al aumentar N, para la cuál unas pocas unidades de N son suficientes para estar con gran precisión cerca del valor límite. Más aún, cabe destacar que al tomar el límite $N \to \infty$ sobre la expresión, Ec.(6.3.11) , se recupera en forma analítica el comportamiento asintótico del caminante cuántico sobre una línea, estudiado en la Ref.[42], lo cual brinda consistencia al procedimiento desarrollado, así como a la extensión de la temperatura de enredo para otros grafos finitos.

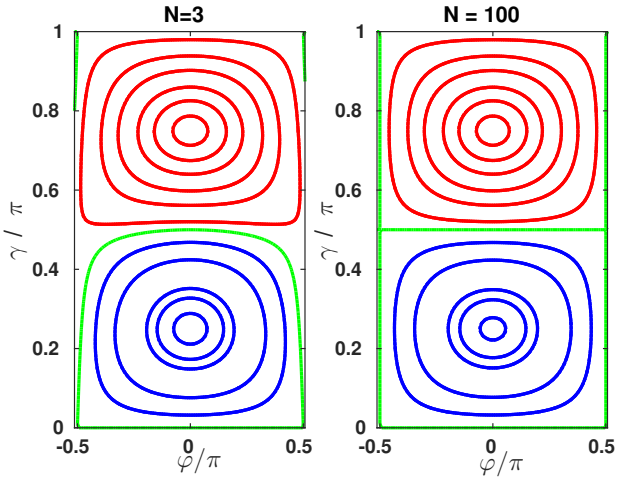

Figura 6.2.: **Isotermas Asintóticas**. Isotermas de enredo asintóticas en función de los ángulos γ y φ. Se grafican las curvas de nivel relativas a la temperatura T_0. Los lados izquierdo y derecho corresponden, respectivamente, a las isotermas para un anillo con $N = 3$ posiciones y $N = 100$ posiciones. Ambas gráficas fueron obtenidas para una moneda con ángulo $\theta = \pi/4$. Las líneas en color azul representan zonas "frías" en las cuales $T < T_0$, mientras que las líneas en color rojo son zonas "cálidas" dadas por $T > T_0$. La línea discontinua de color verde corresponde a $T = T_0$. Para las líneas frías se tomaron los valores (desde adentro hacia afuera) $T/T_0 = 0{,}66$, $0{,}68$, $0{,}70$, $0{,}80$ y $0{,}9$, y para las líneas rojas (desde afuera hacia adentro) los valores $T/T_0 = 1{,}08$, $1{,}3$, $1{,}6$, $2{,}2$, $3{,}2$ y $6{,}6$.

La reobtención del comportamiento del CC sobre la línea podemos entenderla de forma sencilla si consideramos que podemos conmutar los límites involucrados: $N, t \to \infty$. Si primero hacemos el límite en el número de puntos sobre el N-ciclo, está claro que la topología descrita es la línea. Una forma más física de visualizar la situación es observar que los frentes que se propagan hacia uno y otro lado respecto a la posición inicial del caminante, no alcanzan a encontrarse en el punto diametralmente opuesto sobre el ciclo, y por lo tanto la distribución de probabilidad definida coincide con la correspondiente a la línea. Aceptando esto, y considerando que existe un límite asintótico para la línea, realizar el promedio temporal sobre la distribución de probabilidad la deja incambiada, y así su límite coincide finalmente con el de la línea.

6.3.2. Temperatura Transitoria de Enredo

En el apartado anterior estudiamos la temperatura asintótica de enredo para el N-ciclo, la cual fue introducida como un parámetro que cuantifica el equilibrio al que se

llega entre los grados de libertad del espacio del espín y los correspondientes grados de libertad del espacio de las posiciones; vimos además la dependencia analítica que tiene el sistema con N, el número de posiciones que definen la red. En esta sección, extenderemos el estudio para evaluar cómo evoluciona en el tiempo el sistema hasta alcanzar el equilibrio mencionado; para ello vamos a trabajar con la temperatura de enredo en función del tiempo, la cuál podemos introducir a partir de la matriz densidad reducida, Ec.(6.2.8). Trabajaremos con el tiempo de mezclado como una medida del tiempo en el cual dicha matriz se acerca a su límite asintótico, y vamos a introducir el tiempo de termalización como una medida del tiempo en el cual la temperatura se aproxima a su valor en equilibrio; compararemos estos dos tiempos, estudiando, particularmente, cómo los mismos están relacionados y cuál es su dependencia con N.

Para estudiar el régimen transitorio del sistema partimos de la Ec.(6.2.8) evaluando en el tiempo los valores propios de la matriz densidad $\overline{\rho}_c(t)$; a partir de ellos podemos extender la definición de temperatura de enredo como función del tiempo de la siguiente manera,

$$T(t) = \frac{2E_0}{\ln\left(\overline{\Lambda}^+(t)/\overline{\Lambda}^-(t)\right)}, \tag{6.3.13}$$

con $\overline{\Lambda}^{\pm}(t)$ los mencionados valores propios, siendo $\overline{\Lambda}^+(t) > \overline{\Lambda}^-(t)$. La Fig.6.3 muestra el comportamiento de la temperatura adimensionada (T/T_0) como función del tiempo en escala logarítmica; se muestran las curvas para tres condiciones iniciales distintas dadas por (de abajo hacia arriba): $\gamma = 2\pi/5$, $\gamma = 0$ y $\gamma = 5\pi/9$ con $\varphi = 0$ para los tres casos; las condiciones elegidas corresponden a puntos sobre las curvas de nivel mostradas en la Fig.6.2, donde los colores se corresponden. El panel izquierdo de la figura muestra el caso para un anillo con $N = 3$ puntos, y el derecho para $N = 100$. Como puede observarse las curvas correspondientes a las mismas condiciones iniciales tienen comportamientos semejantes que, como ya hemos mencionado, se debe a la débil dependencia del sistema con el número de puntos, N. De todas formas cabe destacar aquí que dicha dependencia fue encontrada para los valores asintóticos del sistema; en las curvas mostradas, y como veremos en análisis posteriores, la dependencia con N es más fuerte. En particular, vemos que los tiempos para los cuales las curvas correspondientes a $N = 3$ llegan a sus valores asintóticos rondan $t \simeq 100$, mientras que para $N = 100$ los tiempos son considerablemente más pequeños (tener en cuenta que la escala temporal es logarítmica). Más adelante vamos a analizar con mayor detalle esta dependencia.

Vamos a estudiar entonces cuáles son los tiempos característicos para los que el sistema

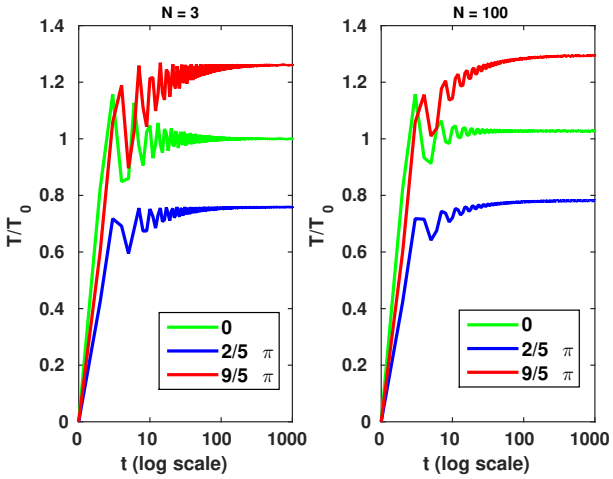

Figura 6.3.: **Temperatura de Enredo**. Se gráfica la temperatura adimensionada como función del tiempo, en escala logarítmica. Ambas gráficas muestras (de abajo hacia arriba) las curvas para $\gamma = 2\pi/5$, $\gamma = 0$ y $\gamma = 5\pi/9$ con $\varphi = 0$ para los tres casos. En el panel izquierdo se muestra el caso de un N-ciclo con $N = 3$, y el derecho con $N = 100$.

alcanza el equilibrio. Para ello, evaluemos en primer lugar el tiempo de mezclado ya presentado; recordemos que este representa el tiempo a partir del cual, con precisión arbitraria, podemos considerar que el sistema está cerca de su límite asintótico, y lo definimos mediante

$$\tau_\epsilon(N) \equiv min\{\tilde{\mathrm{t}} \setminus \forall t > \tilde{t}, \|\bar{\rho}_c(t) - \bar{\rho}_c(\infty)\| \leq \epsilon\}. \tag{6.3.14}$$

La definición cuantifica la noción de cercanía para operadores, donde $\|\|$ denota la norma del operador. De esta forma, τ_ϵ mide el tiempo mínimo a partir del cual la matriz densidad está ϵ-cerca de su límite asintótico. En nuestro caso, vamos a utilizar una noción de distancia dada por

$$\|\bar{\rho}_c(t_1) - \bar{\rho}_c(t_2)\| \equiv \left|\bar{\Lambda}^+(t_1) - \bar{\Lambda}^+(t_2)\right|, \tag{6.3.15}$$

la cual, como puede verse de forma sencilla, define lo que denominamos una seminorma; dicha definición es menos estricta que la correspondiente a norma, en que no requiere de un vector nulo para obtener un valor nulo. Así, una seminorma debe cumplir sólo las propiedades de homogeneidad y desigualdad triangular y define una noción de distancia sobre el espacio cociente V/W, donde V es el espacio vectorial sobre el cual está definida la seminorma, y W es el sub-espacio de V con los vectores nulos. Dicho esto, la

Ec.(6.3.15) nos va a ser de utilidad para medir distancias entre estados para los cuales $\bar{\Lambda}^+(t_1) \neq \bar{\Lambda}^+(t_2)$; es decir, si en tiempos distintos las matrices densidad correspondientes tienen la misma descomposición espectral, la seminorma dada no va a definir una distancia entre dichos estados. En nuestro sistema podemos ver que salvo para un número finito de tiempos iniciales, los valores propios para tiempos distintos son distintos, y podemos entonces definir la distancia entre los estados correspondientes, en particular, la distancia para tiempos largos que definen el tiempo de mezclado en la Ec.(6.3.15). Esto es consecuencia de la evolución sobre un dominio discreto de tiempos.

A partir de la Ec.(6.2.8) los valores propios del sistema en función del tiempo quedan determinados por

$$\Lambda^{\pm}(t) = \frac{1}{2}\left[1 \pm \sqrt{1 - 4\left(\bar{P}_L(t)\bar{P}_R(t) - \left|\bar{Q}(t)\right|^2\right)}\right]. \tag{6.3.16}$$

De la Ec.(6.3.13) vemos que

$$\exp(\beta(t)E_0) = \frac{\overline{\Lambda}^+(t)}{\overline{\Lambda}^-(t)},$$

donde hemos definido $\beta(t) = 1/T(t)$, de forma tal que

$$\tanh(\beta(t)E_0) = \overline{\Lambda}^+(t) - \overline{\Lambda}^-(t).$$

Así, combinando este resultado con la Ec.(6.3.16) obtenemos para el inverso de la temperatura,

$$\tanh(\beta(t)E_0) = \sqrt{1 - 4(\bar{P}_L(t)\bar{P}_R(t) - \left|\bar{Q}(t)\right|^2)}. \tag{6.3.17}$$

Usando esta última ecuación y teniendo en cuenta la distancia entre la matriz densidad y su límite asintótico para un tiempo arbitrario, vemos que

$$\bar{\Lambda}^+(t) - \bar{\Lambda}^+(\infty) = \frac{1}{2}\left[\tanh(\beta(t)E_0) - \tanh(\beta(\infty)E_0)\right]. \tag{6.3.18}$$

Esta ecuación nos va a permitir relacionar el tiempo de mezclado con otro tiempo característico del sistema, el cual tiene un significado físico más directo, el tiempo de termalización. Definamos $\Delta\beta \equiv \beta(t) - \beta(\infty)$, y consideremos tiempos grandes para los cuales el sistema está cerca de la termalización, i.e. $\Delta\beta \underset{t\to\infty}{\to} 0$; podemos desarrollar la Ec.(6.3.18) en $\Delta\beta$ obteniendo,

$$\bar{\Lambda}^{+}(t) - \bar{\Lambda}^{+}(\infty) = \frac{E_0}{c}\Delta\beta + \mathcal{O}(\Delta\beta^2), \tag{6.3.19}$$

donde

$$c \equiv 2\cosh^2(\beta(\infty)E_0). \tag{6.3.20}$$

Si definimos el tiempo de termalización como

$$\widetilde{\tau}_\epsilon(N) \equiv min\{\tilde{\mathrm{t}} \setminus \forall t > \tilde{t}, E_0\,|\beta(t) - \beta(\infty)| \leq \epsilon\}, \tag{6.3.21}$$

y consideramos la Ec.(6.3.19), vemos que el mismo está relacionado con el tiempo de mezclado mediante:

$$\tau_\epsilon(N) \approx \widetilde{\tau}_{c\epsilon}(N), \tag{6.3.22}$$

es decir que, en tiempos para los cuales el tiempo de mezclado está definido con una precisión ϵ, el tiempo de termalización está determinado con precisión $c\epsilon$. Considerando la Ec.(6.2.8), y la definición dada para el tiempo de mezclado, vemos que $\tau_\epsilon = \mathcal{O}(1/\epsilon)$, en acuerdo con la dependencia establecida en la literatura [2]. Así, si definimos $\widetilde{\tau}_\epsilon$ mediante $E_0\,|\Delta\beta(\widetilde{\tau}_\epsilon)| \simeq \epsilon$ y haciendo uso del orden mencionado para el tiempo de mezclado, y de la Ec.(6.3.22) obtenemos

$$\frac{1}{\widetilde{\tau}_\epsilon} \simeq \frac{E_0}{c}\,|\Delta\beta(\widetilde{\tau}_\epsilon)| \simeq \frac{\epsilon}{c} \simeq \frac{1}{\tau_\epsilon c},$$

y por lo tanto

$$\tau_\epsilon \approx \widetilde{\tau}_\epsilon/c. \tag{6.3.23}$$

Esta ecuación nos permite relacionar los dos tiempos característicos cuando los mismos están definidos con la misma precisión. Vemos que hay una relación lineal entre los tiempos de mezclado y termalización donde el factor de proporcionalidad depende únicamente de $\beta(\infty)$, el inverso de la temperatura asintótica; así, para valores chicos de $\beta(\infty)$ (temperaturas asintóticas grandes) ambos tiempos tienen magnitudes comparables, mientras que para valores grandes (temperaturas asintóticas chicas) el tiempo de mezclado es una pequeña fracción del tiempo de termalización.

El resultado encontrado nos permite reinterpretar el tiempo de mezclado desde un punto de vista más físico; el mismo resulta, en general, difícil de estudiar, existiendo en la literatura diversas cotas para establecer sus dependencias, por ejemplo, con N y

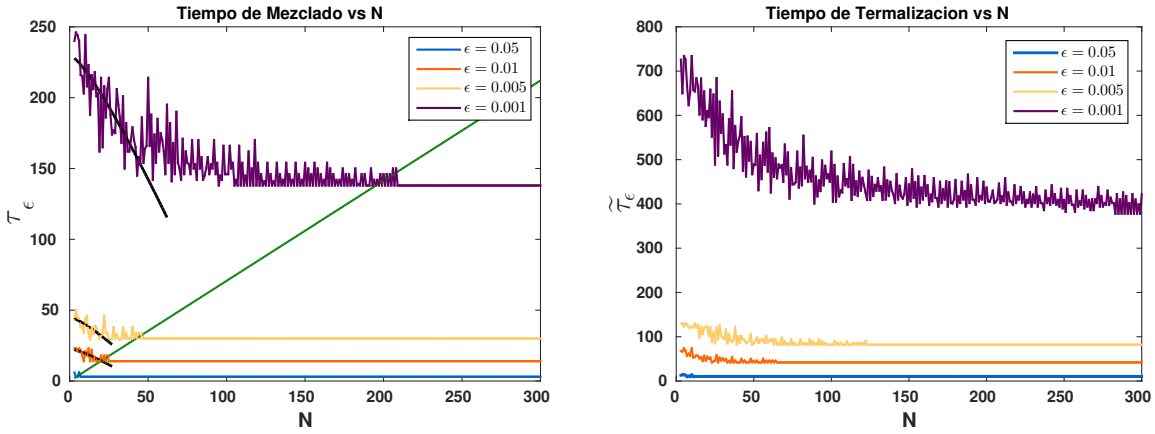

Figura 6.4.: **Tiempos Característicos I**. Se grafican cuatro curvas del tiempo de mezclado (panel izquierdo) y del tiempo de termalización (panel derecho) como función de N para distintos valores del parámetro ϵ, todas correspondientes a la condición inicial $\gamma = \pi/3$, $\varphi = \pi/6$ para una moneda de Hadamard. En el panel izquierdo, las líneas en color negro corresponden al ajuste de τ_ϵ con una función de la forma $a + bN\log(N)$, mientras que la línea en color verde es el tiempo que demoran los frentes de onda en interferir por primera vez. Los coeficientes de correlación son de arriba a abajo $R \simeq 0{,}82,\ 0{,}7,\ 0{,}69$. El comportamiento de $\tau_\epsilon = \mathcal{O}(1/\epsilon)$ para valores grandes de N (Fig.6.5).

ϵ [2]. Por otro lado, el tiempo de termalización no sólo es un concepto más natural en cuanto a su uso en diversos sistemas físicos que alcanzan el equilibrio termodinámico, sino que además es más sencillo de evaluar, dado que se trata de estudiar la diferencia entre dos escalares, mientras que el tiempo de mezclado está definido sobre la norma de la diferencia de dos operadores. A modo de ejemplo, vamos a estudiar a continuación la dependencia de $\tau_\epsilon(N, \epsilon)$ de forma numérica.

La Fig.6.4 muestra cuatro curvas del tiempo de mezclado (panel izquierdo) y del tiempo de termalización (panel derecho) en función del número de puntos sobre el N-ciclo para distintos valores de ϵ. Las curvas correspondientes al mismo valor de ϵ presentan comportamientos similares, difiriendo básicamente en un factor de escala (ver Fig.6.6). Vemos que τ_ϵ no depende de N para valores suficientemente grandes, dependiendo esto último de la precisión con la cual se quiere definir el tiempo. Como se puede ver para $\epsilon = 0{,}05$, τ_ϵ alcanza su valor límite en pocas unidades de N, mientras que para una precisión 50 veces más pequeña, se requiere poco más de 200 unidades de N para llegar al correspondiente valor asintótico. Si consideramos los resultados previos, en los cuales

vimos que podemos re-obtener el comportamiento asintótico sobre la línea en el límite de N grande, podemos pensar que, dado ϵ, el sistema se comporta como la línea a partir de un valor de N y por lo tanto pierde la dependencia con el número de puntos sobre la red. Para justificar esto, observemos cuál es el comportamiento de las curvas en relación a la recta en color verde. Esta cuantifica de forma aproximada, cuánto tiempo le lleva a los frentes asociados a espín hacia arriba y hacia abajo encontrarse e interferir por primera vez en el punto diametralmente opuesto a la posición inicial; llamemos a este tiempo t_{int}. Si el ciclo tiene N puntos, entonces t_{int} queda definido por $N/2 \simeq t_{int}/\sqrt{2}$, o sea $t_{int} \simeq N/\sqrt{2}$, relación que da origen a la recta graficada. Como se puede observar, cuando el tiempo de mezclado coincide con t_{int} el comportamiento se estabiliza; es decir que, cuando el tiempo requerido para que el estado del sistema esté a ϵ de su límite asintótico es menor o igual a t_{int}, los frentes no llegan a interferir y por lo tanto, para ese valor de ϵ, el sistema se comporta tal y como si fuera la línea, perdiendo así su dependencia con N. De esta forma la recta que define a t_{int} actúa claramente como separatriz del comportamiento sobre el N-ciclo y sobre la línea, y así las curvas de la Fig.6.4 permiten establecer, dado ϵ, a partir de qué N el sistema se mezcla como la línea. Además, vemos que el comportamiento de las curvas es, en promedio, monótono decreciente en concordancia con lo observado a partir de la Fig.6.3. Para intentar explicar este comportamiento, recordemos en primer lugar que, dado ϵ, encontramos en el análisis del régimen estacionario que el estado asintótico del N-ciclo rápidamente se torna independiente de N, correspondiendo a la línea (el valor exacto depende claramente de ϵ), y por lo tanto la distancia medida en el intervalo definido a partir de ese N para calcular el *tiempo de mezclado* es siempre respecto al mismo estado asintótico. Luego, al tomar $N_2 > N_1$ en el intervalo mencionado, el sistema evoluciona durante más tiempo sin interferir lo cual le brinda la posibilidad de acercarse antes al estado asintótico. La explicación dada es claramente cualitativa y no permite entender las variaciones mostradas en las curvas al cambiar N. Para entender esto, es posible que sea necesario un análisis más profundo de las interferencias presentes en el N-ciclo. Considerando todo lo mencionado previamente, realizamos un ajuste del tipo $N\log(N)$ (línea en color negro) en la región donde la concavidad de la función es negativa, correspondiente a valores chicos de N en relación al valor a partir del cual la función se estabiliza, o sea, en la región donde esperamos que el comportamiento del N-ciclo sea aún preponderante. Es interesante observar que, cuanto mayor es la precisión con la cual se desea calcular el *tiempo de mezclado*, mejor es el ajuste, encontrando así el comportamiento reportado en la literatura. Para finalizar el análisis de estas curvas investigamos cuál es el comportamiento de τ_ϵ con ϵ para dos valores de N correspondientes al N-ciclo y a la línea. La Fig.6.5 muestra la relación entre

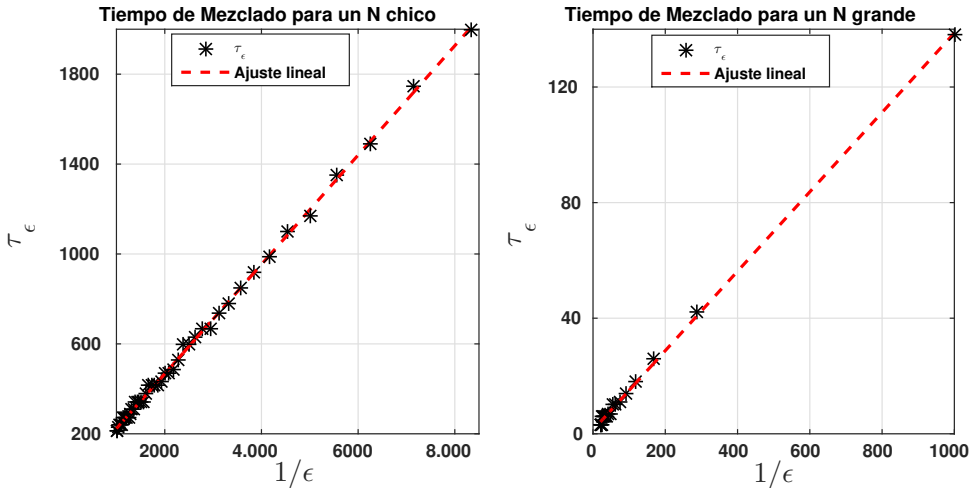

Figura 6.5.: **Tiempo Característicos II.** Se grafica el *tiempo de mezclado* vs $1/\epsilon$ en dos casos: (izquierda) N es chico correspondiente al N-ciclo, (derecha) N es grande correspondiente a la línea. Los asteriscos en color negro corresponden al calculo numérico, mientras que la línea discontinua en color rojo corresponde al ajuste lineal de los datos. El ajuste para ambos casos posee un coeficiente de correlación de $R \approx 0{,}99$. Así $\tau_\epsilon = \mathcal{O}(1/\epsilon)$ tanto para el N-ciclo como para la línea.

el *tiempo de mezclado* y $1/\epsilon$, donde separamos en dos casos en función de la discusión previa. Así, tomamos tomamos $N = 5$ y $\epsilon \in [10^{-4}, 10^{-3}]$ para el N-ciclo (panel izquierdo) y $N = 250$ con $\epsilon \in [10^{-3}, 10^{-2}]$ para la línea. De la misma se desprende que $\tau_\epsilon = \mathcal{O}(1/\epsilon)$ en ambos casos, que como ya mencionamos, se debe a $\|\bar{\rho}_c(t) - \bar{\rho}_c(\infty)\| \sim 1/t$. Del análisis conjunto de la dependencia de $\tau_\epsilon(N)$ se desprende que el mismo se comporta como $\tau_\epsilon(N) = \mathcal{O}(\frac{N \log(N)}{\epsilon})$ para valores chicos de N y de ϵ, en acuerdo con lo reportado para el CC sobre el N-ciclo. Sería interesante en trabajos futuros, calcular a partir del trabajo de Romanelli [42], qué comportamiento tiene el *tiempo de mezclado* del CC sobre la línea y comparar así los resultados aquí encontrados cuando $N \to \infty$.

Habiendo verificado numéricamente que $\tau_\epsilon = \mathcal{O}(1/\epsilon)$, podemos estudiar numéricamente a partir de la Fig.6.4 la aproximación realizada para relacionar ambos tiempos mediante la Ec.(6.3.23). Recordemos que para obtener esta relación consideramos el comportamiento del *tiempo de mezclado* con ϵ y tomamos tiempos grandes, de forma tal de validar el desarrollo realizado en la Ec.(6.3.19). La Fig.6.6 muestra el cálculo numérico de la constante de proporcionalidad entre los tiempos de termalización y mezclado en color azul, y se grafica en color negro el valor teórico de dicha constante, dado por la Ec.(6.3.20). Esta última, como podemos ver, tiene una leve dependencia con N para valores chicos,

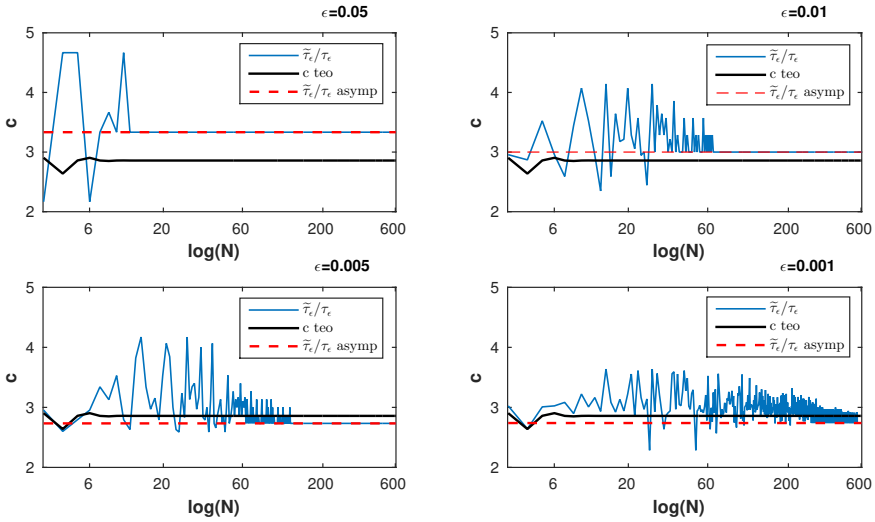

Figura 6.6.: **Comportamiento de la Constante c.** Se grafican los cocientes entre los tiempos de termalización y mezclado . Tomando el promedio en N del valor numérico de c cuando $N \to \infty$, el error relativo porcentual del mismo respecto al calculado teóricamente es: 16.6 %, 5.0 %, 4.4 % y 4.2 % en orden decreciente de ϵ.

y se estaciona rápidamente en su valor asintótico, comportamiento que hereda de la función $f(N)$ que define la dependencia en N del equilibrio termodinámico del sistema. La curva azul por su parte, posee una dependencia más fuerte con N heredada, claramente, del tiempo de termalización. Si tomamos el valor asintótico de la curva azul (graficado en rojo), el error relativo porcentual entre la constante numérica y teórica disminuye al tomar valores decrecientes de ϵ. Esto tiene sentido si consideramos que, al tomar ϵ más pequeño, se requiere de tiempos más grandes para que el sistema termalice, y por lo tanto es más precisa la relación lineal usada en la Ec.(6.3.19).

En la siguiente sección vamos a estudiar el régimen transitorio del CC, en el caso particular en el cual $Q = 0$, y por lo tanto el sistema evoluciona de forma difusiva como un proceso Markoviano.

6.3.3. Comportamiento Markoviano del CC sobre el N-Ciclo

En el Cap.5, Ec.(5.1.3) vimos que el mapa que da la evolución de la *distribución global de quiralidad* tanto para el CC sobre la línea como para el correspondiente sobre el N-ciclo está dado por

$$\begin{bmatrix} P_L(t+1) \\ P_R(t+1) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2(\theta) & \sin^2(\theta) \\ \sin^2(\theta) & \cos^2(\theta) \end{pmatrix} \begin{bmatrix} P_L(t) \\ P_R(t) \end{bmatrix} + \Re\left[Q(t)\right] \sin(2\theta) \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix},$$

donde mencionamos que $Q(t)$ es un término de interferencia característico de los sistemas cuánticos. Cuando dicho término se anula, el comportamiento del sistema es análogo al de un proceso Markoviano, donde $[P_{mL}(t), P_{mR}(t)]$ queda definido por una evolución tipo difusiva dada por

$$\begin{bmatrix} P_{mL}(t+1) \\ P_{mR}(t+1) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2(\theta) & \sin^2(\theta) \\ \sin^2(\theta) & \cos^2(\theta) \end{pmatrix} \begin{bmatrix} P_{mL}(t) \\ P_{mR}(t) \end{bmatrix}, \tag{6.3.24}$$

y agregamos el subíndice m para hacer hincapié en el carácter Markoviano del sistema. Diagonalizando la matriz de transición que queda definida, obtenemos que la misma tiene valores y vectores propios dados por,

$$\begin{cases} \lambda_1 = 1 & v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\ \lambda_2 = \cos(2\theta) & v_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \end{cases}, \tag{6.3.25}$$

de forma tal que la solución de la Ec.(6.3.24) es [41]

$$\begin{bmatrix} P_{mL}(t) \\ P_{mR}(t) \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+\cos^t(2\theta) & 1-\sin^t(2\theta) \\ 1-\sin^t(2\theta) & 1+\cos^t(2\theta) \end{pmatrix} \begin{bmatrix} P_{mL}(0) \\ P_{mR}(0) \end{bmatrix}, \tag{6.3.26}$$

la cual al desarrollarla nos da

$$\begin{bmatrix} P_{mL}(t) \\ P_{mR}(t) \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1+\cos^t(2\theta)\left(1-2P_{mR}(0)\right) \\ 1-\cos^t(2\theta)\left(1-2P_{mR}(0)\right) \end{bmatrix}. \tag{6.3.27}$$

Dado que $\theta \in [0, \pi/2]$, podemos ver que para cualquier valor distinto de 0 y $\pi/2$, $|\cos(2\theta)| < 1$, con lo cual el límite asintótico del proceso Markoviano es

$$\begin{bmatrix} P_{mL}(t) \\ P_{mR}(t) \end{bmatrix} \underset{t\to\infty}{\to} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}. \tag{6.3.28}$$

El resultado es esperable si consideramos el comportamiento de un sistema difusivo como el presentado en el Cap.3, para el cual la distribución de probabilidad límite es uniforme e independiente del estado inicial si la red que define al sistema es irreducible y aperiódica. En lo que respecta a $\theta = 0$ y $\theta = \pi/2$, si observamos nuevamente la Ec.(6.3.24)

vemos que las matrices de transición correspondientes son

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

de manera que el vector de probabilidad inicial no evoluciona, en el primer caso, mientras que oscila entre los estados $[P_{mL}(0), P_{mR}(0)]$ y $[P_{mR}(0), P_{mL}(0)]$ en el segundo. Así, el primer caso correspondería a un tiempo de termalización nulo, mientras que el segundo no termaliza (no alcanza un equilibrio).

Si, como venimos haciendo, suponemos que la matriz densidad reducida del proceso Markoviano viene dada por la distribución canónica, entonces las entradas diagonales $[P_{mL}(t), P_{mR}(t)]$ quedan definidas mediante

$$P_{mL}(t) = \frac{\exp(\beta_m E_0)}{\exp(\beta_m E_0) + \exp(-\beta_m E_0)}, \tag{6.3.29}$$

$$P_{mR}(t) = \frac{\exp(-\beta_m E_0)}{\exp(\beta_m E_0) + \exp(-\beta_m E_0)}, \tag{6.3.30}$$

donde definimos el inverso de la temperatura, $\beta_m(t)$, la cual está dada por

$$\beta_m(t) = \frac{1}{2E_0} \ln\left(\frac{1 + \cos^t(2\theta)(1 - 2P_{mR}(0))}{1 - \cos^t(2\theta)(1 - 2P_{mR}(0))}\right). \tag{6.3.31}$$

Considerando esta expresión analítica para $\beta_m(t)$, podemos calcular el tiempo de termalización del caminante en este caso, y dado que el mismo está relacionado con el *tiempo de mezclado*, obtenemos también este último. En primer lugar, observemos que el argumento del logaritmo tiende a 1 para tiempos grandes, de modo que la temperatura asintótica del sistema va a infinito ($\beta_m(t) \underset{t\to\infty}{\to} 0$). Este resultado está de acuerdo con el comportamiento mostrado en la Fig.5.1 y corresponde, según vimos previamente, a un caso en el cual $\tau_\epsilon \simeq \widetilde{\tau}_\epsilon$. Luego, el tiempo de termalización queda definido por $E_0 \left|\beta_m(\widetilde{\tau}_\epsilon)\right| \simeq \epsilon$. Supongamos que $\widetilde{\tau}_\epsilon \gg 1$ (o equivalentemente, $\epsilon \ll 1$) de modo que

$$2E_0\beta_m(\widetilde{\tau}_\epsilon) = \ln\left(1 + \cos^{\widetilde{\tau}_\epsilon}(2\theta)(1 - 2P_{mR}(0))\right) - \ln\left(1 - \cos^{\widetilde{\tau}_\epsilon}(2\theta)(1 - 2P_{mR}(0))\right) \simeq$$
$$\simeq 2\cos^{\widetilde{\tau}_\epsilon}(2\theta)(1 - 2P_{mR}(0)). \tag{6.3.32}$$

Así, usando la Ec.(6.3.21), podemos calcular explícitamente el tiempo de termalización como sigue:

$$\widetilde{\tau}_\epsilon \simeq \frac{\ln(\epsilon) - \ln\left(|1 - 2P_{mR}(0)|\right)}{\ln\left(|\cos(2\theta)|\right)}. \tag{6.3.33}$$

Vemos que, a diferencia del caso $Q \neq 0$, $\widetilde{\tau}_\epsilon$ no depende de N incluso para valores chicos, mientras que depende de ϵ como $\log(\epsilon)$, de modo que $\widetilde{\tau}_\epsilon \simeq \mathcal{O}(\log(1/\epsilon))$. Considerando que el *tiempo de mezclado* en este caso está relacionado con el de termalización mediante $\tau_\epsilon \simeq \widetilde{\tau}_\epsilon/2$, observamos entonces que recuperamos el comportamiento en ϵ del *tiempo de mezclado* para un sistema Markoviano, mientras que el resultado no reproduce la dependencia en N.

7. Conclusiones y Perspectivas

El trabajo desarrollado en esta tesis consistió en investigar el caminante cuántico (CC) sobre un grafo finito como lo es el N-ciclo. Para abordar el estudio del CC sobre el N-ciclo, realizamos un desarrollo analítico para resolver las principales ecuaciones del sistema, las cuales dan la evolución de los coeficientes que definen el espín del caminante en cada tiempo y para cada posición espacial. El mismo se basó en desacoplar estas ecuaciones (Ecs.(6.1.1a,6.1.1b)) encontrando así la evolución para cada uno de estos coeficientes (espín hacia arriba y abajo), que, mediante un cambio de variables adecuado, conduce de forma sencilla a una solución analítica. A partir de esta pudimos construir el principal objeto de interés del trabajo, la matriz densidad reducida que, como vimos, define la *distribución global de quiralidad* (DGQ). Dado que dicho operador no posee un límite asintótico, trabajamos con la *distribución de probabilidad promediada* y encontramos que la misma se puede escribir en dos partes: una parte asintótica independiente del tiempo, y una parte oscilatoria en el tiempo que tiende a cero en el límite $t \to \infty$. Es importante destacar sobre este punto, que el comportamiento encontrado es válido para cualquier condición inicial del caminante, tanto localizadas como extendidas. Considerando la separación temporal del estado definido, dividimos el estudio termodinámico en dos regímenes: el régimen estacionario, estudiado a partir de la parte asintótica del estado, y el régimen transitorio considerando la dependencia temporal del mismo. En ambos casos asociamos el ensemble canónico a la matriz densidad y centramos nuestra atención en el estudio de la temperatura de enredo. Todos los resultados obtenido a partir de aquí fueron realizados para condiciones iniciales localizadas.

Para el régimen estacionario, pudimos encontrar de forma analítica el estado asintótico de la DGQ, destacando sobre este resultado que las expresiones analíticas halladas son válidas para cualquier condición inicial localizada (γ, φ), para cualquier sesgo que define la moneda (θ) y para un número arbitrario de puntos sobre el N-ciclo (N). Esto va a permitir tomar estos resultados como punto de partida en trabajos posteriores, por ejemplo, para estudiar qué pasa para monedas distintas a la de Hadamard. Al asociar el ensemble canónico, calculamos también analíticamente la función $\chi(\gamma, \varphi, \theta, N)$ la cual nos permite encontrar cualquier función termodinámica del problema. Vimos que la dependencia en

N es a través de la función $f(N,\theta)$ introducida, la cual tiene un comportamiento muy débil con N, alcanzando rápidamente su valor asintótico. Estudiamos gráficamente qué estructura presentan las isotermas del sistema en un diagrama (γ,φ) en el caso de una moneda de Hadamard ($\theta=\pi/4$) para distintos valores de N. Dicha estructura presenta una simetría $(\gamma,\varphi)\to(\pi-\gamma,\varphi+\pi)$ que deja en manifiesto que la dinámica de puntos diametralmente opuestos sobre la esfera de Bloch es exactamente la misma. Esto se debe a que físicamente el sistema es idéntico si el caminante parte de uno u otro estado, siendo uno el rotado del otro. En concordancia con lo mencionado sobre la función $f(N,\theta)$, observamos que las isotermas graficadas presentan una débil dependencia con N, encontrando para unas pocas unidades una estructura bien semejante a la reportada para el caso de la línea. Más aún, vimos que la expresión analítica encontrada para $\chi(\gamma,\varphi,\theta,N)$ tiende a la correspondiente a la línea cuando $N\to\infty$, lo cual brinda gran consistencia al método desarrollado.

En el caso del régimen transitorio, estudiamos fundamentalmente los tiempos característicos en los cuales el sistema alcanza el equilibrio. Para ello trabajamos en primer lugar con el *tiempo de mezclado*, típicamente usado en la literatura y reportado, para el caso del N-ciclo, como $\tau_\epsilon=\mathcal{O}(\frac{N\log(N)}{\epsilon})$. Al introducir una noción particular de distancia entre estados, pudimos relacionar el tiempo de mezclado con un segundo tiempo que caracteriza la convergencia asintótica del sistema, el *tiempo de termalización*. Vimos que para tiempos grandes, o equivalentemente valores pequeños de ϵ, ambos tiempos están linealmente relacionados, donde la constante de proporcionalidad depende únicamente de la temperatura asintótica del sistema. Encontramos que para valores chicos de la temperatura asintótica el *tiempo de mezclado* es sólo una pequeña fracción del *tiempo de termalización*, mientras que si la temperatura asintótica es grande, entonces ambos tiempos son comparables. Al analizar gráficamente el comportamiento de los tiempos con el número de puntos en el N-ciclo, vimos que las curvas correspondientes a ambos son, en promedio, monótonas decrecientes y que, para N grande alcanzan valores asintóticos correspondientes al comportamiento del CC sobre la línea. Esto pudimos justificarlo poniendo en consideración la interferencia que se da entre los frentes de onda que se propagan hacia uno y otro lado sobre el N-ciclo, encontrando que el *tiempo de mezclado* se estabiliza cuando coincide con el tiempo que le lleva a dicho frentes encontrarse por primera vez. Para estudiar y comparar el *tiempo de mezclado* con resultados previos, ajustamos las curvas con una función del tipo $N\log(N)$ encontrando que la correlación aumenta a medida que se define con mayor precisión τ_ϵ. Por otro lado vimos que tanto para valores grandes como para valores chicos de N, correspondientes a la línea y al N-ciclo respectivamente, la relación entre el *tiempo de mezclado* y ϵ es $\tau_\epsilon=\mathcal{O}(1/\epsilon)$.

De esta forma verificamos que para el N-ciclo $\tau_\epsilon = \mathcal{O}(\frac{N\log(N)}{\epsilon})$. Estudiamos también de forma numérica la relación existente entre los dos tiempos característicos introducidos; estos están relacionados básicamente por un factor de escala que tiende a la constante de proporcionalidad definida en el límite en que $\epsilon \to 0$, es decir, para tiempo grandes. Finalmente estudiamos el análogo clásico del sistema, el cual obtuvimos al imponer que el término asociado a las interferencias cuánticas fuera nulo. En este caso, la evolución del sistema pasa a ser del tipo difusiva con un único límite asintótico uniforme definido, característico de los procesos Markovianos. Calculamos explícitamente el *tiempo de termalización* y dado que para este caso se tiene $\tau_\epsilon \simeq \widetilde{\tau}_\epsilon$, encontramos que el tiempo de mezclado es de orden $\mathcal{O}(\log(1/\epsilon))$, en concordancia con el caminante aleatorio sobre el N-ciclo.

En lo que respecta a trabajos futuros, un punto relevante sería avanzar en la conceptualización de la temperatura de enredo, tanto mediante la comparación con sistemas análogos así como también extendiendo la metodología empleada aquí para otras redes finitas. Esto puede ayudar a comprender y conceptualizar mejor varios de los comportamientos reportados en este trabajo. En cuanto a la continuidad específica del trabajo, sería bueno estudiar qué ocurre con el sistema al emplear otras monedas, dado que en general los trabajos realizados sobre la temática tratan sólo el caso de la moneda de Hadamard. Por el mismo motivo sería interesante también estudiar qué ocurre cuando se consideran condiciones iniciales extendidas. Este punto puede además ayudar a comprender mejor las interferencias existentes sobre el N-ciclo al considerar condiciones iniciales definidas básicamente sobre uno de los modos del sistema. Esto permitiría tener un mejor control de las longitudes de onda excitadas asociadas a la geometría utilizada, y en función de ello estudiar cómo se dan las interferencias de los frentes de onda al variar el número de puntos sobre el N-ciclo. Por último, sería interesante verificar cuáles con los valores que toman los tiempos de mezclado y termalización del CC sobre la línea para confrontar dichos resultados con los obtenidos en nuestro trabajo, los cuales toman valores constantes para N grande.

Parte III.

Apéndices

Apéndice A. Diagonalización del Operador Evolución: CC sobre la línea

Sea $U = S\,(H \otimes \mathbb{I}_x)$ el operador evolución del sistema, con H la matriz de Hadamard y S definido como en el Cap.4. Vamos a buscar la base que diagonaliza a este operador.

Para ello introduzcamos la transformada de Fourier discreta actuando sobre los elementos de la base $\{|n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}}$, para definir una nueva base en el espacio de Fourier la cual denotaremos como $\{|k\rangle\}_{k\in\mathbb{N}}$. Sus elementos estan dados por

$$|k\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(\imath k n)\,|n\rangle\,, \tag{7.0.1}$$

mientras que su inversa queda definida mediante

$$|n\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \exp(-\imath k n)\,|k\rangle\,. \tag{7.0.2}$$

Supongamos que tenemos un estado puro con la forma

$$|\psi(n,t)\rangle = \sum_{s=0}^{1}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_s(n,t)\,|s\rangle\,|n\rangle\,, \tag{7.0.3}$$

donde $s = \{0,1\}$ representa respectivamente a los estados del espín arriba y abajo[1]. Escribamos entonces $|n\rangle$ como en la Ec.(7.0.2). Así el estado $|\psi(n,t)\rangle$ queda escrito en la base de Fourier como sigue:

$$|\psi(k,t)\rangle = \sum_{s=0}^{1}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi}\psi_s(k,t)\,|s\rangle\,|k\rangle\,, \tag{7.0.4}$$

donde hemos definido $\psi_s(k,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-\imath n k)\psi_s(x,t)$. Precisamos saber cómo actúa

[1] Para facilitar la notación, hacemos el cambio $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ por $|0\rangle$ y $|1\rangle$ para los elementos de la base canónica del espacio de la moneda.

el operador U sobre los elementos de la base $\{|s\rangle\,|k\rangle\}_{s,k}$. Veamos primero qué acción tiene S sobre dichos estados. Dado que sabemos que actúa sobre los estados $\{|s\rangle\,|n\rangle\}_{s,n}$ como

$$S\,|s\rangle\,|n\rangle = |s\rangle\,|n-(-1)^s\rangle\,,$$

entonces

$$S\,|s\rangle\,|k\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(\imath kn) S\,|s\rangle\,|n\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(\imath kn) S\,|s\rangle\,|n-(-1)^s\rangle\,.$$

Redefiniendo el índice en la expresión anterior obtenemos

$$\begin{aligned} S\,|s\rangle\,|k\rangle &= \exp((-1)^s \imath k)\,|s\rangle \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(ikn)\,|n\rangle = \\ &= \exp((-1)^s \imath k)\,|s\rangle\,|k\rangle\,. \end{aligned} \tag{7.0.5}$$

De esta forma vemos que $|s\rangle\,|k\rangle$ es vector propio de S con valor propio $\exp((-1)^s \imath k)$. Ahora podemos analizar cómo actúa U sobre estos estados.

$$\begin{aligned} U\,|s'\rangle\,|k'\rangle = SH\,|s'\rangle\,|k'\rangle = S\left(\sum_{s=0}^{1} H_{ss'}\,|s\rangle\right)|k'\rangle = \\ = \sum_{s=0}^{1} \exp((-1)^s \imath k') H_{ss'}\,|s\rangle\,|k'\rangle\,, \end{aligned} \tag{7.0.6}$$

con $H_{ss'}$ los elementos del operador de Hadamard. Así, vemos que los correspondientes al operador U en la base $\{|s\rangle\,|k\rangle\}_{s,k}$ son

$$\langle s|\,\langle k|\,U\,|s'\rangle\,|k'\rangle = \exp((-1)^s \imath k') H_{ss'} \delta_{kk'}, \tag{7.0.7}$$

con lo cuál su representación matricial tiene la siguiente forma:

$$U = \begin{pmatrix} \widetilde{H}_1 & 0 & . & . & 0 & . \\ 0 & \widetilde{H}_2 & 0 & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ 0 & . & . & . & \widetilde{H}_N & . \\ . & . & . & . & . & . \end{pmatrix}, \tag{7.0.8}$$

con

$$\widetilde{H}_k = \begin{pmatrix} \exp(\imath k) & 0 \\ 0 & \exp(-\imath k) \end{pmatrix} H = \begin{pmatrix} \exp(\imath k)/\sqrt{2} & \exp(\imath k)/\sqrt{2} \\ \exp(-\imath k)/\sqrt{2} & \exp(-\imath k)/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \tag{7.0.9}$$

y $\mathtt{0}$ una matríz nula de dimensión 2×2. Luego, si podemos diagonalizar el operador $\widetilde{H}_k$ correspondiente al modo k en el espacio de la moneda, obtendremos la base de vectores propios que diagonaliza a U. Es fácil ver que los valores propios de $\widetilde{H}_k$ vienen dados por

$$\lambda_k = \begin{cases} \exp(\imath\omega_k) \\ \exp(-\imath(\omega_k + \pi)) \end{cases}, \tag{7.0.10}$$

y sus correspondientes vectores propios por

$$|\alpha_k\rangle = \frac{1}{C_1} \begin{bmatrix} \exp(\imath k) \\ \sqrt{2}\exp(\imath\omega_k) - \exp(\imath k) \end{bmatrix}, \tag{7.0.11}$$

$$|\beta_k\rangle = \frac{1}{C_2} \begin{bmatrix} \exp(\imath k) \\ -\sqrt{2}\exp(-\imath\omega_k) - \exp(\imath k) \end{bmatrix}, \tag{7.0.12}$$

donde C_1 y C_2 son constantes de normalización y ω_k viene dado por la relación de dispersión del sistema,

$$\sin(\omega_k) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin(k). \tag{7.0.13}$$

Apéndice B.

Operador Densidad en Base de Fourier

Vamos a desarrollar aquí algunos de los resultados que fueron presentados en el Cap.4. Vimos que podemos escribir el operador densidad reducido en la base de Fourier mediante

$$P_L(t) = \sum_k \left|c_k^L(t)\right|^2,$$
$$P_R(t) = \sum_k \left|c_k^R(t)\right|^2,$$
$$Q(t) = \sum_k c_k^L(t) c_k^{R*}(t),$$

y desarrollamos en el texto el cálculo correspondiente a $P_L(t)$. El de $P_R(t)$ es exactamente igual, cuidando de utilizar el supraíndice correcto, con lo cual sólo enunciaremos aquí estos resultados, y desarrollaremos en detalle el cálculo para $Q(t)$. Así

$$P_L(t) = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\left|\alpha_k^L\right|^2 + \left|\beta_k^L\right|^2 + (-1)^t 2\Re\left\{\alpha_k^L \beta_k^{L*} \exp(2\imath\Omega_k t)\right\}\right], \tag{7.0.14}$$

$$P_R(t) = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\left|\alpha_k^R\right|^2 + \left|\beta_k^R\right|^2 + (-1)^t 2\Re\left\{\alpha_k^R \beta_k^{R*} \exp(2\imath\Omega_k t)\right\}\right], \tag{7.0.15}$$

y

$$Q(t) = \sum_k \left(\alpha_k^L \exp(\imath\Omega_k t) + \beta_k^L (-1)^t \exp(-\imath\Omega_k t)\right)\left(\alpha_k^{R*} \exp(-\imath\Omega_k t) + \beta_k^{R*} (-1)^t \exp(\imath\Omega_k t)\right) =$$
$$= \sum_{k=0}^{N-1} \left[\alpha_k^L \alpha_k^{R*} + \beta_k^L \beta_k^{R*} + (-1)^t \left(\alpha_k^L \beta_k^{R*} \exp(2\imath\Omega_k t) + \alpha_k^{R*} \beta_k^L \exp(-2\imath\Omega_k t)\right)\right]. \tag{7.0.16}$$

Calculemos ahora las distribuciones promediadas en el tiempo al aplicar la DPP. Las

mismas quedan de la siguiente manera (nuevamente los cálculos para $P_L(t)$ y $P_R(t)$ son idénticos):

$$\overline{P}_L(t) = \sum_k \left(\left|\alpha_k^L\right|^2 + \left|\beta_k^L\right|^2 \right) + \frac{2}{t}\xi^L(t), \tag{7.0.17}$$

$$\overline{P}_L(t) = \sum_k \left(\left|\alpha_k^L\right|^2 + \left|\beta_k^L\right|^2 \right) + \frac{2}{t}\xi^R(t), \tag{7.0.18}$$

con $\xi^{L,R} = \sum_{k=0}^{N-1} \Re\left\{\alpha_k^{L,R}\beta_k^{L,R*}\mathfrak{F}_k(t)\right\}$, y $\mathfrak{F}_k(t) = \frac{1-\exp((2\Omega_k+\pi)\imath t)}{1+\exp(2\imath\Omega_k)}$. Por su parte el cálculo para $\overline{Q}(t)$ es,

$$\overline{Q}(t) = \frac{1}{t}\sum_{t'=0}^{t-1} Q(t) =$$

$$= \sum_k \left[\alpha_k^L\alpha_k^{R*} + \beta_k^L\beta_k^{R*} + \frac{1}{t}\sum_{t'=0}^{t-1}(-1)^{t'}\left(\alpha_k^L\beta_k^{R*}\exp(2\imath\Omega_k t) + \alpha_k^{R*}\beta_k^L\exp(-2\imath\Omega_k t)\right)\right].$$

De forma análoga a como hicimos en el texto,

$$\sum_k \sum_{t'=0}^{t-1} \left(\alpha_k^L\beta_k^{R*}\exp\left((2\Omega_k+\pi)\imath t\right) + \alpha_k^{R*}\beta_k^L\exp\left((-2\Omega_k-\pi)\imath t\right)\right) =$$

$$= \sum_k \left(\alpha_k^L\beta_k^{R*}\left[\frac{1-\exp\left((2\Omega_k+\pi)\,\imath t\right)}{1+\exp\left(2\imath\Omega_k t\right)}\right] + \alpha_k^{R*}\beta_k^L\left[\frac{1-\exp\left((-2\Omega_k-\pi)\,\imath t\right)}{1+\exp\left(-2\imath\Omega_k t\right)}\right]\right).$$

donde hemos hecho uso del desarrollo de la progresión geométrica. Así, obtenemos:

$$\overline{Q}(t) = \sum_{k=0}^{N-1}\left(\alpha_k^L\alpha_k^{R*} + \beta_k^L\beta_k^{R*}\right) + \frac{2}{t}\varsigma(t), \tag{7.0.19}$$

con $\varsigma(t) = \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{N-1}\left(\alpha_k^L\beta_k^{R*}\mathfrak{F}_k(t) + \alpha_k^{R*}\beta_k^L\mathfrak{F}_k^*(t)\right)$. De esta manera, el estado del espín promediado en el tiempo tiene la siguiente forma:

$$\overline{\rho}_c(t) = \overline{\rho}_c(\infty) + \frac{2}{t}\begin{pmatrix}\xi^L(t) & \varsigma(t)\\ \varsigma^*(t) & \xi^R(t)\end{pmatrix}, \tag{7.0.20}$$

donde $\overline{\rho}_c(\infty)$ es el límite asintótico y viene dado por

$$\overline{\rho}_c(\infty) = \begin{pmatrix} \Pi_L & Q_0 \\ Q_0^* & \Pi_R \end{pmatrix}, \tag{7.0.21}$$

con

$$\begin{aligned} \Pi_L =& \sum_{k=0}^{N-1} \left(\left|\alpha_k^L\right|^2 + \left|\beta_k^L\right|^2 \right), \\ \Pi_R =& \sum_{k=0}^{N-1} \left(\left|\alpha_k^R\right|^2 + \left|\beta_k^R\right|^2 \right), \\ Q_0 =& \sum_{k=0}^{N-1} \left(\alpha_k^L \alpha_k^{R*} + \beta_k^L \beta_k^{R*} \right). \end{aligned} \tag{7.0.22}$$

Observemos que la función oscilatoria $\xi^L(t)$ es tal que

$$\frac{1}{t}\xi^L(t) = \frac{1}{t} \sum_{k=0}^{N-1} 2\Re \left\{ \alpha_k^L \beta_k^{L*} \mathfrak{F}_k(t) \right\},$$

de donde su límite esta dado por

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}\xi^L(t) = \sum_{k=0}^{N-1} 2\Re \left\{ \alpha_k^L \beta_k^{L*} \lim_{t\to\infty} \frac{\mathfrak{F}_k(t)}{t} \right\} = 0,$$

dado que la función $\mathfrak{F}_k(t)$ oscila en el tiempo, y no existe valor de Ω_k para el cuál $\exp((2\Omega_k + \pi)\imath) = -1$. De forma análoga resulta que $\frac{1}{t}\xi^R(t) \underset{t\to\infty}{\to} 0$. Luego la normalización del estado en el límite asintótico queda determinada por $\Pi_L + \Pi_R = 1$, y por lo tanto para cualquier tiempo finito tenemos que $\xi^L = -\xi^R \equiv \xi$. Finalmente obtenemos que

$$\overline{\rho}_c(t) = \overline{\rho}_c(\infty) + \frac{2}{t} \begin{pmatrix} \xi(t) & \varsigma(t) \\ \varsigma^*(t) & -\xi(t) \end{pmatrix}. \tag{7.0.23}$$

En la siguiente sección vamos a calcular explícitamente los coeficientes que definen el estado asintótico en el caso de un CC inicialmente localizado con espín arbitrario.

CC Inicialmente Localizado con Espín Arbitrario

Vimos en el Cap.4 que los coeficientes $\{c_k^{L,R}\}$ que definen el estado inicial de la partícula vienen dados por

$$c_k^L(0) = \frac{\cos(\gamma/2)}{\sqrt{N}},$$
$$c_k^L(1) = \frac{\exp\left(\frac{2\pi\imath}{N}\right)\left[\cos(\gamma/2)\cos\theta + \exp(\imath\varphi)\sin(\gamma/2)\sin\theta\right]}{\sqrt{N}},$$
$$c_k^R(0) = \frac{\exp(\imath\varphi)\sin(\gamma/2)}{\sqrt{N}}, \tag{7.0.24}$$
$$c_k^R(1) = \frac{\exp\left(-\frac{2\pi\imath k}{N}\right)\left[\cos(\gamma/2)\sin\theta - \exp(\imath\varphi)\sin(\gamma/2)\cos\theta\right]}{\sqrt{N}}. \tag{7.0.25}$$

Haciendo uso de estos y de las Ecs.(#4.1.12,4.1.13#) vamos a calcular la DGQ asintótica. Desarrollemos primero el coeficiente Π_R y observemos que $\Pi_L = 1 - \Pi_R$. Así,

$$\alpha_k^{L,R} = \frac{c_k^{L,R}(1) + c_k^{L,R}(0)\exp(-\imath\Omega_k)}{2\cos(\Omega_k)},$$
$$\beta_k^{L,R} = \frac{c_k^{L,R}(0)\exp(\imath\Omega_k) - c_k^{L,R}(1)}{2\cos(\Omega_k)},$$

de modo que

$$\left|\alpha_k^{L,R}\right|^2 = \frac{\left(c_k^{L,R}(1) + c_k^{L,R}(0)\exp(-\imath\Omega_k)\right)\left(c_k^{L,R*}(1) + c_k^{L,R*}(0)\exp(\imath\Omega_k)\right)}{4\cos^2(\Omega_k)} =$$
$$= \frac{\left|c_k^{L,R}(1)\right|^2 + \left|c_k^{L,R}(0)\right|^2 + c_k^{L,R}(1)c_k^{L,R*}(0)\exp(\imath\Omega_k) + \left(c_k^{L,R}(1)c_k^{L,R*}(0)\exp(\imath\Omega_k)\right)^*}{4\cos^2(\Omega_k)} =$$
$$= \frac{\left|c_k^{L,R}(1)\right|^2 + \left|c_k^{L,R}(0)\right|^2 + 2\Re\left\{c_k^{L,R}(1)c_k^{L,R*}(0)\exp(\imath\Omega_k)\right\}}{4\cos^2(\Omega_k)}. \tag{7.0.26}$$

De forma análoga se puede ver que

$$\left|\beta_k^{L,R}\right|^2 = \frac{\left|c_k^{L,R}(0)\right|^2 + \left|c_k^{L,R}(1)\right|^2 - 2\Re\left\{c_k^{L,R}(1)c_k^{L,R*}(0)\exp(-\imath\Omega_k)\right\}}{4\cos^2(\Omega_k)}. \tag{7.0.27}$$

Así, usando estos dos resultados tenemos que

$$\Pi_R = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{\left|c_k^R(0)\right|^2 + \left|c_k^R(1)\right|^2 + \sin(\Omega_k)\Re\left\{\imath c_k^R(1)c_k^{R*}(0)\right\}}{2\cos^2(\Omega_k)}. \tag{7.0.28}$$

Haciendo uso de las Ecs.(7.0.1), tenemos que

$$\left|c_k^R(0)\right|^2 = \frac{\sin^2(\gamma/2)}{N}, \tag{7.0.29}$$

$$\left|c_k^R(1)\right|^2 = \frac{(\cos(\gamma/2)\sin\theta - \exp(\imath\varphi)\sin(\gamma/2)\cos\theta)\,(\cos(\gamma/2)\sin\theta - \exp(-\imath\varphi)\sin(\gamma/2)\cos\theta)}{N} = \tag{7.0.30}$$

$$= \frac{\cos^2(\gamma/2)\sin^2(\theta) + \sin^2(\gamma/2)\cos^2(\theta) - 2\sin(\gamma/2)\cos(\gamma/2)\cos(\theta)\sin(\theta)\cos(\varphi)}{N} =$$

$$= \frac{1 - cos^2(\theta)\cos(\gamma) - \sin^2(\gamma/2) - \sin(\gamma)\sin(2\theta)\cos(\varphi)/2}{N}, \tag{7.0.31}$$

$$c_k^R(1)c_k^{R*}(0) = \frac{\exp\left(-\frac{2\pi\imath k}{N}\right)\exp(-\imath\varphi)\sin(\gamma/2)\left[\cos(\gamma/2)\sin\theta - \exp(\imath\varphi)\sin(\gamma/2)\cos\theta\right]}{N} =$$

$$\frac{\exp(-\frac{2\pi\imath k}{N})\sin(\gamma/2)\left[\exp(-\imath\varphi)\cos(\gamma/2)\sin\theta - \sin(\gamma/2)\cos\theta\right]}{N}.$$

Multiplicando la última ecuación por $\imath$ y tomando parte real obtenemos,

$$\Re\left\{\imath c_k^R(1)c_k^{R*}(0)\right\} = \frac{\sin(\gamma/2)\left[\sin(\frac{2\pi k}{N}+\varphi)\cos(\gamma/2)\sin(\theta) - \sin(\frac{2\pi k}{N})\sin(\gamma/2)\cos(\theta)\right]}{N} =$$

$$= \frac{\sin(\frac{2\pi k}{N})\left[\cos(\varphi)\sin(\gamma)\sin(\theta)/2 - \sin^2(\gamma/2)\cos(\theta)\right] + \cos(\frac{2\pi k}{N})\sin(\varphi)\sin(\gamma)\sin(\theta)/2}{N}. \tag{7.0.32}$$

Observemos que las Ecs.(7.0.29,4.2.1) no tienen dependencia en k, con lo cual

$$\sum_{k=0}^{N-1} \frac{\left|c_k^R(0)\right|^2 + \left|c_k^R(1)\right|^2}{2\cos^2(\Omega_k)} = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos^2(\theta)\cos(\gamma) - \frac{1}{4}\sin(\gamma)\sin(2\theta)\cos(\varphi)\right) f(N,\theta),$$

donde definimos

$$f(N,\theta)=\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\frac{1}{1-\cos^2(\theta)\sin^2(\frac{2\pi k}{N})}. \tag{7.0.33}$$

La Ec.(7.0.32) por otro lado, sí depende de k y al multiplicarla por $\sin(\Omega_k)$ y sumar obtenemos,

$$\sum_{k=0}^{N-1}\frac{\sin(\Omega_k)\Re\left\{\imath c_k^R(1)c_k^{R*}(0)\right\}}{\cos^2(\Omega_k)}=\left(\frac{\cos(\varphi)\sin(\gamma)\sin(2\theta)}{4}-\sin^2(\gamma/2)\cos^2(\theta)\right)g(N,\theta),$$

con

$$g(N,\theta)=\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\frac{\sin^2(\frac{2\pi k}{N})}{1-\cos^2(\theta)\sin^2(\frac{2\pi k}{N})}, \tag{7.0.34}$$

y donde hemos utilizado que

$$\sum_{k=0}^{N-1}\frac{\sin(\frac{2\pi k}{N})\cos(\frac{2\pi k}{N})}{1-\cos^2(\theta)\sin^2(\frac{2\pi k}{N})}=0.$$

Finalmente obtenemos para Π_R,

$$\begin{aligned}\Pi_R=&\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos^2(\theta)\cos(\gamma)-\frac{1}{4}\sin(\gamma)\sin(2\theta)\cos(\varphi)\right)f(N,\theta)+\\&+\left(\frac{\cos(\varphi)\sin(\gamma)\sin(2\theta)}{4}-\sin^2(\gamma/2)\cos^2(\theta)\right)g(N,\theta),\end{aligned} \tag{7.0.35}$$

y $\Pi_L=1-\Pi_R$. Los cálculos para Q_0 siguen los mismos pasos, pudiendose obtener que

$$\begin{aligned}Q_0=&\frac{1}{4}\left(\exp(-\imath\varphi)\sin(\gamma)\sin^2(\theta)+\frac{1}{2}\cos(\gamma)\sin(2\theta)\right)f(N,\theta)+\\&+\frac{1}{4}\left(\exp(\imath\varphi)\sin(\gamma)\sin^2(\theta)+\frac{1}{2}\cos(\gamma)\sin(2\theta)\right)h(N,\theta),\end{aligned} \tag{7.0.36}$$

donde la función $h(N,\theta)$ queda definida mediante

$$h(N,\theta)=\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\frac{\cos(\frac{4\pi k}{N})}{1-\cos^2(\theta)\sin^2(\frac{2\pi k}{N})}. \tag{7.0.37}$$

Bibliografía

[1] G Abal, R Siri, A Romanelli, and R Donangelo. Quantum walk on the line: Entanglement and nonlocal initial conditions. *Physical Review A*, 73(4):042302, 2006.

[2] Dorit Aharonov, Andris Ambainis, Julia Kempe, and Umesh Vazirani. Quantum walks on graphs. In *Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing*, pages 50–59. ACM, 2001.

[3] Yakir Aharonov, Luiz Davidovich, and Nicim Zagury. Quantum random walks. *Physical Review A*, 48(2):1687, 1993.

[4] Małgorzata Bednarska, Andrzej Grudka, Paweł Kurzyński, Tomasz Łuczak, and Antoni Wójcik. Quantum walks on cycles. *Physics Letters A*, 317(1):21–25, 2003.

[5] John S Bell. On the einstein podolsky rosen paradox, 1964.

[6] Paul Benioff. The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical hamiltonian model of computers as represented by turing machines. *Journal of statistical physics*, 22(5):563–591, 1980.

[7] Charles H Bennett and Gilles Brassard. Quantum cryptography: Public key distribution and con tos5. 1984.

[8] Charles H Bennett, Gilles Brassard, Claude Crépeau, Richard Jozsa, Asher Peres, and William K Wootters. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and einstein-podolsky-rosen channels. *Physical review letters*, 70(13):1895, 1993.

[9] Charles H Bennett, David P DiVincenzo, John A Smolin, and William K Wootters. Mixed-state entanglement and quantum error correction. *Physical Review A*, 54(5): 3824, 1996.

[10] Ivens Carneiro, Meng Loo, Xibai Xu, Mathieu Girerd, Viv Kendon, and Peter L Knight. Entanglement in coined quantum walks on regular graphs. *New Journal of Physics*, 7(1):156, 2005.

[11] C. M. Chandrashekar and Raymond Laflamme. Quantum phase transition using quantum walks in an optical lattice. *Phys. Rev. A*, 78:022314, Aug 2008. doi: 10.1103/PhysRevA.78.022314. URL http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.78.022314.

[12] Andrew M Childs. Universal computation by quantum walk. *Physical review letters*, 102(18):180501, 2009.

[13] C Cohen-Tannoudji and B Diu. Laloë: Quantum mechanics, vol. i, 1977.

[14] LIGO Scientific Collaboration et al. A gravitational wave observatory operating beyond the quantum shot-noise limit. *Nature Physics*, 7(12):962–965, 2011.

[15] Philip J Davis. *Circulant matrices*. American Mathematical Soc., 2012.

[16] David Deutsch. Quantum theory, the church-turing principle and the universal quantum computer. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 400, pages 97–117. The Royal Society, 1985.

[17] David Deutsch and Richard Jozsa. Rapid solution of problems by quantum computation. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 439, pages 553–558. The Royal Society, 1992.

[18] Nicolás Díaz, Raul Donangelo, Renato Portugal, and Alejandro Romanelli. Transient temperature and mixing times of quantum walks on cycles. *Physical Review A*, 94 (1):012305, 2016.

[19] Albert Einstein. *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*. Courier Corporation, 1956.

[20] Albert Einstein, Boris Podolsky, and Nathan Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical review*, 47(10):777, 1935.

[21] Saber Elaydi. *An introduction to difference equations*. Springer Science & Business Media, 2005.

[22] Eugene F Fama. Random walks in stock market prices. *Financial analysts journal*, 51(1):75–80, 1995.

[23] Richard P Feynman. Simulating physics with computers. *International journal of theoretical physics*, 21(6):467–488, 1982.

[24] Edward Gerjuoy. Shorâs factoring algorithm and modern cryptography. an illustration of the capabilities inherent in quantum computers. *American journal of physics*, 73(6):521–540, 2005.

[25] Marco Gori, Augusto Pucci, V Roma, and I Siena. Itemrank: A random-walk based scoring algorithm for recommender engines. In *IJCAI*, volume 7, pages 2766–2771, 2007.

[26] Lov K Grover. A fast quantum mechanical algorithm for database search. In *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, pages 212–219. ACM, 1996.

[27] Michał Horodecki, Paweł Horodecki, and Ryszard Horodecki. Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions. *Physics Letters A*, 223(1):1–8, 1996.

[28] Ryszard Horodecki, Paweł Horodecki, Michał Horodecki, and Karol Horodecki. Quantum entanglement. *Reviews of modern physics*, 81(2):865, 2009.

[29] Mark Kac. Random walk and the theory of brownian motion. *The American Mathematical Monthly*, 54(7):369–391, 1947.

[30] Julia Kempe. Quantum random walks: an introductory overview. *Contemporary Physics*, 44(4):307–327, 2003.

[31] Ryogo Kubo, Morikazu Toda, and Natsuki Hashitsume. *Statistical physics II: nonequilibrium statistical mechanics*, volume 31. Springer Science & Business Media, 2012.

[32] David Asher Levin, Yuval Peres, and Elizabeth Lee Wilmer. *Markov chains and mixing times*. American Mathematical Soc., 2009.

[33] Klaus Mattle, Harald Weinfurter, Paul G Kwiat, and Anton Zeilinger. Dense coding in experimental quantum communication. *Physical Review Letters*, 76(25):4656, 1996.

[34] Ashwin Nayak and Ashvin Vishwanath. Quantum walk on the line. *arXiv preprint quant-ph/0010117*, 2000.

[35] Michael A Nielsen and Isaac L Chuang. *Quantum computation and Quantum information*. Cambridge University Press India, 2000.

[36] Lawrence Page, Sergey Brin, Rajeev Motwani, and Terry Winograd. The pagerank citation ranking: Bringing order to the web. Technical report, Stanford InfoLab, 1999.

[37] Asher Peres. Separability criterion for density matrices. *Physical Review Letters*, 77 (8):1413, 1996.

[38] Renato Portugal. *Quantum walks and search algorithms*. Springer Science & Business Media, 2013.

[39] Linda E Reichl. *A modern course in statistical physics*. John Wiley & Sons, 2016.

[40] IBM Press Release. Ibm building first universal quantum computers for business and science, Marzo 2017. URL https://www-03.ibm.com/press/us/en/pressrelease/51740.wss.

[41] Alejandro Romanelli. Distribution of chirality in the quantum walk: Markov process and entanglement. *Physical Review A*, 81(6):062349, 2010.

[42] Alejandro Romanelli. Thermodynamic behavior of the quantum walk. *Physical Review A*, 85(1):012319, 2012.

[43] Alejandro Romanelli and Gustavo Segundo. The entanglement temperature of the generalized quantum walk. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 393:646–654, 2014.

[44] Alejandro Romanelli, Raul Donangelo, Renato Portugal, and Franklin de Lima Marquezino. Thermodynamics of n-dimensional quantum walks. *Physical Review A*, 90 (2):022329, 2014.

[45] Joseph Rudnick and George Gaspari. *Elements of the random walk: an introduction for advanced students and researchers*. Cambridge University Press, 2004.

[46] Peter W Shor. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. *SIAM review*, 41(2):303–332, 1999.

[47] Ben C Travaglione and Gerald J Milburn. Implementing the quantum random walk. *Physical Review A*, 65(3):032310, 2002.

[48] Salvador Elías Venegas-Andraca. Quantum walks: a comprehensive review. *Quantum Information Processing*, 11(5):1015–1106, 2012.

[49] Frank Verstraete, Koenraad Audenaert, and Bart De Moor. Maximally entangled mixed states of two qubits. *Physical Review A*, 64(1):012316, 2001.

[50] Fugao Wang and DP Landau. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram. *Physical Review E*, 64(5):056101, 2001.

[51] Reinhard F Werner. Quantum states with einstein-podolsky-rosen correlations admitting a hidden-variable model. *Physical Review A*, 40(8):4277, 1989.

[52] RA Wheatcroft, PA Jumars, CR Smith, and ARM Nowell. A mechanistic view of the particulate biodiffusion coefficient: step lengths, rest periods and transport directions. *Journal of Marine Research*, 48(1):177–207, 1990.

[53] Erich Zauderer. *Partial differential equations of applied mathematics*, volume 71. John Wiley & Sons, 2011.