



# **ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL**

## **FACULTAD DE CIENCIAS**

**SISTEMAS ÓPTICOS PARA LA CARACTERIZACIÓN DE  
SISTEMAS COLOIDALES DE NANOPARTÍCULAS Y  
CONSIDERACIONES TEÓRICAS CUÁNTICAS  
IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO DE ISING EN CIRQ Y  
ANÁLISIS DE ENTORNOS ACOPLADOS CON  
OPERADORES BÁSICOS DE LINDBLAD**

**TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR PRESENTADO COMO  
REQUISITO PARA LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE FÍSICO**

**JUAN JAVIER NARANJO NAVARRETE**

[juan.naranjo@epn.edu.ec](mailto:juan.naranjo@epn.edu.ec)

**DIRECTOR: CÉSAR AUGUSTO COSTA VERA**

[cesar.costa@epn.edu.ec](mailto:cesar.costa@epn.edu.ec)

**DMQ, JULIO 2024**



## **CERTIFICACIONES**

Yo, JUAN JAVIER NARANJO NAVARRETE, declaro que el trabajo de integración curricular aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y, que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

---

Juan Javier Naranjo Navarrete

Certifico que el presente trabajo de integración curricular fue desarrollado por Juan Javier Naranjo Navarrete, bajo mi supervisión.

---

César Augusto Costa Vera  
**DIRECTOR**



## **DECLARACIÓN DE AUTORÍA**

A través de la presente declaración, afirmamos que el trabajo de integración curricular aquí descrito, así como el(los) producto(s) resultante(s) del mismo, es(son) público(s) y estará(n) a disposición de la comunidad a través del repositorio institucional de la Escuela Politécnica Nacional; sin embargo, la titularidad de los derechos patrimoniales nos corresponde a los autores que hemos contribuido en el desarrollo del presente trabajo; observando para el efecto las disposiciones establecidas por el órgano competente en propiedad intelectual, la normativa interna y demás normas.

Juan Javier Naranjo Navarrete

César Augusto Costa Vera



*A mi papá Xavi y a mi mamá Lupita por su apoyo,  
confianza y amor. Porque gracias a mis padres,  
llegaré lejos.*

## **Agradecimientos**

A Gaby y a Tommy, por ser mi familia. Valoro muchísimo su presencia en mi vida.

A Pamela, Cristian y Andrea por mostrarme la forma más real de una amistad buena y sana, la cual quiero mantener durante mucho... mucho tiempo, y a quienes siempre les deseo lo mejor.

A mis amigos Ángel, José, Anita, Nicolás, Esteban, Francisco y Joel, por acompañarme durante la carrera y a quienes deseo éxito y felicidad en sus vidas.

A los miembros del Laboratorio de Espectroscopia, gracias por hacer que los días de trabajo sean agradables. En especial, mi agradecimiento al Profesor César Costa, por su motivación y por brindarme la oportunidad de aprender y aplicar lo aprendido.

## RESUMEN

Este trabajo presenta la simulación de la cadena cuántica de Ising utilizando las librerías Cirq y OpenFermion. Se investigaron cadenas con condiciones de borde abiertas, periódicas y antiperiódicas, tanto en las fases ferromagnética como de desorden magnético. Se calcularon la magnetización en la dirección del campo magnético transversal, las energías, y la correlación interspínica de los estados base, así como las brechas de energía entre los estados excitados y la entropía de entrelazamiento. Los resultados se validaron mediante predicciones teóricas y cálculos numéricos disponibles en la literatura. La simulación demostró la transición de fase cuántica y la ruptura de simetría de paridad en el punto crítico  $h = J$  bajo condiciones de borde periódicas. Además, se exportaron los hamiltonianos y estados base de cadenas de cuatro espines con condiciones de borde periódicas a un programa en Julia. Utilizando la librería QSWalk.jl, se analizó la evolución temporal del sistema acoplado a entornos modelados con operadores de Lindblad siguiendo la ecuación GKSL. Se emplearon distintas configuraciones de operadores escalera  $\sigma^\pm$  y de transición. Los resultados mostraron que el sistema evoluciona hacia estados estacionarios a diferentes tasas, con una magnetización que oscila al usar operadores escalera. El uso del operador  $\sigma^+$  en todos los espines sugiere la existencia del fenómeno de superradiancia.

**Palabras clave:** simulación, Cirq, OpenFermion, cadena, Ising, QSWalk, evolución, temporal, Lindblad, entorno.

## ABSTRACT

This study presents the simulation of the quantum Ising chain using the Cirq and OpenFermion libraries. Chains with open, periodic, and anti-periodic boundary conditions were investigated in both the ferromagnetic and disordered magnetic phases. The transverse field magnetization, energies, and interspin correlation of the ground states were simulated, along with the numerical calculation of the energy gaps between excited states and the entanglement entropy. The results were validated through theoretical predictions and numerical calculations available in the literature. The simulation demonstrated the quantum phase transition and parity symmetry breaking at the critical point  $h = J$  under periodic boundary conditions. Additionally, the hamiltonians and ground states of four-spin chains with periodic boundary conditions were exported to a program in Julia. Utilizing the QSWalk.jl library, the time evolution of the system coupled to environments modeled with Lindblad operators following the GKSL equation was analyzed. Various configurations of ladder operators  $\sigma^\pm$  and transition operators were employed. The results showed that the system evolves towards steady states at different rates, with magnetization oscillating when using ladder operators. The use of the  $\sigma^+$  operator on all spins suggests the existence of the superradiance phenomenon.

**Keywords:** simulation, Cirq, OpenFermion, Ising, chain, QSWalk, time, evolution, Lindblad, environment.

---

# Índice general

---

<b>1. Descripción del componente desarrollado</b>	<b>1</b>
1.1. Objetivo general . . . . .	2
1.2. Objetivos específicos . . . . .	2
1.3. Alcance . . . . .	2
1.4. Marco teórico . . . . .	3
1.4.1. Sistemas cuánticos abiertos . . . . .	3
1.4.2. Simulación de sistemas cuánticos . . . . .	7
1.4.3. Librerías Cirq, OpenFermion y QSWalk.jl . . . . .	8
<b>2. Metodología</b>	<b>10</b>
2.1. Cadena cuántica de Ising . . . . .	10
2.1.1. Transformación de Jordan-Wigner y modelo fermiónico equivalente . . . . .	12
2.1.2. Transformación de Bogoliubov . . . . .	16
2.2. Programación con Cirq y OpenFermion . . . . .	17
2.2.1. Generación de autoestados . . . . .	18
2.2.2. Magnetización en dirección $Z$ . . . . .	19
2.2.3. Correlación entre espines en direcciones $X$ y $Z$ . . . . .	22
2.2.4. Energía del estado base y bandas de energía . . . . .	23
2.2.5. Entropía de entrelazamiento . . . . .	24

2.3. Características esperadas en la simulación . . . . .	27
2.4. Evolución temporal con QSWalk.jl . . . . .	28
2.4.1. Operadores de Lindblad implementados . . . . .	29
<b>3. Resultados, conclusiones y recomendaciones</b>	<b>32</b>
3.1. Resultados sobre la simulación de la cadena cuántica de Ising	32
3.2. Resultados sobre la evolución temporal con la ecuación GKSL	42
3.3. Conclusiones y recomendaciones . . . . .	48
<b>A. Anexo A: argumentos de las funciones locales</b>	<b>51</b>
<b>B. Anexo B: sobre la simulación en Cirq y OpenFermion</b>	<b>55</b>
<b>C. Anexo D: sobre el modelo de dos espines</b>	<b>59</b>
<b>D. Anexo C: sobre la simulación en QSWalk.jl</b>	<b>61</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>87</b>

---

## Índice de figuras

---

- 2.1. Circuito cuántico que transforma el estado  $|0000\rangle$  al estado base de una cadena cuántica de Ising conformada por 4 espines, con PBC e intensidades  $J = 1$  y  $h = 0,5$ . . . . . 20
- 2.2. Diagrama de flujo que ilustra el proceso *Generación de autoestados*. Los argumentos de las funciones `QuantumIsingHamiltonian` y `SimulateHamiltonian` ingresan al proceso. Las funciones generan los resultados del proceso, representados con las instancias encerradas en óvalos. Estos resultados ingresan a próximos procesos según se requiera. . . . . 21
- 2.3. Diagrama de flujo que ilustra el proceso *Magnetización en Z*. El resultado `SortedHistogram` del proceso *Generación de autoestados* ingresa a la función *ExpectedMagnetization* que entrega el resultado del proceso: la magnetización promedio en dirección Z. . . . . 22
- 2.4. Diagrama de flujo que ilustra el proceso *Correlación entre espines en direcciones X y Z*. Se ingresan los argumentos a la función `QuantumIsingHamiltonian`, que produce la instancia `Quad_Hamiltonian`. Éste producto se ingresa a la función `Correlation`, que retorna el resultado del proceso: una lista con los valores de los términos  $\langle \phi | \sigma_1^j \sigma_i^j | \phi \rangle$ . . . . . 22

2.5. Diagrama de flujo que ilustra el proceso <i>Energía del estado y bandas de energía</i> . Se ingresan los argumentos de las funciones <code>GetEnergies</code> o <code>SimulateEnergy</code> según se requiera calcular numéricamente o simular la energía de un estado. La función <code>GetEnergies</code> retorna como resultado del proceso una lista con los valores de las brechas de energía entre autoestados y el valor de la energía del estado base, mientras que <code>Simulate energy</code> únicamente retorna el valor de energía del autoestado asociado al estado inicial del circuito cuántico definido por <code>InitialState</code> . . . . .	25
2.6. Diagrama de flujo que muestra el proceso <i>Entropía de entrelazamiento</i> . Se utiliza el proceso <i>Generación de autoestados</i> para obtener un autoestado <code>Final_st_vector</code> como una lista. Ésta lista ingresa a la función de Cirq <code>partial_trace_of_state_vector</code> que produce una tupla de coeficientes y listas que representan estados reducidos cuya suma convexa es el estado trazado parcialmente sobre el espacio de los espines fuera de la lista <code>keep_indices</code> . El estado trazado parcialmente ingresa a la función de Cirq <code>density_matrix_from_state_vector</code> , ahora con <code>keep_indices</code> una lista vacía para mantener todos los grados de libertad del estado reducido. El resultado ingresa a la función de Cirq <code>von_neumann_entropy</code> que produce el resultado del proceso: la entropía de entrelazamiento del sistema parcialmente reducido. . . . .	26
3.1. Probabilidades de medición de los estados computacionales que forman el GS de los casos ABC y PBC en distintos valores de $h$ . En todas las mediciones se definió $J = 1$ . El eje vertical representa la probabilidad de medición. . . . .	33
3.2. Magnetización en dirección Z al variar la intensidad del campo magnético transversal $h$ . Se definió $J = 1$ y 1000 repeticiones.	34
3.3. Magnetización en dirección Z al variar el número de espines y la intensidad de campo magnético transversal $h$ . Se define $J = 1$ y 3000 repeticiones. . . . .	35

3.4. Correlación entre espines en dirección X del estado base de una cadena con 14 espines. Se definió $J = 1$ y 30000 repeticiones. . . . .	36
3.5. Correlación entre espines en dirección Z del estado base de una cadena con 14 espines. Se definió $J = 1$ y 300000 repeticiones. . . . .	36
3.6. Energía de los estados base al variar la intensidad de campo magnético transversal $h$ . Se definió $J = 1$ y 1000 repeticiones. Las líneas continuas son resultados de la función <code>GetEnergies</code> , mientras que los puntos son resultados de la función <code>SimulateEnergy</code> . . . . .	37
3.7. Diferencia entre las energías de los estados base de PBC y ABC al variar la intensidad de campo magnético transversal $h$ . Se definió $J = 1$ . Estos son resultados de la función <code>GetEnergies</code> . . . . .	38
3.8. Diferencia entre las energías de los estados base de PBC y ABC al aumentar el número de espines a distintos valores de $h$ . Se definió $J = 1$ . Estos son resultados de la función <code>GetEnergies</code> . . . . .	38
3.9. Brechas de energía entre los autoestados de los casos PBC, ABC y OBC al variar la intensidad de campo magnético transversal $h$ . Se definió $J = 1$ . Estos son resultados de la función <code>GetEnergies</code> . . . . .	39
3.10 Entropía de entrelazamiento al variar la intensidad de campo magnético transversal $h$ . Se definió $J = 1$ . La columna izquierda muestra la entropía de Von Neumann del estado correspondiente a la primera mitad de espines de la cadena, mientras la columna derecha corresponde al estado de la segunda mitad de espines. . . . .	41
3.11 Entropía de entrelazamiento al variar el número de espines conformantes $N$ y para distintos valores de $h$ . La entropía del caso PBC con $N = 6$ y $h = 1$ es un valor atípico, provocado por un error computacional relacionado a la precisión de los valores de punto flotante. . . . .	43

3.12	Evolución temporal de la magnetización y energía del estado base de una cadena cuántica de Ising con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC, utilizando $\hat{L}_1$ y $\hat{L}_2$ como operadores de Lindblad. El coeficiente que multiplica a $\hat{L}_1$ es 1, y se varía el coeficiente $\gamma$ que se multiplica al operador $\hat{L}_2$ . . . . .	46
3.13	Evolución temporal de la magnetización y energía del estado base de una cadena cuántica de Ising con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. Se utilizaron los siguientes operadores de Lindblad: transiciones ponderadas entre autoestados y los operadores $1,0 \cdot \hat{L}_1$ y $\gamma \hat{L}_2$ , con $\gamma = 0,5$ . . . . .	47
3.14	Evolución temporal de la magnetización y energía del estado base de una cadena cuántica de Ising con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. Se utilizaron los siguientes operadores de Lindblad: transiciones ponderadas entre autoestados y los operadores $1,0 \cdot \hat{L}_1$ y $\gamma \hat{L}_2$ , con $\gamma = 2,0$ . . . . .	48
B.1.	Resultados de la compilación de un circuito cuántico que representa una cadena cuántica de Ising de 4 espines con $J = 1$ y $h = 0,5$ en el caso PBC. El circuito se compiló 10000 veces. . . . .	56
B.2.	Magnetización en dirección Z al variar el número de espines y la intensidad de interacción entre espines $j$ . Se definió $h = 1$ y 3000 repeticiones. . . . .	57
B.3.	Gráfico en escala logarítmica de la diferencia entre las energías de los estados base de PBC y ABC al aumentar el número de espines a distintos valores de $h$ . Se definió $J = 1$ . Estos son resultados de la función <code>GetEnergies</code> . . . . .	57
B.4.	Entropía de entrelazamiento en el punto crítico al variar el número de espines. Se definió $J = 1$ . Se muestran los ajustes a una función logarítmica, los parámetros óptimos son los de la tabla (B.1). En el caso PBC, se excluyeron los valores de entropía para $N = 2$ y $N = 6$ , pues son valores atípicos provocados por la forma de extracción de datos de la simulación y errores numéricos de computación. . . . .	58

D.1. Evolución temporal de las poblaciones de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC, sin interacciones con un entorno. Es decir, el sistema es cerrado. . . . .	62
D.2. Evolución temporal de la magnetización de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC, sin interacciones con un entorno. Es decir, el sistema es cerrado. . . . .	63
D.3. Evolución temporal de la energía de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC, sin interacciones con un entorno. Es decir, el sistema es cerrado. . . . .	64
D.4. Evolución temporal de las poblaciones de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sigma^-$ en el espín 0. . . . .	65
D.5. Evolución temporal de la magnetización de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sigma^-$ en el espín 0. . . . .	66
D.6. Evolución temporal de la energía de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sigma^-$ en el espín 0. . . . .	67
D.7. Evolución temporal de las poblaciones de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sigma^+$ en el espín 0. . . . .	68
D.8. Evolución temporal de la magnetización de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sigma^+$ en el espín 0. . . . .	69

D.9. Evolución temporal de la energía de los estados $ 0\rangle^{\otimes N},  1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4,$ $J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sigma^+$ en el espín 0. . . . .	70
D.10 Evolución temporal de las poblaciones de los estados $ 0\rangle^{\otimes N},$ $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4, J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^- . . . . .$	71
D.11 Evolución temporal de la magnetización de los estados $ 0\rangle^{\otimes N},$ $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4, J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^- . . . . .$	72
D.12 Evolución temporal de la energía de los estados $ 0\rangle^{\otimes N},  1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4,$ $J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^- . . . . .$	73
D.13 Evolución temporal de las poblaciones de los estados $ 0\rangle^{\otimes N},$ $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4, J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+ . . . . .$	74
D.14 Evolución temporal de la magnetización de los estados $ 0\rangle^{\otimes N},$ $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4, J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+ . . . . .$	75
D.15 Evolución temporal de la energía de los estados $ 0\rangle^{\otimes N},  1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4,$ $J = 1$ y PBC. El operador de Lindblad es $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+ . . . . .$	76
D.16 Evolución temporal de las poblaciones de los estados $ 0\rangle^{\otimes N},$ $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4, J = 1$ y PBC. Los operadores de Lindblad son $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^-$ y $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+ . . . . .$	77
D.17 Evolución temporal de la magnetización de los estados $ 0\rangle^{\otimes N},$ $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4, J = 1$ y PBC. Los operadores de Lindblad son $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^-$ y $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+ . . . . .$	78
D.18 Evolución temporal de la energía de los estados $ 0\rangle^{\otimes N},  1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4,$ $J = 1$ y PBC. Los operadores de Lindblad son $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^-$ y $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+ .$	79

D.19	Evolución temporal de las poblaciones de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones $h_{ij}  i\rangle \langle j $ entre los estados computacionales. . . . .	80
D.20	Evolución temporal de la magnetización de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones $h_{ij}  i\rangle \langle j $ entre los estados computacionales. . . . .	81
D.21	Evolución temporal de la energía de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones $h_{ij}  i\rangle \langle j $ entre los estados computacionales. . . . .	82
D.22	Evolución temporal de las poblaciones de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones entre los autoestados del hamiltoniano. . . . .	83
D.23	Evolución temporal de la magnetización de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones entre los autoestados del hamiltoniano. . . . .	84
D.24	Evolución temporal de la energía de los estados $ 0\rangle^{\otimes N}$ , $ 1\rangle^{\otimes N}$ y base de una cadena cuántica de Ising definida con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones entre los autoestados del hamiltoniano. . . . .	85
D.25	Evolución temporal de la magnetización y energía del estado base de una cadena cuántica de Ising con $N = 4$ , $J = 1$ y PBC, utilizando transiciones ponderadas entre autoestados como operadores de Lindblad. La forma de estos operadores es la ecuación (2.29). La aparición de picos y bajadas súbitas de las magnitudes al aumentar $\beta$ se deben al límite de cálculo computacional de valores muy pequeños o muy altos de Julia. . . . .	86

---

## Índice de cuadros

---

A.1. Argumentos de la función local <code>QuantumIsingHamiltonian</code> . Los argumentos se clasifican en <i>por defecto</i> (P.d.) y <i>opcionales</i> (O). Se muestra el <i>valor predeterminado</i> (V.p.) de los argumentos opcionales. . . . .	51
A.2. Argumentos de la función local <code>SimulateHamiltonian</code> . Los argumentos se clasifican en <i>por defecto</i> (P.d.) y <i>opcionales</i> (O). Se muestra el <i>valor predeterminado</i> (V.p.) de los argumentos opcionales. . . . .	52
A.3. Argumentos de la función local <code>Correlation</code> . Los argumentos se clasifican en <i>por defecto</i> (P.d.) y <i>opcionales</i> (O). Se muestra el <i>valor predeterminado</i> (V.p.) de los argumentos opcionales. . . . .	53
A.4. Argumentos de la función local <code>GetEnergies</code> . Los argumentos se clasifican en <i>por defecto</i> (P.d.) y <i>opcionales</i> (O). Se muestra el <i>valor predeterminado</i> (V.p.) de los argumentos opcionales. . . . .	54
B.1. Valores y varianza de los parámetros óptimos de los ajustes de la figura B.4. . . . .	56

# Capítulo 1

---

## Descripción del componente desarrollado

---

La descripción de sistemas cuánticos abiertos es un tema de estudio actual y significativo en las áreas de óptica, información y computación cuánticas. Para estudiar las interacciones de los sistemas cuánticos con su entorno, se generaliza la ecuación de von Neumann para incluir dinámicas sistema-entorno e interacciones locales adicionales. En este contexto destaca la ecuación de Gorini–Kossakowski–Sudarshan–Lindblad (GKSL) que describe la evolución temporal de un sistema que interactúa con un entorno modelado con procesos markovianos que aseguran la positividad del operador densidad y conservan su traza.

El interés por estudiar la dinámica de los sistemas cuánticos abiertos proviene de su capacidad para modelar efectos físicos de origen externo, como la termalización, disipación y fluctuaciones. El objetivo de este trabajo de integración curricular es estudiar la cadena cuántica de Ising y sus interacciones con la luz y materia mediante los resultados de aplicar algunos operadores básicos de Lindblad. Se programó la simulación de la cadena cuántica de Ising en Cirq, de la cual se extraen datos que permiten hacer un análisis cuantitativo de las propiedades físicas del modelo. Además, se usó la librería QSWALK.JL para la simulación de la ecuación GKSL y donde se implementaron los operadores de Lindblad.

## 1.1. Objetivo general

Simular la cadena cuántica de Ising y sus interacciones luz-materia a través del acoplamiento del sistema a un entorno mediante operadores básicos de Lindblad.

## 1.2. Objetivos específicos

1. Estudiar la cadena cuántica de Ising y modelar sus propiedades físicas.
2. Producir códigos en Python y Julia con las librerías Cirq, OpenFermion y QSWalk.jl que simulen los resultados de un sistema cuántico gobernado por la ecuación GKSL y el hamiltoniano de la cadena cuántica de Ising.
3. Determinar un conjunto de operadores básicos de Lindblad que simulen efectos de entorno sobre la dinámica del sistema.

## 1.3. Alcance

En la parte teórica de esta componente, el estudio de la ecuación GKSL y de la cadena cuántica de Ising se desarrollará hasta el nivel necesario en que se comprenden los fenómenos físicos relacionados con la interacción luz-materia y se reconoce cuál es el efecto de la temperatura en ambos modelos. El estudio teórico de la cadena cuántica de Ising se desarrollará hasta que se alcance la comprensión necesaria para la correcta implementación del programa en Python, con el fin de reconocer qué resultados debería producir la simulación y en qué condiciones.

Una vez se disponga de la simulación de la cadena cuántica Ising, se implementarán los operadores de Lindblad cuya programación sea factible dentro del tiempo del trabajo de integración curricular. Se espera una comparación de resultados entre la simulación con operadores de Lindblad y sin los operadores. Esta comparativa se basará en el comportamiento teórico del sistema bajo efectos de entorno. Se espera que los

resultados informen sobre los procesos fundamentales de interacción de fotones en sistemas microscópicos y de menor escala.

## **1.4. Marco teórico**

### **1.4.1. Sistemas cuánticos abiertos**

La mecánica cuántica es un área fundamental de la física. Describe la dinámica de sistemas microscópicos, de escala nanométrica y atómica, donde la mecánica clásica encuentra limitaciones. De la teoría cuántica se generan ideas que han demostrado ser útiles en diversas áreas como la física del estado sólido, la física atómica y nuclear, la óptica, la química y, recientemente, la computación e información. Como mencionan Browne [1] y Schleich [2], el conocimiento de los fenómenos cuánticos ha permitido fabricar tecnologías revolucionarias como los satélites, láseres, relojes atómicos y dispositivos basados en semiconductores; las tecnologías ulteriores y los esfuerzos actuales se dirigen a la construcción de computadoras y procesadores cuánticos, trampas iónicas, dispositivos basados en optomecánica, óptica cuántica, circuitos fotónicos y sensores cuánticos. Estas tecnologías son esenciales para la implementación experimental y uso industrial de conceptos como criptología, comunicación, internet y machine learning cuánticos [3, 4].

Un problema actual de las tecnologías cuánticas es la estabilidad de los sistemas subyacentes. Un claro ejemplo es el ruido en computadoras cuánticas. Según Dasgupta [5], las fluctuaciones de ruido alteran los resultados y son un obstáculo en contra de su reproducibilidad; en este contexto se han desarrollado los algoritmos cuánticos ruidosos de escala intermedia [6], NISQ por su nombre en inglés, con el objetivo de medir e incluso demostrar la utilidad y ventajas que suponen las tecnologías y teoría cuánticas sobre las clásicas. El ruido en computadoras cuánticas se debe a que los sistemas físicos que sirven de unidades de información cuánticas, llamadas qubits, son sensibles a efectos de entorno, tales como la temperatura [7], fluctuaciones electromagnéticas e interacciones entre qubits cercanos [8]. El resultado de estos efectos es la pérdida del estado cuántico de los qubits por decoherencia.

Para minimizar el ruido en computadoras cuánticas [9], o incluso usarlo a favor [10], es necesario entender la dinámica de los sistemas cuánticos interactuantes con el entorno, o sistemas cuánticos abiertos. El estado de un sistema cuántico está descrito por un operador densidad  $\rho$  [8], que satisface las siguientes condiciones:

1.  $Tr(\rho) = 1$ .
2. Pertenece al espacio de los operadores semidefinidos positivos, i.e.  $\rho \in Pos(\mathcal{X})$ , con  $\mathcal{X}$  un espacio complejo euclídeo. Esto es equivalente a que  $\rho$  sea hermítico y sus autovalores sean iguales o mayores a cero.

Desde la teoría de información cuántica [11], se denomina  $\mathcal{D}(\mathcal{X})$  al conjunto de operadores densidad. Se distinguen tres tipos de estados, lo que resulta en la siguiente clasificación de los operadores densidad:

- Estados puros, aquellos formados por el producto externo de vectores de estado  $|\psi\rangle \in \mathcal{X}$ , tal que  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ . Es simple demostrar que son idempotentes,  $\rho^2 = \rho$  y su pureza,  $Tr(\rho^2)$ , es 1.
- Estados mixtos. Son la suma convexa de elementos de  $\mathcal{D}(\mathcal{X})$ , tal que  $\rho = \sum_k a_k \eta_k$ , con  $\sum_k a_k = 1$  y  $\rho, \eta_k \in \mathcal{D}(\mathcal{X})$ .
- Estados correlados, también llamados entrelazados. Son aquellos que no se pueden representar como la suma convexa de estados.

Por otro lado, según Greiner [12], la evolución temporal del sistema aislado está descrita por la ecuación (1.1). En las unidades naturales, la constante de Planck es 1 en (1.1). De esta manera, la ecuación (1.2), llamada de von Neumann, describe la evolución temporal del operador densidad  $\rho$  de un sistema cuya dinámica está regida por el hamiltoniano  $H$  [8];  $\mathcal{L}$  es llamado un superoperador Liouvilliano. En este caso, se considera que el operador densidad no depende explícitamente del tiempo, que es la aproximación que se usa en este trabajo.

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -[\rho, H] \tag{1.1}$$

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[H, \rho] \equiv \frac{d}{dt}\rho = \mathcal{L}[\rho] \quad (1.2)$$

El caso en que un superoperador  $\mathcal{V}$  es un mapa lineal  $\mathcal{V} : \mathcal{D}(\mathcal{X}) \rightarrow \mathcal{D}(\mathcal{X})$ , se lo denomina *canal cuántico*. Con la representación de Krauss,  $\mathcal{V}$  es un canal cuántico si:

- $\mathcal{V}[\rho] = \sum_k V_k^\dagger \rho V_k$ , y
- $\sum_k V_k^\dagger V_k = \mathbb{I}_{\mathcal{X}}$

Los  $V_k$  son denominados operadores de Krauss y son aplicaciones lineales. Esta caracterización asegura que los canales cuánticos preservan la traza y son completamente positivos. Así, se garantiza el mapeo  $\mathcal{V} : \mathcal{D}(\mathcal{X}) \rightarrow \mathcal{D}(\mathcal{X})$ . Manzano [13] presenta una demostración sobre la forma más general de describir cambios entre operadores densidad mediante procesos markovianos; esta es la ecuación (1.3), llamada *ecuación maestra de Lindblad*.

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[H, \rho] + \sum_k \Gamma_k \left( L_k \rho L_k^\dagger - \frac{1}{2} \{L_k L_k^\dagger, \rho\} \right) \equiv \mathcal{L}[\rho] \quad (1.3)$$

Esta ecuación se ha utilizado con éxito para generalizar las caminatas cuánticas que siguen un proceso estocástico, dando lugar a las caminatas estocásticas cuánticas descritas en la referencia [14]; el término con el hamiltoniano describe una evolución coherente del operador densidad mientras el término con el sumatorio describe una evolución estocástica. Los elementos del conjunto  $\{L_k\}$  se denominan operadores salto, u operadores de Lindblad. Su definición y formalismo han sido estudiados en las referencias [15, 16], donde se introduce el término *grupos semidinámicos* y el superoperador  $\mathcal{L}$  en (1.3) es llamado el generador del semigrupo. Además,  $\{\Gamma_k : \Gamma_k \geq 0\}$  es un conjunto cuyos elementos se denominan *coeficientes de amortiguación*.

La ecuación (1.3) también se puede derivar a partir de consideraciones físicas a escala microscópicas [17, 13]. Se considera un hamiltoniano  $H$  conformado por los hamiltonianos del sistema,  $H_S$ , el de un reservorio  $R$ ,  $H_R$ , y uno de interacción  $H_I$ , véase (1.4).

$$H = H_S + H_R + H_I \quad (1.4)$$

Las asunciones sobre las que se basa la demostración son:

1. El acoplamiento entre el sistema y el reservorio es débil, entonces el estado  $\rho_T$  del sistema general es separable, i.e.  $\rho_T(t) \approx \rho(t) \otimes \rho_R$ . Se obtiene el operador densidad del sistema trazando parcialmente sobre los grados de libertad del reservorio. Entonces,  $Tr_R(\rho_T(t)) = \rho(t)$ .
2. La aproximación markoviana, que suprime la dependencia de la evolución temporal respecto del estado inicial del sistema. Esta aproximación es válida si el sistema cambia lentamente en comparación con el tiempo que tardan en desaparecer las correlaciones con el entorno.
3. La aproximación de la onda rotatoria. Se promedia sobre los términos que oscilan rápidamente respecto a la escala típica de evolución del sistema de forma que solo los términos resonantes contribuyen a la dinámica. Esto asegura que el operador densidad es positivo durante su evolución temporal.

La demostración de Manzano [13] termina con la ecuación de Gorini – Kossakowski – Sudarshan – Lindblad (1.5), donde  $H_{L_s}$  es el hamiltoniano de desplazamiento de Lamb y su función es renormalizar los niveles de energía del sistema. Cuando solo hay una frecuencia significativa se recupera la ecuación (1.3) manteniendo el  $H_{L_s}$ .

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) = & -i[H + H_{L_s}, \rho(t)] \\ & + \sum_{k,\omega} \left( L_k(\omega) \rho(t) L_k^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ L_k^\dagger L_k(\omega), \rho(t) \right\} \right) \end{aligned} \quad (1.5)$$

Ecuaciones del tipo (1.5) son ampliamente utilizadas para describir sistemas de espines acoplados a baños bosónicos [18], sistemas cuánticos fuera del equilibrio [19], cavidades ópticas y resonadores plasmónicos [20].

### 1.4.2. Simulación de sistemas cuánticos

La simulación de sistemas cuánticos es una de las aplicaciones más prometedoras de la computación cuántica con aplicación en física del estado sólido, química, bioquímica y farmacéutica [21, 22]. Esto se debe a la incorporación inherente de los fenómenos cuánticos, como la superposición y el entrelazamiento, en el procesamiento de la información. Esto supone nuevas formas de abordar problemas de optimización, búsqueda y clasificación.

Simular sistemas cuánticos con computadoras cuánticas ofrece una ventaja significativa sobre la computación clásica para sistemas con pocos elementos. En computadoras clásicas, almacenar un estado cuántico es desafiante debido al crecimiento exponencial del espacio de Hilbert con el número de elementos [23]. Incluso las supercomputadoras son ineficientes para simular la dinámica de sistemas con varias decenas de espines (por ejemplo, 40 espines es inmanejable). En cambio, sistemas cuánticos como los qubits superconductores o los basados en trampas iónicas manejan naturalmente la información cuántica.

Uno de los principales objetivos al simular un sistema cuántico es encontrar el estado base y su energía. Una forma de lograrlo es utilizando algoritmos QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm) [24]. Estos algoritmos son híbridos. Utilizan un circuito cuántico parametrizado como ansatz que se ejecuta para obtener un valor esperado. Luego, algoritmos clásicos de optimización actualizan los parámetros del circuito para minimizar o maximizar una función. Este proceso se repite hasta cumplir una condición determinada [25]. También se puede modelar la dinámica del sistema mediante canales cuánticos, esto es hallar un conjunto de compuertas cuánticas que simulen los observables y transformaciones aplicadas sobre el operador densidad. Este proceso no es trivial, pero es favorable pues no depende de parámetros lo que resulta en una simulación exacta del sistema.

### 1.4.3. Librerías Cirq, OpenFermion y QSWalk.jl

La forma de abordar problemas en computación cuántica requiere desarrollar herramientas específicas que faciliten la comunicación con la computadora cuántica y el manejo adecuado de la información cuántica. Estas herramientas incluyen lenguajes de programación o librerías, algoritmos optimizados para qubits y protocolos para la corrección de errores, todos esenciales para maximizar el rendimiento y la precisión de las operaciones. Cirq [26] es una librería de Python [27] que permite la manipulación y optimización de circuitos cuánticos, así como la ejecución en los procesadores y simuladores cuánticos proporcionados por Google Quantum AI [28], la división de Google destinada a la investigación y desarrollo de tecnologías cuánticas.

Con el objetivo de proporcionar herramientas avanzadas para la simulación de sistemas cuánticos, se desarrolló OpenFermion [29], una librería de código abierto implementada en Python [27] y adjunta a Cirq [26]. Esta biblioteca cuenta con una amplia variedad de estructuras de datos y funciones diseñadas específicamente para la simulación de sistemas fermiónicos y bosónicos, así como para la modelación de estructuras electrónicas y moleculares. Además, OpenFermion facilita la traducción de estos sistemas a circuitos cuánticos, optimizando su ejecución en hardware cuántico. Gracias a sus capacidades, OpenFermion se posiciona como una herramienta eficaz en el campo de la química cuántica, potenciando la investigación y el desarrollo en esta disciplina. Por ejemplo, se utilizó OpenFermion para estudiar cadenas de hidrógeno, su energía de enlace y su mecanismo de reacción química a través de su simulación mediante un algoritmo tipo VQE (Variational Quantum Eigensolver) y su ejecución en el procesador cuántico Google Sycamore [30].

Por otro lado, la librería QSWalk.jl [31], desarrollada en el lenguaje de programación Julia [32], se ha creado específicamente para el estudio de las caminatas estocásticas cuánticas. Esta librería simula la ecuación (1.3) y ofrece diversas funciones para analizar tanto las interacciones locales, globales y no moralizantes en estos modelos de caminatas cuánticas con procesos markovianos de decoherencia. QSWalk.jl permite examinar el impacto del término de evolución estocástica en compa-

ración con la evolución coherente, lo que es equivalente a estudiar el proceso de transición del régimen cuántico al clásico en la dinámica del sistema [31, 14]. Este estudio es significativo en la comprensión de cómo los sistemas cuánticos interactúan con su entorno y evolucionan hacia comportamientos clásicos mediante decoherencia. Una de las principales ventajas de QSWalk.jl es la implementación de un método de manipulación de matrices dispersas, lo cual reduce significativamente el costo computacional y el tiempo de ejecución de las simulaciones.

# Capítulo 2

---

## Metodología

---

Este trabajo presenta un enfoque mixto, combinando elementos descriptivos y explicativos en la formulación del proceso de simulación de la cadena cuántica de Ising en Cirq, así como un carácter exploratorio en la formulación de los operadores de Lindblad, los cuales fueron simulados utilizando QSWalk.jl.

### 2.1. Cadena cuántica de Ising

Los modelos unidimensionales de Heisenberg son modelos prototípicos usados para estudiar el magnetismo, puntos críticos y cambios de fase, desde las teorías estadística y cuántica. Se tratan cadenas de espines con interacciones entre los vecinos más cercanos sobre los cuales se aplican campos magnéticos externos. Varios de estos modelos son resolubles analíticamente, como el hamiltoniano anisotrópico de Heisenberg (2.1) bajo varias condiciones para las constantes de acoplamiento  $J_x$ ,  $J_y$ ,  $J_z$  y  $\mathcal{H}$  [33, 34]. Los  $\sigma_k^i$ ,  $i \in \{x, y, z\}$  son las matrices de Pauli de espín 1/2 (2.2) y actúan como operadores sobre el estado del espín  $k$ -ésimo, es decir,  $\cdots \otimes \mathbb{I}_{k-1} \otimes \sigma_k^i \otimes \mathbb{I}_{k+1} \otimes \cdots$ .

$$H = - \sum_k (J_x \sigma_k^x \sigma_{k+1}^x + J_y \sigma_k^y \sigma_{k+1}^y + J_z \sigma_k^z \sigma_{k+1}^z) - \mathcal{H} \sum_k \sigma_k^z \quad (2.1)$$

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

En la ecuación (2.1), con  $J_y = J_z = 0$ ,  $J_x = J$  y  $\mathcal{H} = h$  se obtiene el hamiltoniano del modelo de la cadena cuántica de Ising (2.3), donde  $J$  y  $h$  son constantes de acoplamiento que miden la intensidad de interacción entre vecinos más cercanos y la intensidad del campo magnético, respectivamente. A este modelo también se lo conoce como el modelo de campo transverso de Ising. Este modelo requiere un análisis desde la teoría cuántica por la no conmutabilidad de las matrices de Pauli. Al satisfacerse la relación de conmutación  $[\sigma^n, \sigma^m] = 2i\varepsilon_{nml}\sigma^l$ ,  $n, m, l \in \{x, y, z\}$ , se concluye que, para un estado cuántico de la cadena, no se pueden determinar las alineaciones de los espines en las direcciones  $X$  y  $Z$  simultáneamente [35], pues estos observables no conmutan.

$$H = -J \sum_k \sigma_k^x \sigma_{k+1}^x - h \sum_k \sigma_k^z \quad (2.3)$$

Para describir los estados de los espines se utilizará la notación de las bases de la esfera de Bloch. De esta manera, un espín alineado al sentido positivo de la dirección  $X$  se escribe  $|+\rangle \equiv |\rightarrow\rangle$ , mientras que al sentido negativo se escribe  $|-\rangle \equiv |\leftarrow\rangle$ . Así, los espines alineados en la dirección  $Z$  son descritos con los vectores de la base computacional,  $|0\rangle \equiv |\uparrow\rangle$  y  $|1\rangle \equiv |\downarrow\rangle$ . El conjunto de ecuaciones (2.4) muestra las relaciones entre las alineaciones de espines y el efecto de los operadores  $\sigma$ .

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) & \sigma^x |+\rangle &= +1 |+\rangle & \sigma^z |+\rangle &= |-\rangle \\ |-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) & \sigma^x |-\rangle &= -1 |-\rangle & \sigma^z |-\rangle &= |+\rangle \\ |0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) & \sigma^x |0\rangle &= |1\rangle & \sigma^z |0\rangle &= +1 |0\rangle \\ |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle) & \sigma^x |1\rangle &= |0\rangle & \sigma^z |1\rangle &= -1 |1\rangle \end{aligned} \quad (2.4)$$

En la ecuación (2.3), el caso  $h = 0$  recupera el comportamiento de una cadena clásica de Ising, que tiene dos estados base degenerados y ferromagnéticamente ordenados, es decir, todos los espines en estado  $|+\rangle$  o  $|-\rangle$ . Por las relaciones (2.4), es evidente la degeneración de los estados base al aplicar el operador *Spin-flip* (2.5) [36], pues  $\sigma^z |\pm\rangle \neq |\pm\rangle$ , respectivamente. En el caso  $h \rightarrow \infty$ , las fluctuaciones cuánticas fuertes destru-

yen la ferromagnetización, i.e. la alineación de los espines en dirección  $X$ . Entonces existe un solo estado base no degenerado, donde el estado de los espines es  $|0\rangle$  o  $|1\rangle$ . Se observa la no degeneración del estado base por la ecuación (2.4), específicamente,  $\sigma^z |0\rangle = |0\rangle$  y  $\sigma^z |1\rangle = -|1\rangle$ . En el límite termodinámico, cuando el número de espines conformantes tiende a infinito, el estado base del hamiltoniano (2.3) exhibe una transición cuántica de fase de segundo orden en el punto crítico  $h/J = 1$ . Esta se observa como una discontinuidad en la magnetización esperada en dirección  $Z$ :  $\langle \psi | \sigma^z | \psi \rangle$ , con  $|\psi\rangle$  el estado base. La brecha de la discontinuidad decrece exponencialmente en función del número de espines [37]. Además, el punto crítico  $h/J = 1$  establece el criterio para la degeneración del estado base: los casos  $h/|J| < 1$  y  $h/|J| \geq 1$  son análogos a los casos  $h = 0$  y  $h \rightarrow \infty$ , respectivamente.

$$\text{Spin - flip operator} \equiv \bigotimes_k \sigma_k^z \quad (2.5)$$

### 2.1.1. Transformación de Jordan-Wigner y modelo fermiónico equivalente

Según Nielsen [38], la transformación de Jordan-Wigner es una herramienta que permite mapear un sistema de fermiones interactuantes a un sistema de espines interactuantes, y viceversa. Es una aplicación particular de las relaciones canónicas de conmutación para fermiones. Se tiene un conjunto de operadores  $\{a_k : a_k \in \mathcal{W}\}$ , con  $\mathcal{W}$  un espacio de Hilbert. Estos operadores satisfacen las ecuaciones (2.6), llamadas relaciones canónicas de conmutación para fermiones, donde  $\{A, B\} = AB + BA$  es el anticonmutador.

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij} \mathbb{I} \quad \{a_i, a_j\} = 0 \quad (2.6)$$

A partir de estas relaciones, se derivan varias propiedades de los operadores  $\{a_k : a_k \in \mathcal{W}\}$ . Las que son pertinentes para este trabajo son:

- $a_j^\dagger a_j$  es un operador definido positivo y hermítico con autovalores 0 y 1.

- Para un autovector de  $a_j^\dagger a_j$ ,  $a_j$  y  $a_j^\dagger$  actúan como operadores escalera. Específicamente,  $a_j$  transforma el autovector con autovalor 1 en el autovector con autovalor 0, mientras que  $a_j^\dagger$  transforma el autovector con autovalor 0 en el autovector con autovalor 1. Estas son las únicas transiciones admitidas, en casos contrarios, el resultado es cero.
- Para un autovector de  $a_j^\dagger a_j$ , a través de las operaciones  $a_j^\dagger$  y  $a_j$  se puede construir un conjunto de estados ortonormales que son simultáneamente autoestados de  $a_j^\dagger a_j$ .

Para un conjunto de  $n$  espines, el espacio de Hilbert asociado es  $\mathcal{X} = \mathbb{C}^{2^n}$ . Entonces, se define el conjunto de operadores  $\{a_k : a_k \in \mathcal{X}\}$  que satisfacen las ecuaciones (2.6). Se define un vector  $|\eta\rangle$  en la representación de números de ocupación, de manera que  $|\eta\rangle = |\eta_1, \dots, \eta_n\rangle$ . Si  $\eta_j = 0$ ,  $a_j |\eta\rangle = 0$ . En cambio, si  $\eta_j = 1$ ,  $a_j |\eta\rangle = (-1)^{\sum_{l < j} \eta_l} |\dots, \eta_{j-1}, 0, \eta_{j+1}, \dots\rangle$ . Ahora, se identifica el estado  $|\eta\rangle$  con un estado de la base computacional del espacio  $\mathcal{X}$ . Así, la forma de los operadores  $\{a_k : a_k \in \mathcal{X}\}$  es (2.7). Esto permite expresar las matrices de Pauli en función del operador  $a_k$  y de su adjunto, y viceversa, dando lugar a la transformación de Jordan-Wigner (2.8), un mapeo de espines a fermiones [39].

$$a_k = \left( \bigotimes_{l=1}^{k-1} \sigma_l^z \right) \otimes |0\rangle \langle 1| = \left( \bigotimes_{l=1}^{k-1} \sigma_l^z \right) \otimes \left[ \frac{\sigma_k^x + i\sigma_k^y}{2} \right] \quad (2.7)$$

$$\begin{cases} \sigma_k^z = a_k a_k^\dagger - a_k^\dagger a_k = \mathbb{I} - 2a_k^\dagger a_k \\ \sigma_k^x = \left( \bigotimes_{l=1}^{k-1} [\mathbb{I} - 2a_l^\dagger a_l] \right) \otimes (a_k^\dagger + a_k) \\ \sigma_k^y = i \left( \bigotimes_{l=1}^{k-1} [\mathbb{I} - 2a_l^\dagger a_l] \right) \otimes (a_k^\dagger - a_k) \end{cases} \quad (2.8)$$

Con la expresión para  $\sigma_k^x$  de las ecuaciones (2.8) se escribe  $\sigma_k^x \sigma_{k+1}^x$  de la forma (2.9), donde A es el adjunto de la suma inmediata anterior. Junto a la expresión para  $\sigma_k^z$ , se reescribe el hamiltoniano (2.3) en función del operador  $a_k$  y su adjunto, lo que resulta en el hamiltoniano equivalente (2.10).

$$\sigma_k^x \sigma_{k+1}^x = \left( a_k^\dagger - a_k \right) \left( a_{k+1}^\dagger + a_{k+1} \right) = a_k^\dagger a_{k+1}^\dagger + a_k^\dagger a_{k+1} + A \quad (2.9)$$

$$H = -J \sum_k \left( a_k^\dagger a_{k+1}^\dagger + a_k^\dagger a_{k+1} + A \right) - h \sum_k \left( \mathbb{I} - 2a_k^\dagger a_k \right) \quad (2.10)$$

El hamiltoniano (2.10) es de forma cuadrática y no conserva el número de fermiones debido a los la forma que se construyen los términos individuales correspondientes. El número de fermiones se notará  $\mathcal{N}$ . Con este hamiltoniano, se introduce el análisis de las condiciones de borde. La cadena puede ser abierta o periódica. Con  $N$  el número de espines conformantes, el caso periódico satisface que el espín  $N + 1$  es el espín 1. Considerando (2.7) se obtienen las expresiones (2.11). El término  $\wp$  es el operador (2.5), que también se llama paridad y depende de  $\mathcal{N}$  de la siguiente forma:  $\wp = 1$  si  $\mathcal{N}$  es par,  $\wp = -1$  si  $\mathcal{N}$  es impar; entonces  $\wp = (-1)^{\mathcal{N}}$ . A pesar de que no se conserva  $\mathcal{N}$ , se ha de conservar  $\wp$  debido a que el término  $\sigma_k^x \sigma_{k+1}^x$  en (2.3) únicamente voltea pares de espines. Este hecho se denomina como la simetría de paridad o simetría  $\mathbf{Z}_2$ ; se conoce que el modelo rompe esta simetría al atravesar el punto crítico  $h/|J| = 1$  y entrar en la fase ferromagnética [36]. En otras palabras, la paridad de los estados de la cadena cambia dependiendo si se encuentran en la zona  $h/|J| < 0$  o  $h/|J| > 0$ .

$$\begin{aligned} \sigma_N^x \sigma_{N+1}^x &\equiv \sigma_N^x \sigma_1^x = \left( a_1 - a_1^\dagger \right) \otimes \left( \bigotimes_{l=2}^{N-1} \left[ \mathbb{I} - 2a_l^\dagger a_l \right] \right) \otimes \left( a_N^\dagger + a_N \right) \\ &\equiv \sigma_N^x \sigma_1^x = - \left( \bigotimes_{l=1}^N \left[ \mathbb{I} - 2a_l^\dagger a_l \right] \right) \left[ \left( a_1 + a_1^\dagger \right) \otimes \cdots \otimes \left( a_N^\dagger - a_N \right) \right] \\ &\equiv \sigma_N^x \sigma_1^x = - \left( \bigotimes_{l=1}^N \sigma_l^z \right) \left[ \left( a_1 + a_1^\dagger \right) \otimes \cdots \otimes \left( a_N^\dagger - a_N \right) \right] \\ &\equiv \sigma_N^x \sigma_1^x = -\wp \left( a_1 + a_1^\dagger \right) \left( a_N^\dagger - a_N \right) \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned}
H_\alpha = & -J \sum_{k=1}^{N-1} \left( a_k^\dagger a_{k+1}^\dagger + a_k^\dagger a_{k+1} + A \right) - h \sum_{k=1}^N \left( \mathbb{I} - 2a_k^\dagger a_k \right) \\
& + J\alpha \left( a_N^\dagger a_1^\dagger + a_N^\dagger a_1 + A \right)
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Se escribe el hamiltoniano (2.10) de una forma más general, incluyendo el término periódico, que resulta en (2.12). Así, se tiene la siguiente clasificación de condiciones de borde de la cadena:

- Si  $\alpha = 0$ , se tiene una cadena abierta con hamiltoniano  $H_{OPC}$  (Open Boundary Conditions).
- Si  $\alpha \neq 0$ , se tiene una cadena cerrada. Ahora  $\alpha = (-1)^p$ .
  - Si  $p = 0$  entonces  $\alpha = -1$ , que es equivalente a  $\mathcal{N}$  par. Este caso se denomina cadena cerrada con hamiltoniano  $H_{ABC}$  (Anti-periodic Boundary Conditions). Esta notación se debe a que  $\alpha = -1$  también es equivalente a  $a_{N+1} = -a_1$ .
  - Si  $p = 1$  entonces  $\alpha = 1$ , que es equivalente a  $\mathcal{N}$  impar. Este caso se denomina cadena cerrada con hamiltoniano  $H_{PBC}$  (Periodic Boundary Conditions). En este caso,  $\alpha = 1$  también es equivalente a  $a_{N+1} = a_1$ .

La forma del hamiltoniano (2.12) resulta ideal pues `OpenFermion` [29] tiene una clase llamada `FermionOperator` que almacena sumas de productos de los operadores  $a_k$  y  $a_k^\dagger$ . Esta se utiliza dentro de una función local llamada `QuantumIsingHamiltonian` que depende de los parámetros `J`, `h`, `periodic` y `BoundaryConditions`, donde los dos últimos son de tipo booleano y permiten determinar si la cadena tiene OBC, ABC o PBC. Esta función local devuelve una instancia de `FermionOperator` que almacena (2.12) en forma de operador fermiónico y con los parámetros asignados; además, devuelve una instancia de `QuadraticHamiltonian`, otra clase de `OpenFermion` que almacena hamiltonianos que son cuadráticos en los operadores fermiónicos  $a_k$  y  $a_k^\dagger$ .

### 2.1.2. Transformación de Bogoliuvob

La transformación de Bogoliuvob es la transformación de base que diagonaliza el hamiltoniano. En la ecuación (2.13), se forman los operadores  $b_k^\dagger$  al aplicar una matriz unitaria  $\mathcal{U}$  a los operadores  $a_k^\dagger$ . Es posible definir una matriz unitaria  $\mathcal{V}$  tal que se obtiene (2.14), de manera que  $b_k^\dagger$  es una combinación lineal de los  $a_l^\dagger$ . La unitaria  $\mathcal{U}$  es la que permite diagonalizar el hamiltoniano (2.12), lo que resulta en (2.15) [34].

$$\mathcal{U}a_k^\dagger\mathcal{U}^\dagger = b_k^\dagger \quad (2.13)$$

$$b_k^\dagger = \sum_l \mathcal{V}_{kl}a_l^\dagger \quad (2.14)$$

$$H = \sum_k \varepsilon_k b_k^\dagger b_k + \text{constante} \quad (2.15)$$

La transformación unitaria  $\mathcal{V}$  se utiliza para mapear un estado de la base computacional a uno de los autovectores del hamiltoniano, que son los autoestados del modelo y que tienen asociada una energía que depende de  $\varepsilon_k$ . Mbeng [39] realiza una deducción clara de la expresión para  $\varepsilon_k$ , donde se utilizan los operadores  $a_k$  en el espacio de momentos (2.16), con  $e^{-i\phi}$  una fase global. Mbeng establece los posibles valores de  $j$ , escritos en forma de conjunto (2.17), considerando las condiciones para ABC y PBC,  $a_{N+1} = -a_1$  y  $a_{N+1} = a_1$ , respectivamente. Tras realizar la transformación de Bogoliuvob, la expresión para  $\varepsilon_k$  es (2.18).

$$c_j = \frac{e^{-i\phi}}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N e^{-ijk} a_k \quad (2.16)$$

$$\begin{cases} \mathcal{J}_{ABC} = \left\{ j = \pm \frac{(2n-1)\pi}{N} : n = 1, \dots, \frac{N}{2} \right\} \\ \mathcal{J}_{PBC} = \left\{ j = \frac{2n\pi}{N} : n = -\frac{N}{2} + 1, \dots, 0, \dots, \frac{N}{2} \right\} \end{cases} \quad (2.17)$$

$$\varepsilon_k = 2J \sqrt{\left( \cos k - \frac{h}{J} \right)^2 + \sin^2 k} \quad (2.18)$$

$$E_{GS}^{ABC} = - \sum_{k>0}^{\mathcal{J}_{ABC}} \varepsilon_k \quad E_{GS}^{PBC} = -2J - \sum_{0<k<\pi}^{\mathcal{J}_{PBC}} \varepsilon_k \quad (2.19)$$

Existirá un estado base para cada caso de condiciones de borde. Centrando el análisis en las condiciones periódicas, las energías de los estados base (ground state, del inglés) se describen con las ecuaciones (2.19), y estos se obtienen tras aplicar una transformación, derivada de la unitaria  $\mathcal{V}$ , al estado  $|0\rangle^{\otimes N}$  que se identifica como el vacío del espacio fermiónico. Sin embargo, el estado base del caso ABC demuestra tener una menor energía que el caso PBC, por lo que se denomina estado base global [39, 40]. Esto se debe al término  $-2J$  en la ecuación (2.19) que genera un fermión en el estado base. Este hecho es consistente con lo mencionado anteriormente: que el número de fermiones en el caso PBC será impar. Además, la creación de este fermión en el estado base es lo que permite al caso PBC mostrar la transición cuántica de fase al alcanzar el punto crítico  $h/J = 1$  y producirse la ruptura de simetría de paridad,  $\varphi = -1$  a  $\varphi = 1$ .

La clase `QuadraticHamiltonian` implementa un método que diagonaliza el hamiltoniano y retorna la matriz de transformación de vectores de la base computacional a los autovectores del hamiltoniano. Esta matriz de transformación se descompone en compuertas unitarias nativas de la librería `Cirq`, siguiendo el proceso descrito por Jiang [41]. De esta manera, para un sistema de  $N$  espines, el estado  $|0\rangle^{\otimes N}$  en la base computacional es mapeado al autoestado base de la cadena cuántica de Ising en función de los parámetros  $J, h$  y condiciones de borde.

## 2.2. Programación con Cirq y OpenFermion

Se empleará un modelo de cadena cuántica de Ising con cuatro espines para ilustrar el uso de la simulación, detallando los procesos necesarios a través de diagramas de flujo. Eventualmente, se realizarán mediciones con más de 4 espines para observar la dependencia del modelo y sus propiedades físicas con el número de espines. Sin embargo, se alcanzó un límite de 14 espines, impuesto por las capacidades del equipo de cómputo utilizado. En lo que sigue, además se proporcionará una explicación de cada paso del procedimiento, con el fin de garantizar una comprensión clara de la metodología utilizada para extraer información de la simulación.

### 2.2.1. Generación de autoestados

Se define la función local `QuantumIsingHamiltonian`. Sus argumentos se describen en el cuadro (A.1) del Anexo A. Esta función retorna una instancia de `FermionOperator` en la que almacena una estructura tipo (2.12) con los parámetros ingresados. Además, retorna una instancia de la clase `QuadraticHamiltonian` que se crea a partir del operador fermiónico y almacena su estructura especificando la cuadratura en operadores  $a_k$  y  $a_k^\dagger$ . Con `num_qubits = 4`, `J = 1.0`, `h = 0.5`, `periodic = True`, `BoundaryConditions = 1` y `printModel = True`, la función imprime lo siguiente en la consola:

```
Hamiltonian Function :
  (-1+0j) [X0 X1] +
  (-1+0j) [Y0 Z1 Z2 Y3] +
  (-0.5+0j) [Z0] +
  (-1+0j) [X1 X2] +
  (-0.5+0j) [Z1] +
  (-1+0j) [X2 X3] +
  (-0.5+0j) [Z2] +
  (-0.5+0j) [Z3]

Number of qubits : 4
```

Luego, se define la función local `SimulateHamiltonian`. Sus argumentos se describen en el cuadro (A.2). Con `num_qubits = 4` y la instancia de `QuadraticHamiltonian` generada anteriormente por la función `QuantumIsingHamiltonian`, el circuito cuántico que resulta se muestra en la figura (2.1). Cada línea representa un qubit y el diagrama acíclico representa las operaciones que se aplican sobre los qubits con un ordenamiento de izquierda a derecha. Los qubits en un circuito cuántico de Cirq se inicializan en el estado  $|0\rangle$ . La compuerta *I.S.* son compuertas  $X$  o identidad que generan un estado inicial según se indique con `InitialState`. Por ejemplo, si `InitialState = [0, 2, 3]` el estado inicial es  $X \otimes I \otimes X \otimes X |0000\rangle = |1,0,1,1\rangle$ . Las últimas compuertas del

circuito son mediciones, lo que indica que se extraen estados computacionales clásicos, es decir, 0 o 1. Las compuertas  $R_z$  representan una rotación alrededor del eje  $Z$  en la base de Bloch, mientras que la compuerta  $\mathcal{U}$  representa la *PhasedISWAP*, una compuerta *ISWAP* fraccional conjugado por rotaciones  $Z$ ; su forma matricial es (2.20), con  $a = \cos\left(\frac{\pi t}{2}\right)$ ,  $b = \sin\left(\frac{\pi t}{2}\right)$  y  $c = e^{2\pi i p}$ .

$$PhISWAP = (Z^{-p} \otimes Z^p) ISWAP^t (Z^p \otimes Z^{-p}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & ibc & 0 \\ 0 & ibc^* & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

La función `SimulateHamiltonian` retorna 4 objetos tras haber compilado el circuito cuántico de la figura (2.1): una instancia `Density_op::matrix` que almacena el operador densidad como una matriz, una instancia `Final_st_vector::list` que almacena el vector estado final como una lista, dos diccionarios `FullHistogram::dict` y `SortedHistogram::dict` que almacenan las relaciones entre los posibles estados computacionales finales del circuito y su respectiva probabilidad de medición. La diferencia entre ellos radica en que `FullHistogram` incluye todos los estados y sus probabilidades, incluso las de probabilidad cero, mientras que `SortedHistogram` omite los estados con probabilidad cero, conservando solo aquellos con probabilidad distinta de cero. Esto se hace para optimizar futuras operaciones con estos diccionarios. En la figura (2.2) se muestra el proceso general para la generación de un autoestado de la cadena cuántica de Ising.

### 2.2.2. Magnetización en dirección Z

A partir de la generación de un estado, existen dos formas de hallar la magnetización en dirección  $Z$ :  $M_Z = \langle \phi | \sigma^z | \phi \rangle \equiv \langle \sigma^z \rangle_\phi$ . Una estrategia consiste en programar un operador de Pauli mediante la aplicación de compuertas  $Z$  sobre el estado de cada qubit. Sin embargo, este enfoque requiere un número considerable de compilaciones del circuito cuántico junto con el operador de Pauli, del orden de 10,000 repeticiones. Además,

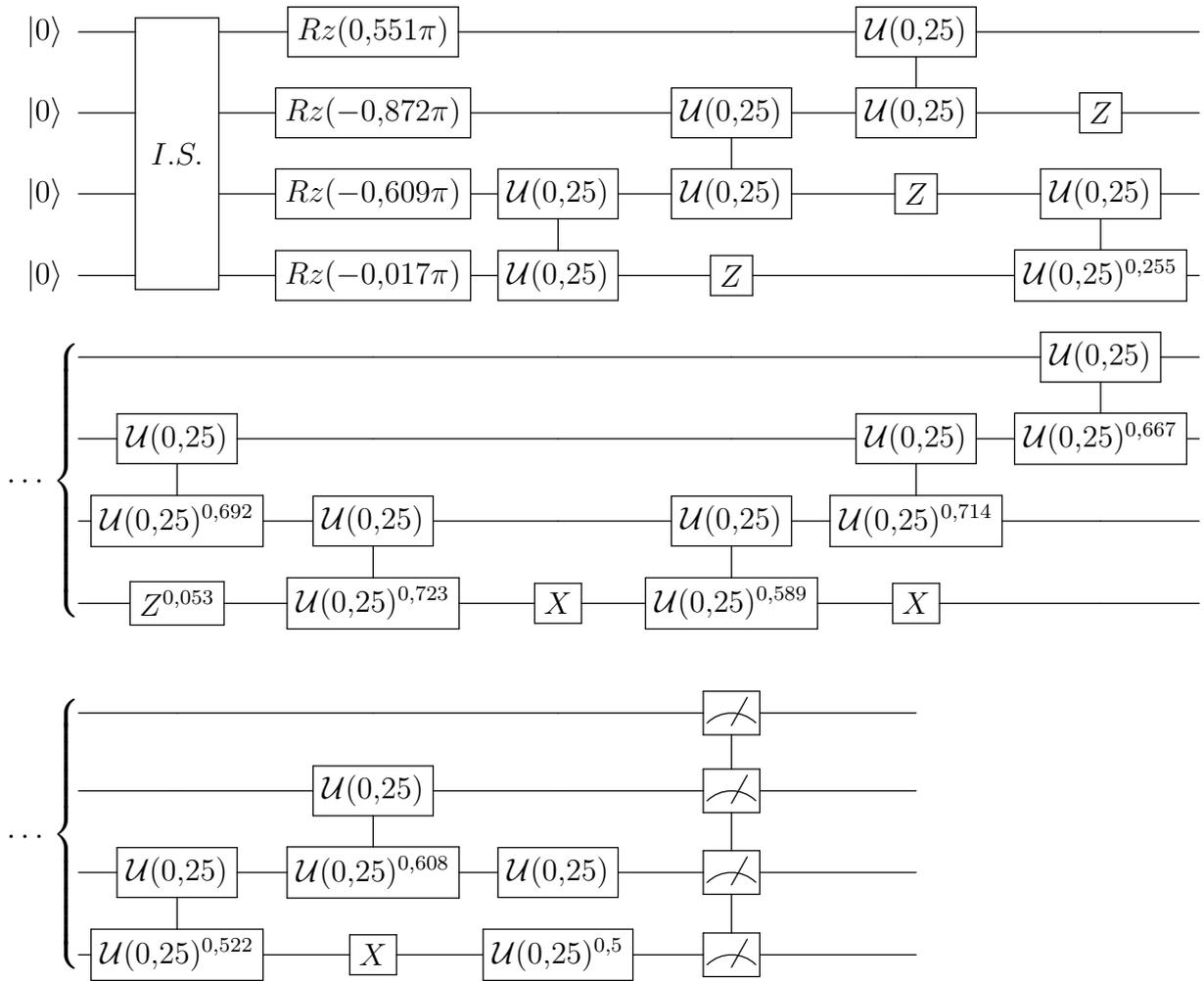


Figura 2.1: Circuito cuántico que transforma el estado  $|0000\rangle$  al estado base de una cadena cuántica de Ising conformada por 4 espines, con PBC e intensidades  $J = 1$  y  $h = 0,5$ .

al enviar este circuito a una computadora cuántica, es necesario que esta descomponga las compuertas del circuito en sus compuertas nativas. Si las compuertas nativas no incluyen la compuerta  $Z$ , estas deben ser descompuestas, lo que incrementa tanto el costo computacional como el error asociado al ruido cuántico de aplicación de compuertas.

La otra estrategia consiste en simular el circuito cuántico un número considerable de veces hasta que se obtenga una buena aproximación de las probabilidades de medir cada estado posible. Esto se logra aumentando el valor del argumento `repetitions` en la función `SimulateHamiltonian`. Usando las relaciones de  $\sigma^z$  en el conjunto de ecuaciones (2.4) se conclu-

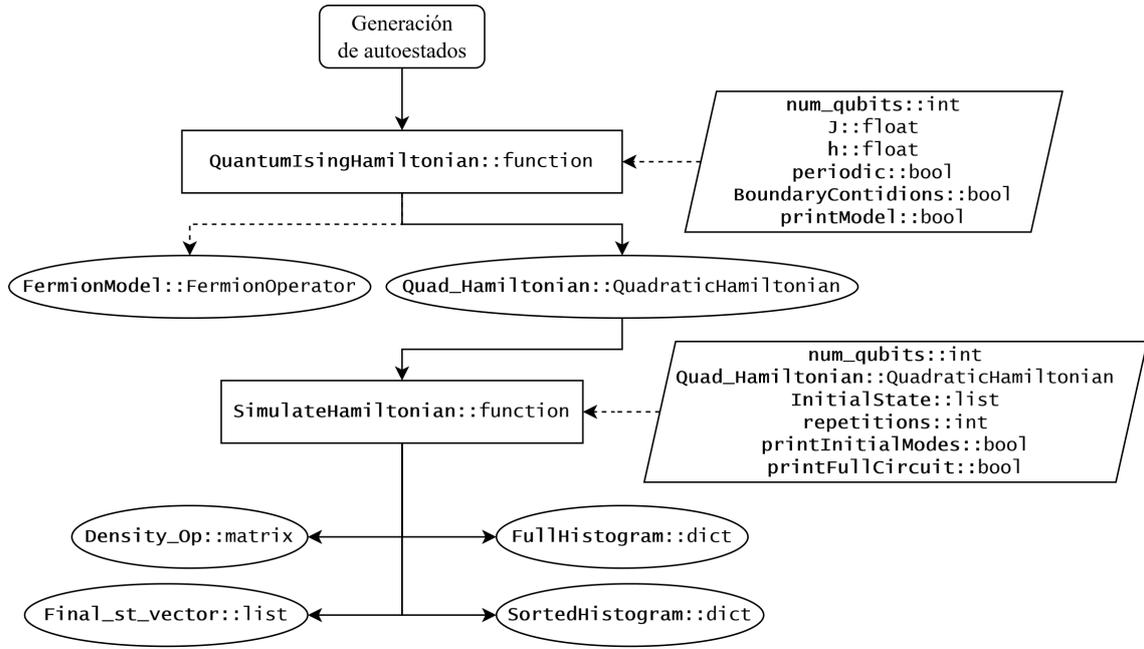


Figura 2.2: Diagrama de flujo que ilustra el proceso *Generación de autoestados*. Los argumentos de las funciones `QuantumIsingHamiltonian` y `SimulateHamiltonian` ingresan al proceso. Las funciones generan los resultados del proceso, representados con las instancias encerradas en óvalos. Estos resultados ingresan a próximos procesos según se requiera.

ye la ecuación (2.21) para la magnetización en dirección Z. El conjunto  $\{0, 1\}^N$  contiene a las cadenas de longitud  $N$  conformadas de ceros y unos. Los términos  $n_0(k)$  y  $n_1(k)$  son la cantidad de ceros y unos en la cadena  $k$ , y  $p_k$  es la probabilidad de que se mida el estado asociado a la cadena  $k$ . De este modo, cada término del sumatorio en la ecuación (2.21) representa la suma de los espines alineados en la dirección del campo magnético y en la dirección opuesta, considerando que un espín que apunta en la dirección del campo magnético se cancela con otro espín que apunta en la dirección contraria. Así, en este apartado únicamente se define una función local `ExpectedMagnetization` de argumentos por defecto `num_qubits::int` el número de espines y un diccionario `results::dict` que relaciona estados y sus probabilidad de medición al final del circuito cuántico. Se muestra el flujo del proceso en la figura (2.3).

$$M_z = \frac{1}{N} \sum_{k \in \{0,1\}^N} p_k [n_0(k) - n_1(k)] = \frac{1}{N} \sum_{k \in \{0,1\}^N} p_k [N - 2 \cdot n_1(k)] \quad (2.21)$$

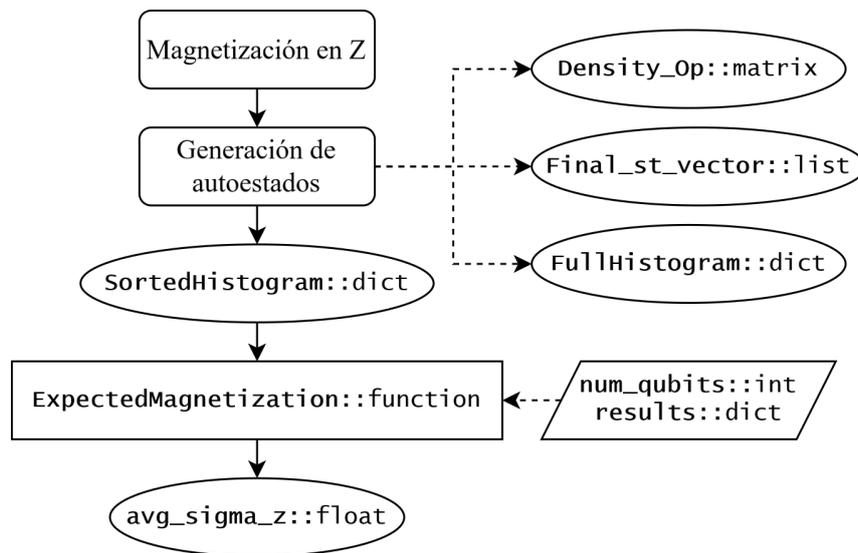


Figura 2.3: Diagrama de flujo que ilustra el proceso *Magnetización en Z*. El resultado *SortedHistogram* del proceso *Generación de autoestados* ingresa a la función *ExpectedMagnetization* que entrega el resultado del proceso: la magnetización promedio en dirección Z.

### 2.2.3. Correlación entre espines en direcciones X y Z

Las funciones de correlación son esenciales para el estudio de la magnetización y las transiciones de fase en sistemas de espines. Por ello, se

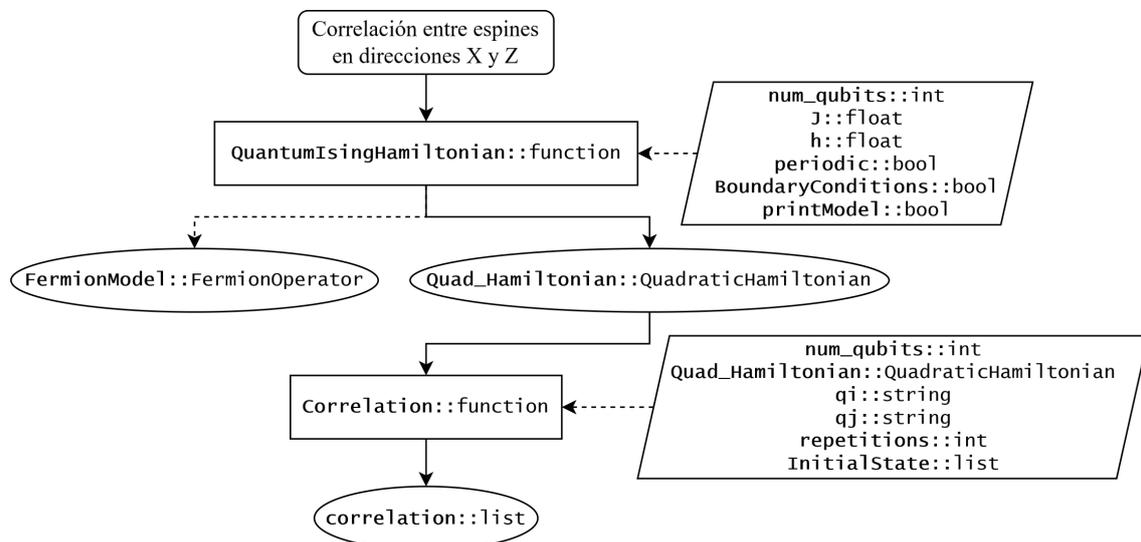


Figura 2.4: Diagrama de flujo que ilustra el proceso *Correlación entre espines en direcciones X y Z*. Se ingresan los argumentos a la función *QuantumIsingHamiltonian*, que produce la instancia *Quad\_Hamiltonian*. Éste producto se ingresa a la función *Correlation*, que retorna el resultado del proceso: una lista con los valores de los términos  $\langle \phi | \sigma_1^i \sigma_i^j | \phi \rangle$ .

han desarrollado diversos métodos numéricos para calcular estas funciones [42]. Sin embargo, al tratar con un sistema de unos cuántos espines, es óptimo calcular la correlación en direcciones  $X$  o  $Z$  mediante la generación de un operador tipo Pauli conformado por los operadores  $\sigma^x$  o  $\sigma^z$  aplicados en los espines de índices 1 e  $i$ -ésimo, siguiendo las expresiones (2.22). Además, se dispone del método para calcular el término  $M_Z$ . Para aumentar la exactitud de los resultados se realizaron hasta 300000 repeticiones del circuito cuántico correspondiente, debido a que la correlación en dirección  $Z$  es baja. Se evidencia el alto costo computacional de esta tarea en caso de compilar en una computadora cuántica real.

$$C_i^x = \langle \phi | \sigma_1^x \sigma_i^x | \phi \rangle \quad C_i^z = \langle \phi | \sigma_1^z \sigma_i^z | \phi \rangle - M_Z \quad (2.22)$$

Se define la función local `Correlation` que involucra dos procesos: la aplicación de la matriz de transformación de Bogoliubov sobre un vector de la base computacional y la obtención del valor esperado de un operador tipo Pauli; para el segundo proceso se utiliza la función propia de `Cirq.measure_observables`. Los argumentos de la función `Correlation` se describen en el cuadro (A.3). En la figura (2.4) se muestra el flujo del proceso para obtener las correlaciones en direcciones  $X$  o  $Z$ .

#### 2.2.4. Energía del estado base y bandas de energía

Las instancias de `QuadraticHamiltonian` poseen los métodos `orbital_energies` y `ground_energy` que retornan las brechas de energía entre los estados del hamiltoniano y la energía del estado base. Estos valores no son simulados, sino calculados numéricamente por el método de la diagonalización del hamiltoniano, por lo que únicamente es útil y óptimo cuando el número de espines de la cadena es relativamente bajo, específicamente 14 espines o menos.

Se utilizó este método para calcular las brechas de energía y la energía del estado base del modelo con  $N = 4$ . Con este objetivo, se definió una función local `GetEnergies` cuyos argumentos se describen en el cuadro (A.4). Sin embargo, el hamiltoniano (2.3) se escribe como un operador tipo Pauli y puede simularse en el entorno local o en un procesador

cuántico. Entonces, se define la función local `SimulateEnergy` que admite los mismos argumentos que la función `QuantumIsingHamiltonian` y el argumento `repetitions::int` de la función `SimulateHamiltonian`. En el interior de la función `SimulateEnergy` se genera una instancia de `QuadraticHamiltonian` que se requiere para hallar la transformación de Bogoliubov del estado de la base computacional a un autoestado de la cadena. Luego, se construye el operador tipo Pauli del hamiltoniano (2.3) y se simula el valor esperado a través de la función propia de `CirqPauliSumCollector`.

En la figura (2.5) se muestra el flujo del proceso para la obtención de la energía. Se espera una comparación de la energía del estado base con las variaciones de  $h$  y el número de espines  $N$ . Mbeng [39] indica que en las regiones ferromagnética,  $|h| < J$ , y no ferromagnética,  $|h| > J$ , la diferencia de la energía de los estados base en los casos PBC y ABC es una cantidad finita en función de  $h$  y  $J$ , pero decrece exponencialmente al incrementar del número de espines. Sin embargo, en el punto crítico  $h = J$ , esta cantidad alcanza el máximo y decrece como una ley de potencias.

### 2.2.5. Entropía de entrelazamiento

Un estado se describe como entrelazado cuando no es posible especificar previamente, y en términos de correlaciones clásicas, las correlaciones entre los registros que almacenan el estado general del sistema [11]. En otras palabras, un sistema cuyo estado es entrelazado exhibe propiedades generales que no se pueden describir utilizando los estados individuales de los subsistemas constituyentes. Este comportamiento se refleja en la separabilidad del estado. Específicamente, en un sistema bipartito el entrelazamiento entre los dos registros se asocia a la inexistencia de  $\rho_A$  y  $\rho_B$  tal que el estado general  $\rho$  es  $\rho_A \otimes \rho_B$  [11].

La entropía de entrelazamiento, que se describe con la ecuación (2.23), es una medida teórica de cantidad de aleatoriedad o incertidumbre inherentes al estado  $\rho$  y se la considera una generalización de la entropía de Shannon hacia registros que almacenan estados cuánticos. Se ha estudiado en el caso de sistemas cuánticos de muchos cuerpos al describir el grado de entrelazamiento de los estados y mostrar la existencia de co-

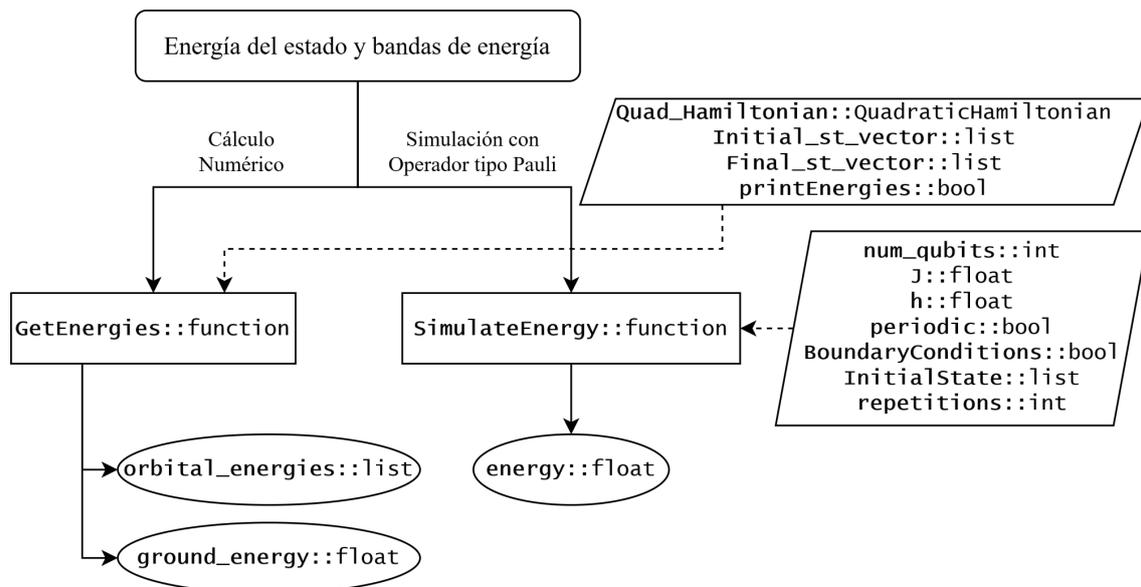


Figura 2.5: Diagrama de flujo que ilustra el proceso *Energía del estado y bandas de energía*. Se ingresan los argumentos de las funciones `GetEnergies` o `SimulateEnergy` según se requiera calcular numéricamente o simular la energía de un estado. La función `GetEnergies` retorna como resultado del proceso una lista con los valores de las brechas de energía entre autoestados y el valor de la energía del estado base, mientras que `SimulateEnergy` únicamente retorna el valor de energía del autoestado asociado al estado inicial del circuito cuántico definido por `InitialState`.

relaciones cuánticas no locales. Además, se la ha relacionado con las transiciones cuánticas de fase en sistemas cuyo estado base a temperatura cero exhibe naturalmente un estado entrelazado [43, 44], como es el caso de la cadena cuántica de Ising.

$$S = Tr(\rho \ln(\rho)) \quad (2.23)$$

En este trabajo se utilizó la entropía de bipartición de cadenas de Ising con  $N$  par. Entonces, se determinan los bloques  $A$  y  $B$  de la cadena como la primera y segunda mitad de los espines. Los estados de estos bloques se hallan trazando sobre los grados de libertad del bloque contrario, lo que corresponde a las expresiones (2.24), donde  $\rho$  el estado de la cadena completa. La entropía de entrelazamiento de los bloques se halla con la ecuación (2.23).

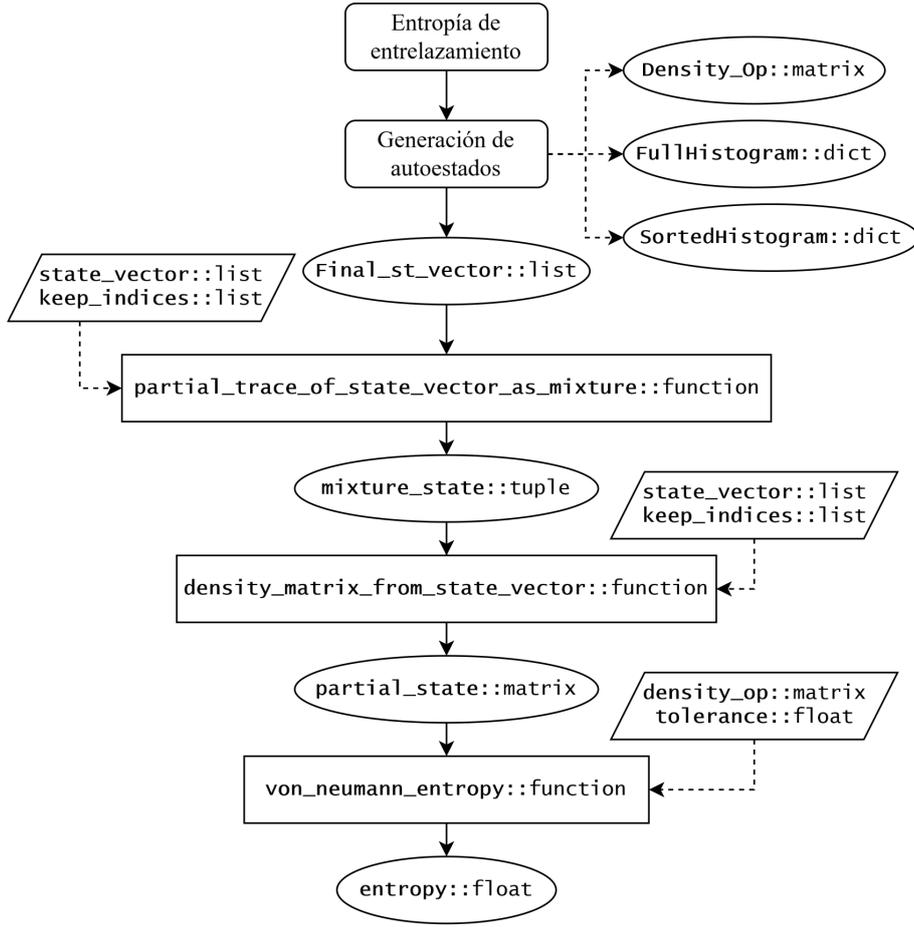


Figura 2.6: Diagrama de flujo que muestra el proceso *Entropía de entrelazamiento*. Se utiliza el proceso *Generación de autoestados* para obtener un autoestado `Final_st_vector` como una lista. Ésta lista ingresa a la función de Cirq `partial_trace_of_state_vector_as_mixture` que produce una tupla de coeficientes y listas que representan estados reducidos cuya suma convexa es el estado trazado parcialmente sobre el espacio de los espines fuera de la lista `keep_indices`. El estado trazado parcialmente ingresa a la función de Cirq `density_matrix_from_state_vector`, ahora con `keep_indices` una lista vacía para mantener todos los grados de libertad del estado reducido. El resultado ingresa a la función de Cirq `von_neumann_entropy` que produce el resultado del proceso: la entropía de entrelazamiento del sistema parcialmente reducido.

$$\rho_B = \text{Tr}_{1, \dots, \frac{N}{2}}(\rho) \quad \rho_A = \text{Tr}_{\frac{N}{2}+1, \dots, N}(\rho) \quad (2.24)$$

Desde el punto de vista computacional, calcular la traza parcial sobre un subespacio conociendo solo la matriz es una tarea compleja. Por ello, se optó por el método descrito en la figura (2.6) para calcular numéricamente la entropía de entrelazamiento. Con el argumento `tolerance` se establece una tolerancia de  $10^{-5}$  para evitar errores numéricos en la función logaritmo. Ya que no es posible expresar la entropía de entrelazamiento como un operador tipo Pauli, no se puede simular esta magnitud en una computadora cuántica utilizando métodos descritos en este trabajo. El cálculo numérico se utilizará para verificar la validez de la simulación dentro del límite de 14 espines o menos. Sin embargo, es posible estimar la entropía de entrelazamiento utilizando una combinación de redes neuronales clásicas y circuitos cuánticos variacionales, que es un método conocido como QNEE (Quantum Network Entropy Estimator) [45].

## 2.3. Características esperadas en la simulación

La simulación deberá mostrar las siguientes características:

- Con  $h = 0$ , los estados base de los casos ABC y PBC son degenerados y de paridad contraria. La magnetización en  $Z$  es cero en ambos casos.
- La magnetización en  $Z$  será continua en los casos OBC y ABC, mientras que PBC mostrará una discontinuidad en el punto crítico  $h/J = 1$ .
- Fuera de la fase ferromagnética,  $h > J$ , el estado base de todos los casos tiende a  $|0\rangle^{\otimes N}$ .
- La magnetización del estado base es constante en el tiempo cuando el modelo no interactúa con el entorno, pues se trata de un estado en equilibrio a temperatura cero.
- En el caso ABC, la paridad del estado base se mantiene al variar  $h$ , mientras que en el caso PBC, la paridad del estado base cambia al alcanzar el punto crítico  $h = J$ .

- Los espines cercanos estarán correlacionados y esta cantidad decrece al considerar espines lejanos.
- La energía del estado base del caso ABC es menor que la del estado base de PBC. Su diferencia es finita y alcanza un máximo en el punto crítico. Además, decrece exponencialmente al aumentar el número de espines, excepto en el punto crítico, donde el decrecimiento es lento respecto al exponencial.
- En el caso PBC, la energía de transición del estado base al primer estado excitado es cero en el punto crítico.
- El estado base es un estado entrelazado y el grado de entrelazamiento decrece al aumentar  $h$ .

## 2.4. Evolución temporal con QSWalk.jl

Se considerará el caso PBC de cuatro espines con  $J = 1$  y  $h$  variable. Para cada valor de  $h$ , se exportan los hamiltonianos y operadores densidad del estado base como matrices dispersas y se importan dentro del cuaderno de Julia. Junto con la simulación de la evolución temporal del estado base, se simula la evolución de los estados  $|0000\rangle$  y  $|1111\rangle$  al ser los estados que determinan las cotas de magnetización y energía. La simulación requiere la definición de un vector con elementos no negativos que representan los instantes de tiempo en los que se calcula el operador densidad siguiendo la ecuación (1.3). Las unidades dependerán de las unidades del hamiltoniano, asegurando la coherencia. Por esta razón, el eje temporal en los gráficos no muestra unidades.

Las magnitudes que se calcularán numéricamente serán: la energía, la magnetización y las poblaciones del operador densidad, específicamente las proyecciones sobre  $|0000\rangle \langle 0000|$  y  $|1111\rangle \langle 1111|$ . La energía se obtiene con la ecuación (2.25) [12], mientras que la magnetización sigue una variación del proceso *Magnetización en Z*, que ahora utiliza los valores de la diagonal del operador densidad, que son las probabilidades de medición de los estados computacionales. Las poblaciones son extraídas directamente del operador densidad.

$$E = \langle H \rangle_\rho = \text{Tr}(\rho H) \quad (2.25)$$

Las funciones `evolve_generator` y `evolve` de `QSWalk.jl` simulan la evolución temporal. Se ingresan el hamiltoniano y un vector que contiene los operadores de Lindblad a la función `evolve_generator`, que retorna un generador. La función `evolve` toma el generador y un vector para situar el estado inicial de la evolución temporal y los instantes de tiempo en los que se calcula los operadores densidad.

### 2.4.1. Operadores de Lindblad implementados

- Operadores escalera en el primer espín.** Estos operadores se definen con las matrices de Pauli según se muestra en las expresiones (2.26). El efecto de  $\sigma^-$  sobre los vectores de la base computacional es que llevan el estado  $|0\rangle$  al estado  $|1\rangle$  pero al aplicarlo sobre  $|1\rangle$  el resultado es cero; mientras que el efecto de  $\sigma^+$  es llevar el estado  $|1\rangle$  al  $|0\rangle$  y resulta en cero cuando se aplica en  $|0\rangle$ . Además, satisfacen  $(\sigma^-)^\dagger = \sigma^+$  y viceversa. Este tipo de operadores se utilizan para simular un entorno donde un sistema de dos estados está acoplado a una cavidad óptica [17], y el sistema puede absorber o emitir un fotón.

$$\sigma^- = \frac{\sigma^x - i\sigma^y}{2} \quad \sigma^+ = \frac{\sigma^x + i\sigma^y}{2} \quad (2.26)$$

Para definir estos operadores con `OpenFermion` se utiliza la función `QubitOperator`, que aplica los operadores (2.2) sobre los espines que se especifiquen. Por lo tanto, se generan instancias de `QubitOperator` que almacenen estructuras con las expresiones (2.26). Estas estructuras se exportan como matrices dispersas.

- Operadores escalera en todos los espines.** Se consideran las expresiones (2.27) como operadores, donde cada término aplica un operador escalera en el espín  $i$ -ésimo y operadores identidad en los demás espines.

$$\hat{L}_1 = \sum_{i=1}^4 \sigma_i^- \quad \hat{L}_2 = \sum_{i=1}^4 \sigma_i^+ \quad (2.27)$$

Además, se considera el caso donde se ingresan los operadores  $\hat{L}_1$  y

$\hat{L}_2$  como operadores de Lindblad con coeficientes de amortiguación 1 y  $\gamma$ , respectivamente, con  $\gamma$  variable.

- **Transiciones entre estados computacionales.** En el contexto de caminatas cuánticas, el hamiltoniano del sistema es una matriz que indica la conexión de nodos y, por lo tanto, determina las posibles transiciones del caminante. El hamiltoniano puede ser escrito en la forma de la ecuación (2.28), donde  $|i\rangle$  y  $|j\rangle$  son estados de la base computacional y  $h_{ij}$  es un coeficiente. Cuando  $h_{ij} \neq 0$  se tiene que el caminante puede pasar del estado  $|j\rangle$  al estado  $|i\rangle$ . Entonces, cada matriz de transición  $h_{ij} |i\rangle \langle j|$  se considera un operador de Lindblad.

$$H = \sum_{ij} h_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (2.28)$$

QSWalk.jl proporciona la función `local_lind` que a partir del hamiltoniano genera un vector de matrices dispersas donde cada elemento es una matriz de transición. Así, se obtiene el conjunto de operadores de Lindblad.

- **Transiciones entre autoestados del hamiltoniano.** De manera similar al punto anterior, se generan matrices de transición. En este caso, los estados  $|i\rangle$  y  $|j\rangle$  son autoestados del hamiltoniano. Estos se calculan numéricamente utilizando la función `eigen` de la librería `LinearAlgebra.jl` [32] y se agrupan en un conjunto cuyos elementos son de la forma  $|i\rangle \langle j|$ .

Además, se realizó un caso donde los coeficientes que se asocian a cada matriz de transición dependen de las autoenergías de los estados inicial y final, y de un parámetro  $\beta$ . Estas serían transiciones ponderadas. Así, el conjunto de los operadores de Lindblad para este caso es la expresión (2.29), donde  $\varepsilon_i$  y  $\varepsilon_j$  son las autoenergías asociadas a los estados  $|i\rangle$  y  $|j\rangle$ .  $\mathcal{Z}$  está descrito por la ecuación (2.30).

$$\left\{ L_{ij} = \frac{e^{-\beta(\varepsilon_i - \varepsilon_j)}}{\mathcal{Z}} |i\rangle \langle j| : |i\rangle, |j\rangle \text{ son autoestados} \right\} \quad (2.29)$$

$$\mathcal{Z} = \sum_{i,j} e^{-\beta(\varepsilon_i - \varepsilon_j)} \quad (2.30)$$

- **Transiciones ponderadas entre autoestados del hamiltoniano y operadores escalera en cada espín.** En este caso se considera un conjunto de operadores de Lindblad formado por las expresiones (2.29) y (2.27), con coeficientes 1 y  $\gamma$  para los sumatorios con  $\sigma_i^-$  y  $\sigma_i^+$ , respectivamente.

# Capítulo 3

---

## Resultados, conclusiones y recomendaciones

---

Las figuras presentadas en esta sección están en inglés para facilitar la comparación con los resultados de la literatura y la asimilación de los conceptos tratados.

### 3.1. Resultados sobre la simulación de la cadena cuántica de Ising

Los resultados presentados a continuación provienen de un simulador de procesador cuántico nativo de Cirq; es decir, no son producto de la ejecución en un computador cuántico real. Al compilar un circuito cuántico, como se muestra en la figura (2.1), los resultados adquieren la forma general representada en la figura (B.1), presente en el Anexo B. Esta figura es una representación gráfica de los datos almacenados en `FullHistogram` al concluir el proceso de generación de autoestados, ilustrado en la figura (2.2). Se utilizará la abreviatura GS para referirse al estado base.

En la figura (3.1) se observan los estados computacionales que conforman el GS de los casos ABC y PBC, junto con su probabilidad de medición. En ambos casos, a mayor  $h$  el GS tiende a  $|0000\rangle$ , pues a mayor intensidad de campo magnético transversal la alineación de los espines tiende a la dirección del campo. Con todos los valores de  $h$ , el GS de ABC

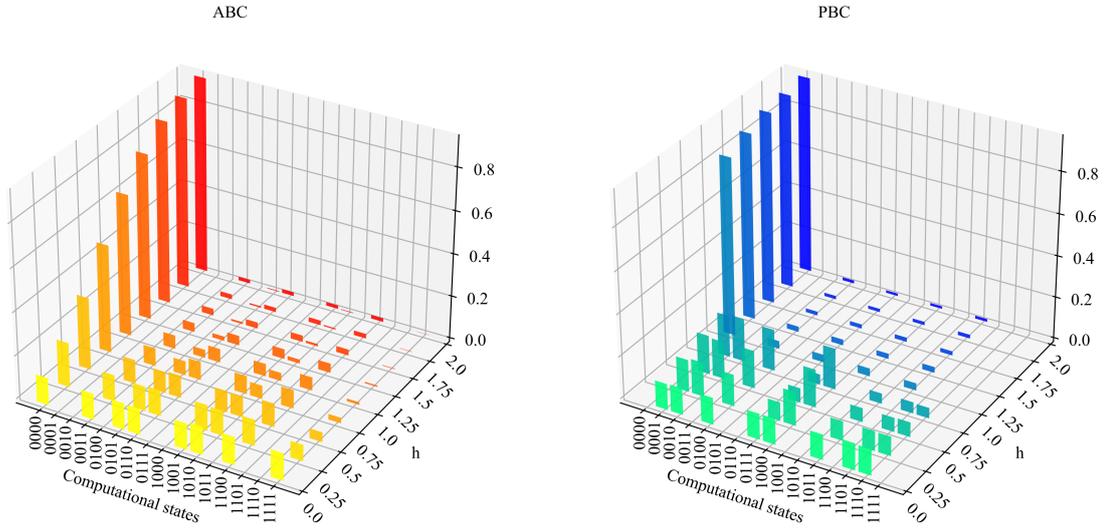


Figura 3.1: Probabilidades de medición de los estados computacionales que forman el GS de los casos ABC y PBC en distintos valores de  $h$ . En todas las mediciones se definió  $J = 1$ . El eje vertical representa la probabilidad de medición.

es una combinación de estados con un número par de estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ . Por lo tanto, la paridad del GS de ABC es  $\wp = +1$ . Por otro lado, cuando se satisface  $h < J = 1$ , el GS de PBC está conformado por estados con un número impar de estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ , lo que implica  $\wp = -1$ ; mientras que, si  $h > J = 1$  el GS de PBC está conformado únicamente por los estados  $|0000\rangle$ ,  $|0011\rangle$ ,  $|0110\rangle$ ,  $|1001\rangle$  y  $|1100\rangle$ , que implica  $\wp = +1$ . Así, se evidencia la ruptura de la simetría de paridad del GS de PBC al atravesar el punto crítico  $h = J$ .

Además, cuando  $h = 0$  los GS de ABC y PBC son estados degenerados, pues el resultado de la aplicación del operador *Spin-flip* (2.5) al GS de ABC difiere del GS de PBC. Esta degeneración se manifiesta también en la ortogonalidad de los estados, cuya combinación forma la base canónica del espacio de Hilbert del sistema de 4 espines.

En la figura (3.2) se observa que las mediciones de magnetización de los casos OBC y ABC se ajustan a funciones continuas. El caso PBC muestra la transición cuántica de fase, de ferromagnética a desordenada magnéticamente en dirección  $X$ , al atravesar el punto crítico. Estas mediciones se ajustan a la solución exacta proporcionada por Pfeuty [46] y concuerdan con los resultados de Cervera-Lierta [47]. En las figuras (3.3) y (B.2) se observa que la brecha de la discontinuidad se acorta al aumen-

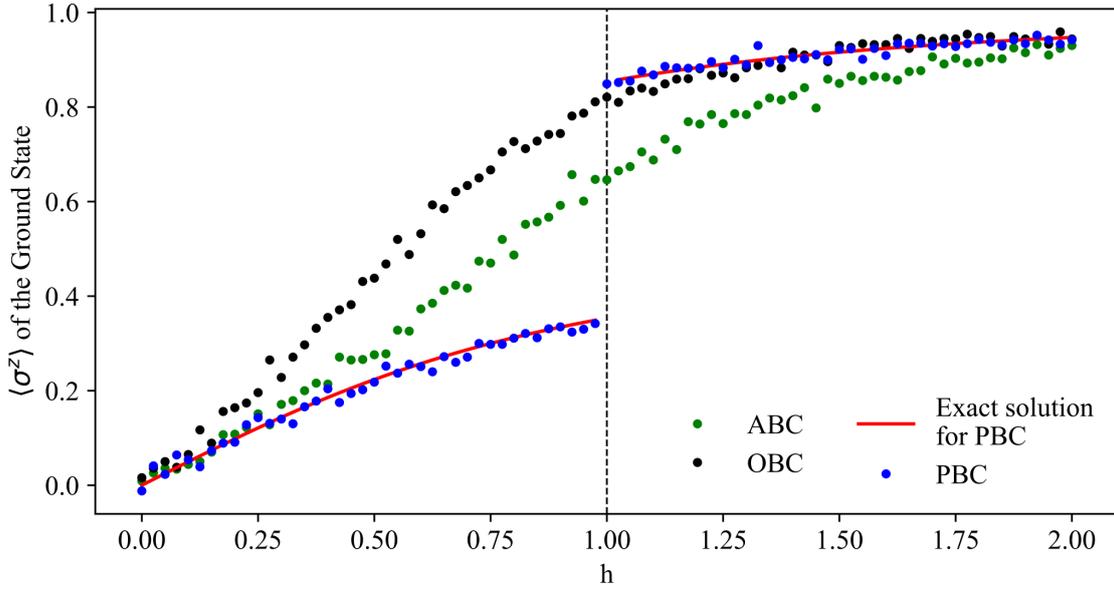


Figura 3.2: Magnetización en dirección Z al variar la intensidad del campo magnético transversal  $h$ . Se definió  $J = 1$  y 1000 repeticiones.

tar el número de espines. Además, las magnetizaciones de los casos ABC y PBC tienden a funciones continuas. Este hecho se justifica al afirmar que el aporte de dos espines a la magnetización es insignificante cuando el número de espines que conforman la cadena es mucho mayor a dos.

En la figura (3.4) se presentan las medidas de correlación en dirección X a diferentes valores de  $h$ . El GS de ABC muestra una correlación decreciente a medida que aumenta el número de espines y se aproxima al espín  $N/2$ . Posteriormente, la correlación vuelve a aumentar y exhibe un comportamiento simétrico debido a la topología de cadena cerrada. En la fase ferromagnética, la correlación tiende a una constante cercana a 1 conforme  $h$  decrece. Este comportamiento es similar en el caso PBC. Se esperaba este resultado por tratarse de la fase ferromagnética, donde es muy probable que los espines tiendan a alinearse en la misma dirección. Cuando  $h > J = 1$  en el caso ABC, la correlación decrece rápidamente respecto al caso  $h = J = 1$ . La diferencia es que la correlación en  $h = J$  tiende a una constante, mientras que en  $h > J$  decrece hacia cero. Pfeuty [46] calcula una expresión que describe la correlación en el punto crítico como una ley de potencias. Sin embargo, esta expresión se ajusta bien a los resultados hasta el cuarto espín. Las mediciones con  $h > J$  se ajustan a una función que decrece exponencialmente.

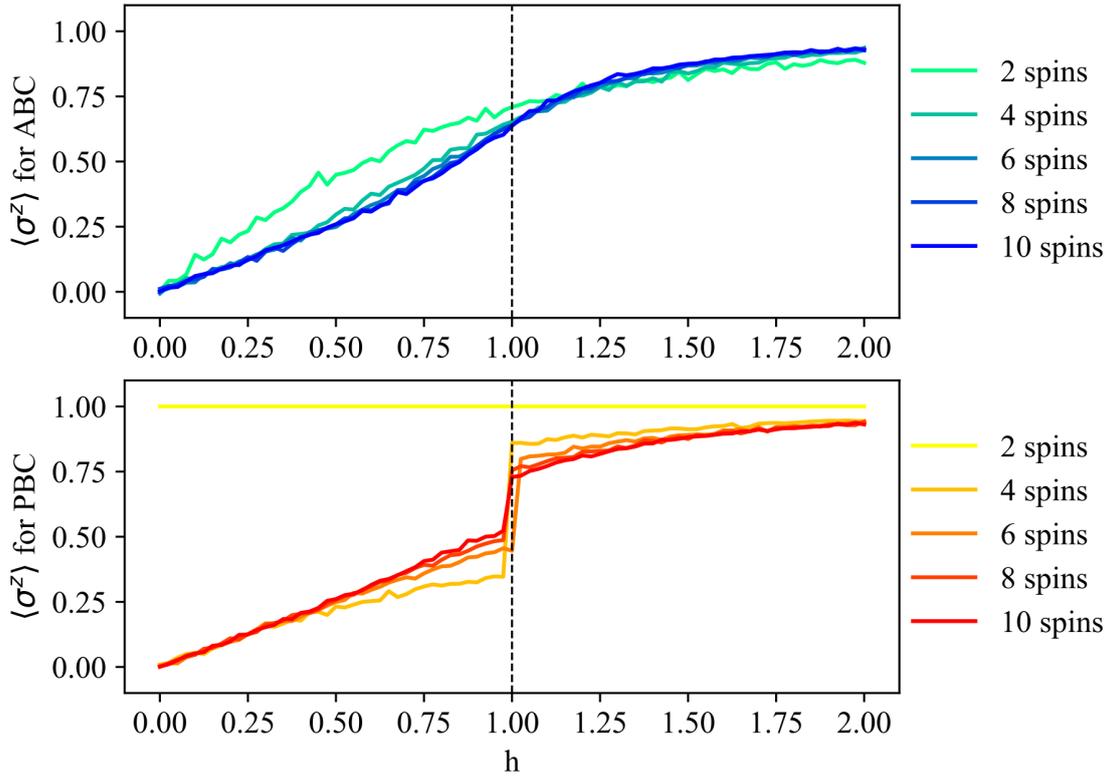


Figura 3.3: Magnetización en dirección Z al variar el número de espines y la intensidad de campo magnético transversal  $h$ . Se define  $J = 1$  y 3000 repeticiones.

El comportamiento de la correlación del GS de PBC en los casos  $h = J$  y  $h > J$  es interesante y novedoso. Además, no ha sido reportado en la literatura. La transición de correlaciones positivas a negativas al alcanzar el espín  $N/2$  indica que la mitad de la cadena se alinea en dirección del campo magnético, mientras que la otra mitad se alinea en dirección opuesta. Esto se evidencia también en los estados de la base computacional que conforman el GS de PBC en los casos  $h = J$  y  $h > J$ :  $|0000\rangle$ ,  $|0011\rangle$ ,  $|0110\rangle$ ,  $|1001\rangle$  y  $|1100\rangle$ ; véase la figura (3.1). Excepto por el estado  $|0000\rangle$ , estos estados tienen la característica de que su primera mitad es igual a la segunda mitad invertida. Además, que la correlación entre los espines 1 y 2 sea de signo contrario a la correlación de los espines 1 y  $N$  indica que cada espín tiende a tener un vecino alineado en su misma dirección mientras que el otro se alinea en dirección contraria.

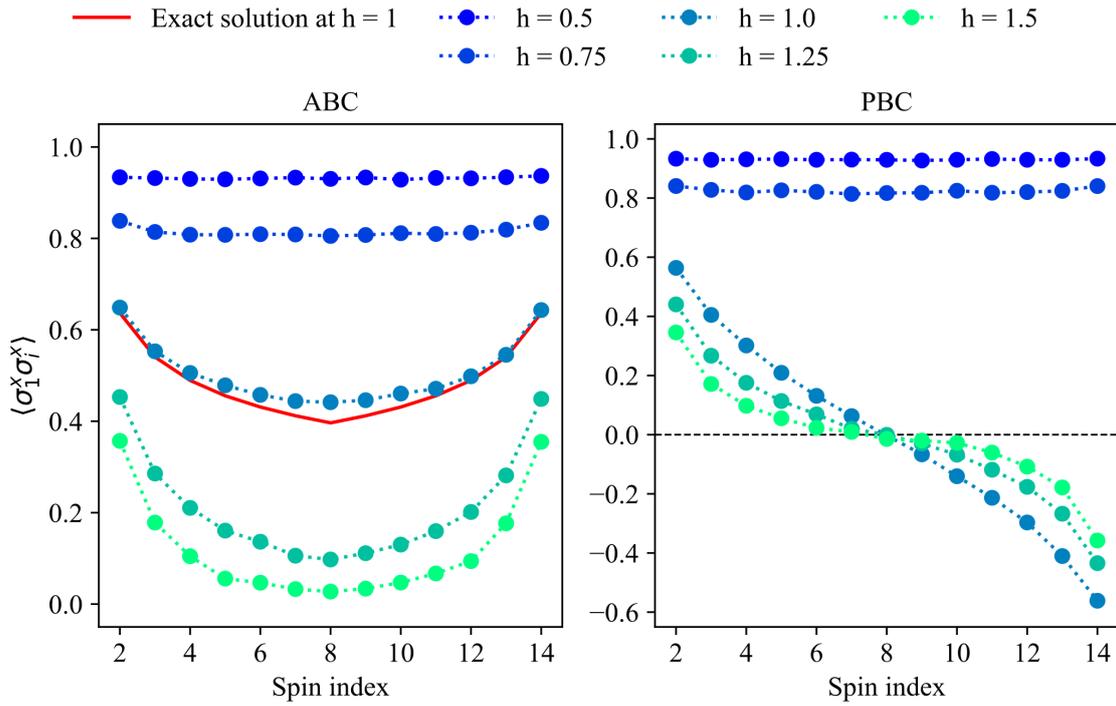


Figura 3.4: Correlación entre espines en dirección X del estado base de una cadena con 14 espines. Se definió  $J = 1$  y 30000 repeticiones.

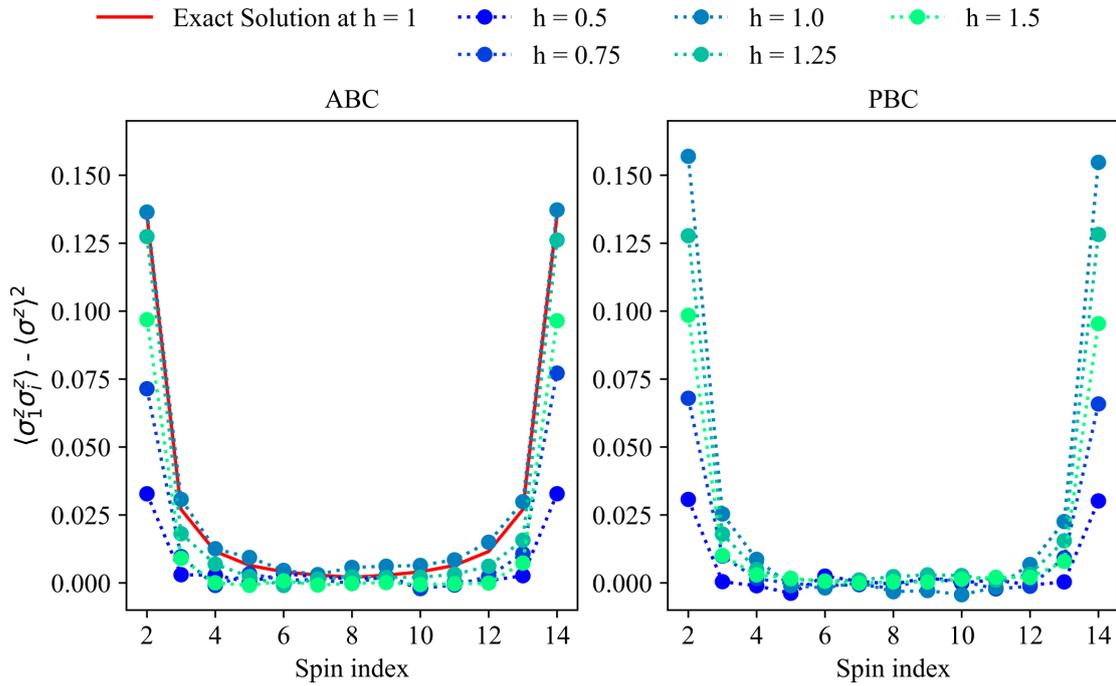


Figura 3.5: Correlación entre espines en dirección Z del estado base de una cadena con 14 espines. Se definió  $J = 1$  y 300000 repeticiones.

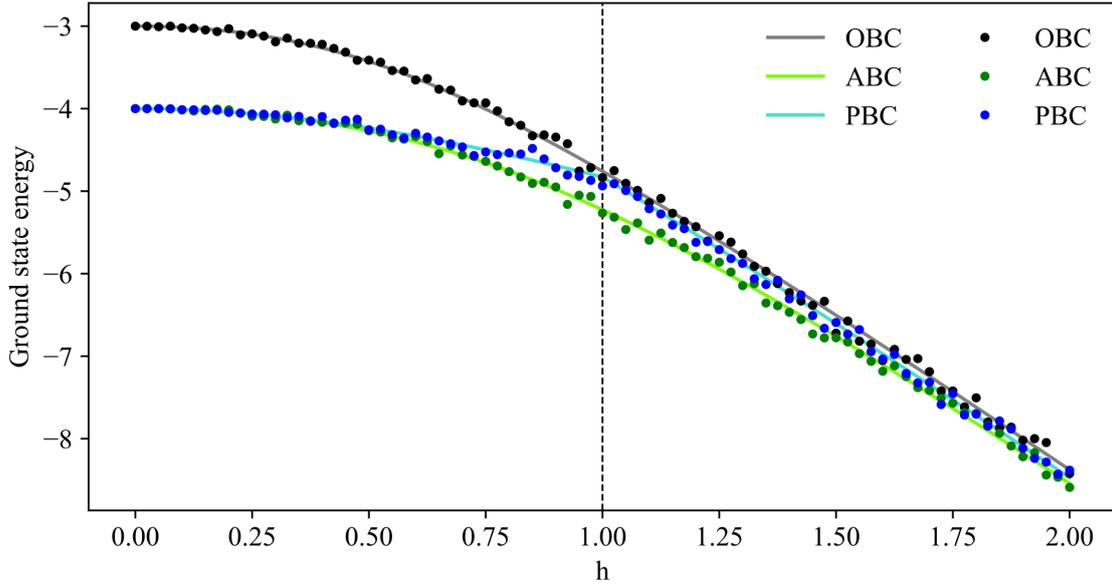


Figura 3.6: Energía de los estados base al variar la intensidad de campo magnético transversal  $h$ . Se definió  $J = 1$  y 1000 repeticiones. Las líneas continuas son resultados de la función `GetEnergies`, mientras que los puntos son resultados de la función `SimulateEnergy`.

La figura (3.5) muestra que la correlación entre espines en la dirección Z es menor en comparación con la correlación en la dirección X, y tiende rápidamente a cero para todo  $h$ . Además, los GS con ABC y PBC presentan correlaciones similares, salvo por una ligera diferencia en los espines adyacentes al espín 1. Se utilizó la expresión teórica de Pfeuty [46] para comparar con las mediciones, observándose un ajuste exacto.

En la figura (3.6) se observa la energía de los estados base. Las mediciones del caso PBC concuerdan con los resultados que presenta Pfeuty [46]. En  $h = 0$ , la energía de los GS de ABC y PBC son iguales, mientras que el GS de OBC los supera por  $J = 1$ . La simulación muestra que el GS de ABC es el estado base global de la cadena cuántica de Ising, pues su energía es menor a los casos PBC y OBC para todos los valores de  $h$ . Además, al aproximarse a  $h = J$  se observa una diferencia entre las energías de los GS de ABC y PBC. En la figura (3.7) se muestra que esta diferencia alcanza un máximo en el punto crítico y decrece tanto en la región ferromagnética como en la desordenada magnéticamente. Además, en la figura (3.8) se observa que la diferencia disminuye rápidamente al aumentar el número de espines. Al cambiar la escala del eje vertical a logarítmica,

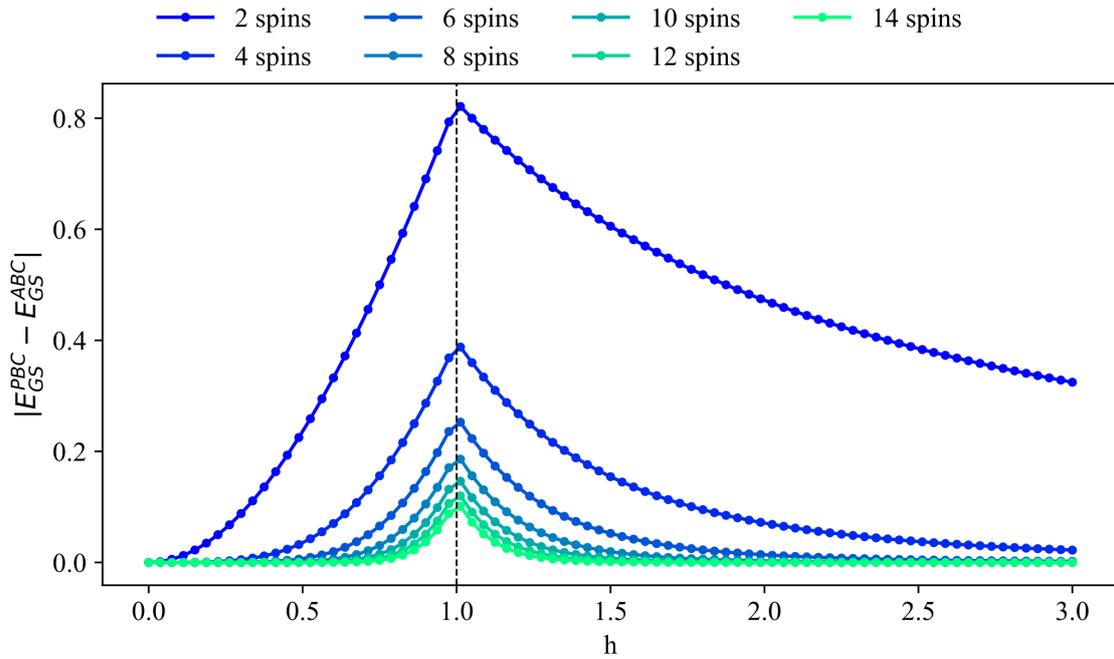


Figura 3.7: Diferencia entre las energías de los estados base de PBC y ABC al variar la intensidad de campo magnético transverso  $h$ . Se definió  $J = 1$ . Estos son resultados de la función `GetEnergies`.

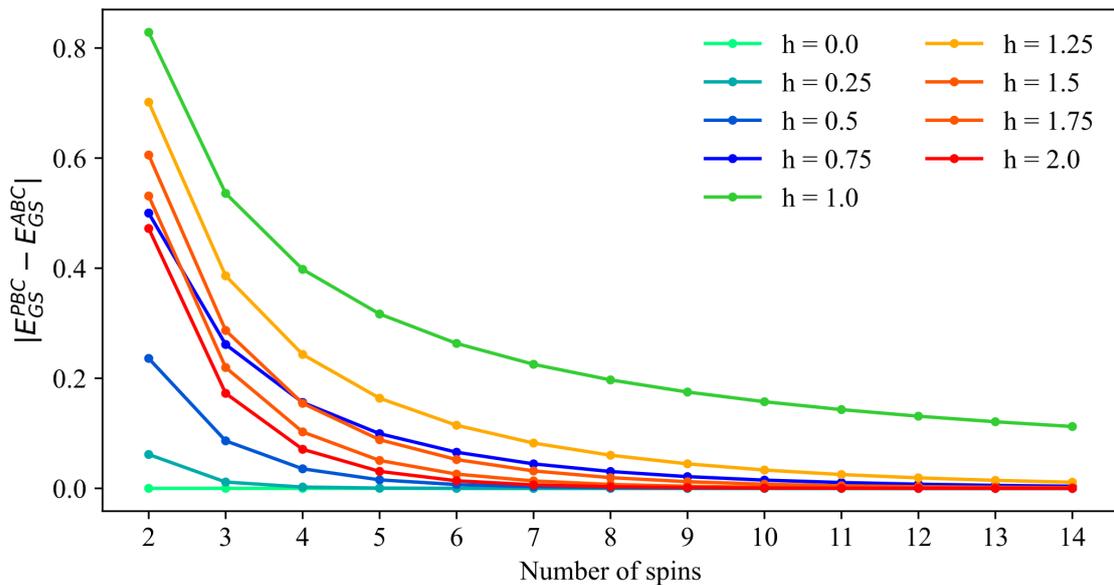


Figura 3.8: Diferencia entre las energías de los estados base de PBC y ABC al aumentar el número de espines a distintos valores de  $h$ . Se definió  $J = 1$ . Estos son resultados de la función `GetEnergies`.

véase la figura (B.3), el comportamiento lineal de la diferencia en función del número de espines sugiere que el decrecimiento es exponencial. Este

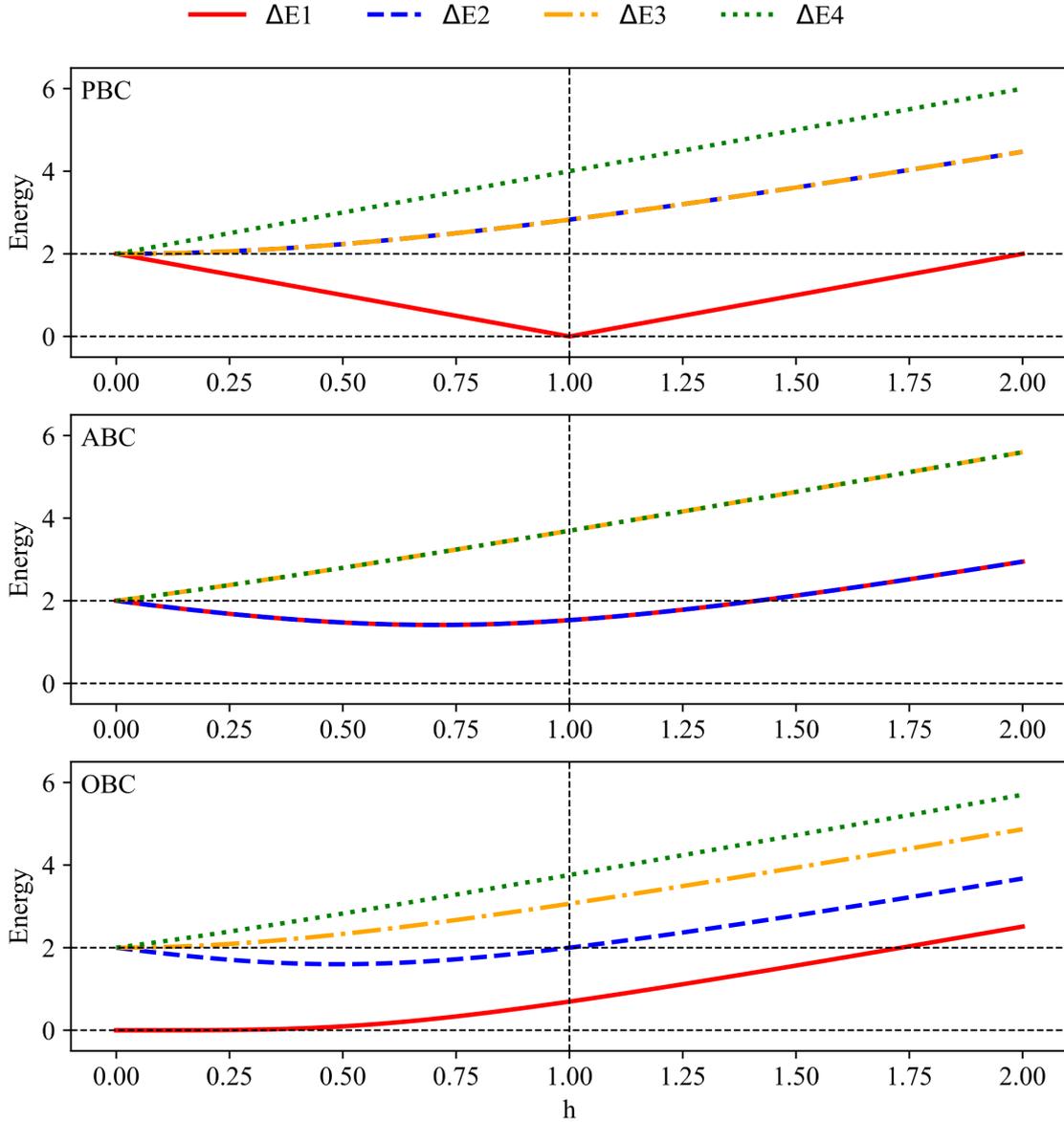


Figura 3.9: Brechas de energía entre los autoestados de los casos PBC, ABC y OBC al variar la intensidad de campo magnético transversal  $h$ . Se definió  $J = 1$ . Estos son resultados de la función `GetEnergies`.

decrecimiento es más lento en el punto crítico en comparación con otros valores de  $h$ .

En este trabajo, los elementos  $\varepsilon_k$  de la ecuación (2.15) se denominarán brechas de energía, ya que representan los valores cuya suma a la energía base resulta en las autoenergías de un estado excitado. En la Figura (3.9), una brecha  $\Delta E_i$  indica la separación de energía entre el estado base y el estado excitado que resulta de generar un fermión en el  $i$ -ésimo estado

del vacío de Bogoliubov. Los fermiones deben generarse en pares para conservar la paridad de los estados. Por lo tanto, la suma de un número par de  $\Delta E_i$ 's diferentes a la energía del estado base es lo que genera una autoenergía de algún estado excitado de la cadena cuántica de Ising.

En el caso  $h = 0$ , los casos periódicos muestran que sus brechas de energía tienen el mismo valor:  $2J$ . Por otro lado, el caso con OBC exhibe los valores  $2J$  y  $0$ , en concordancia con lo mencionado por Mbeng [39]. El caso con ABC muestra que sus brechas de energía adquieren dos valores, por lo que tendrá más autoestados con la misma energía. El caso con PBC muestra tres valores de brechas de energía, con una de ellas,  $\Delta E_1$ , igual a  $0$  en el punto crítico. Esto indica que al atravesar el punto crítico, la creación de un fermión en el estado que aporta la menor brecha de energía no altera la energía total del estado resultante; esto es equivalente a que el espín que se voltea súbitamente, generando la ruptura de simetría, no suma energía al estado base de la cadena.

En la figura (3.10) se observa que las entropías de entrelazamiento son distintas de cero y son iguales en ambas mitades de la bipartición de la cadena. Esto indica que los estados base de las cadenas están, en cierta medida, entrelazados. El grado de entrelazamiento en los 3 casos de condiciones de borde decrece al aumentar la intensidad de campo magnético transversal, pues las cadenas tienden al estado  $|0\rangle^{\otimes N}$ , que es un estado separable. Además, los casos con condiciones de borde periódicas muestran que la entropía de entrelazamiento tiende a un máximo, cuya curva se agudiza al aproximarse al punto crítico; este comportamiento concuerda con lo establecido por Iglói [44] utilizando otros métodos numéricos. Es importante recalcar que la entropía de entrelazamiento en el caso  $N = 2$  no es cero como se muestra en la figura (3.10), y su magnetización en  $Z$  no es 1 para todo valor de  $h$  en la figura (3.3). Esto se debe a la forma en que se obtuvieron los datos. En el caso  $N = 2$  se tiene, de manera particular, que los estados base son *estados de Bell*. Este caso interesante se discute en el Anexo C.

En la figura (3.11) se observa que la entropía de entrelazamiento en el punto crítico muestra un comportamiento distinto respecto a las fases ferromagnética y de desorden magnético, donde la entropía de entrelazamiento tiende a una constante al aumentar el número de espines con-

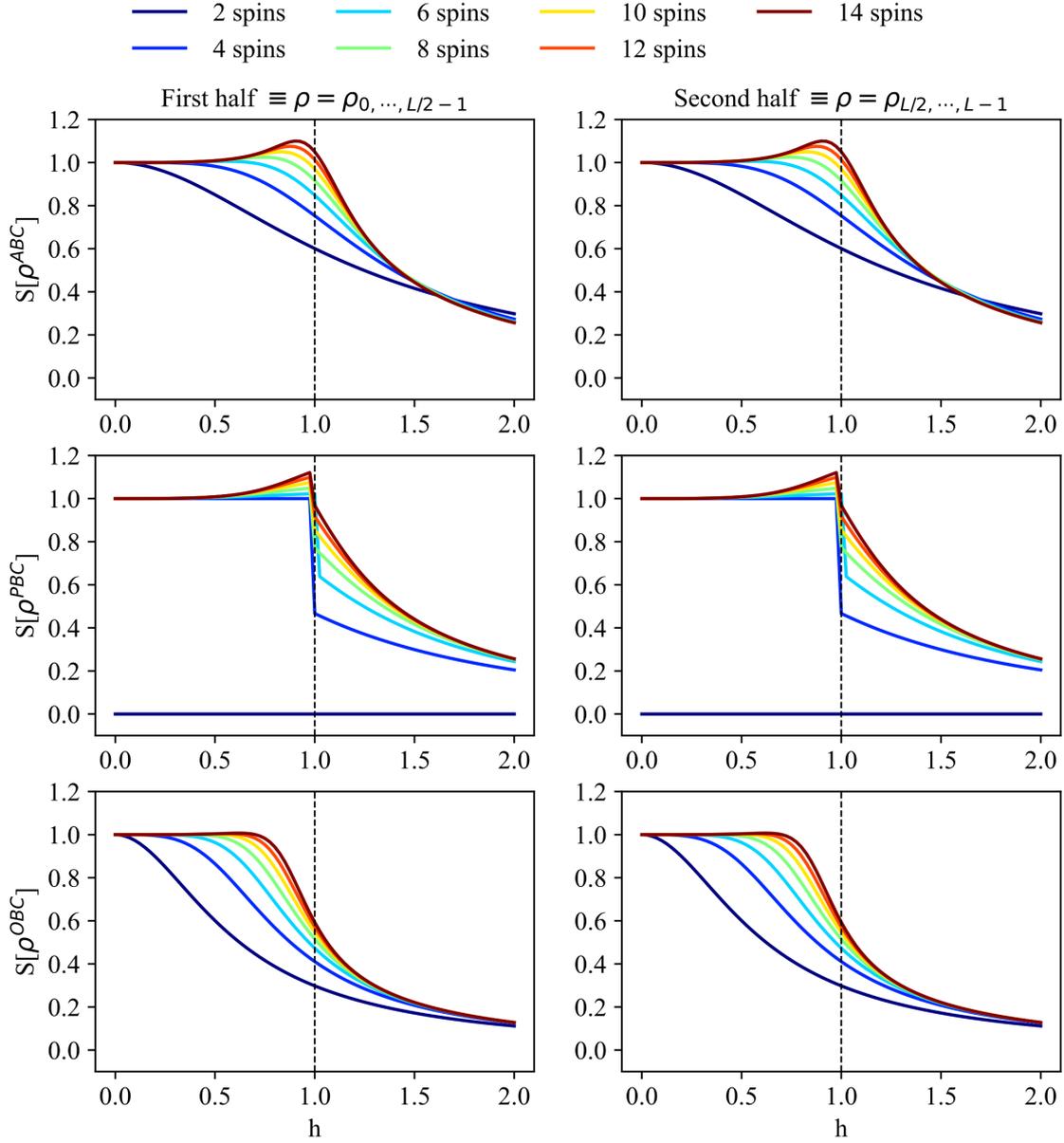


Figura 3.10: Entropía de entrelazamiento al variar la intensidad de campo magnético transversal  $h$ . Se definió  $J = 1$ . La columna izquierda muestra la entropía de Von Neumann del estado correspondiente a la primera mitad de espines de la cadena, mientras la columna derecha corresponde al estado de la segunda mitad de espines.

formantes. Sin embargo, en el punto crítico se observa que la entropía crece en función de los espines. Varios investigadores, como Latorre [43], Vidal [48] e Iglói [44], han demostrado que la entropía de entrelazamiento diverge con el número de espines siguiendo una ley de escalamiento logarítmico, similar a los resultados de este trabajo, que se discuten a

continuación.

En la figura (B.4) se realizó un ajuste a una función logarítmica en base 2. En general, se muestra un ajuste exacto a los datos de la simulación; los valores de los parámetros y varianza se muestran en (B.1). Esto sugiere que la entropía de entrelazamiento de los estados base en el punto crítico, entregados por la simulación, muestran el escalamiento logarítmico predicho. Se destaca el valor del parámetro  $a$  en el caso ABC,  $a = 0,1605718$ , que se tiene un error de 3,657 % relativo al valor teórico de  $1/6$  [44].

## 3.2. Resultados sobre la evolución temporal con la ecuación GKSL

Los resultados de las figuras (D.1, D.4, D.7, D.10, D.13, D.16), presentes en el Anexo D, corresponden a distintos operadores de Lindblad que involucran operadores escalera; véase el apartado *Operadores de Lindblad Implementados* en la **Metodología**. Se observa que las poblaciones del estado base correspondientes a las proyecciones sobre  $|0000\rangle$  y  $|1111\rangle$  convergen hacia las poblaciones de los estados  $|0\rangle^{\otimes 4}$  y  $|1\rangle^{\otimes 4}$  proyectadas sobre los mismos estados. El comportamiento general muestra que las poblaciones decrecen y oscilan alrededor de una media al aumentar la intensidad del campo magnético transversal. Se alcanzan valores de saturación a  $h$  grandes.

Sin embargo, el decrecimiento de la población en las figuras (D.19, D.22) es más rápido comparado con los resultados de los demás operadores de Lindblad. Además, al permitir transiciones entre estados computacionales o autoestados del hamiltoniano, las poblaciones se saturan a un valor constante. Se observa un cambio de comportamiento de las poblaciones del estado base en las zonas ferromagnética y desordenada, principalmente, en la población de los espines orientados en dirección al campo magnético:  $\langle \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow | \rho_{GS} | \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \rangle$ . Esta variación se relaciona directamente con el cambio súbito de la magnetización, producto de la transición de fase. Esto sugiere que la transición cuántica de fase no se pierde al acoplar la cadena a los distintos entornos simulados: cavidades ópticas y

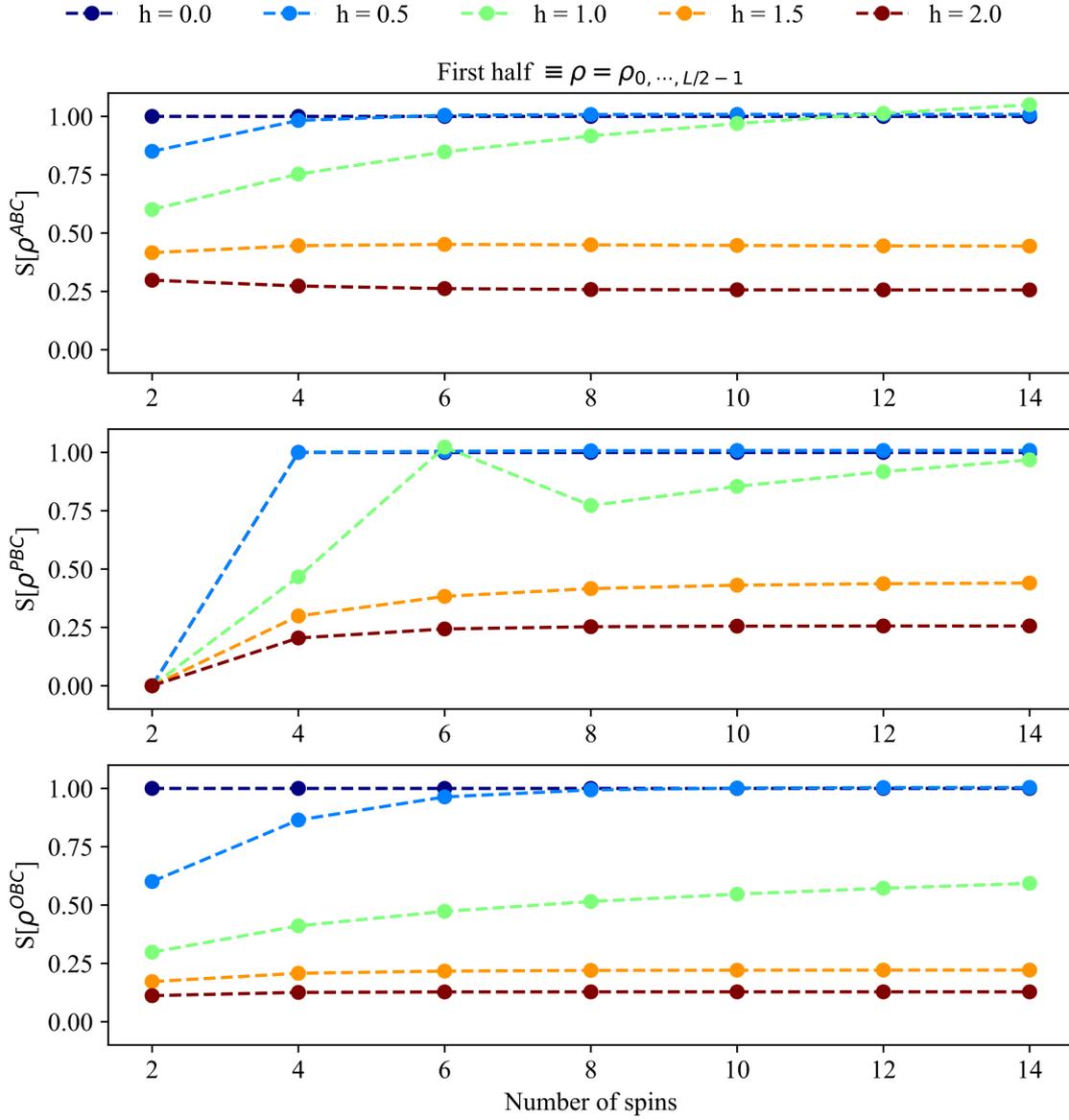


Figura 3.11: Entropía de entrelazamiento al variar el número de espines conformantes  $N$  y para distintos valores de  $h$ . La entropía del caso PBC con  $N = 6$  y  $h = 1$  es un valor atípico, provocado por un error computacional relacionado a la precisión de los valores de punto flotante.

baños tipo térmicos.

Los resultados de la figura (D.2) sugieren que el comportamiento natural de la magnetización en la cadena cuántica de Ising, sin interacciones con un entorno, es oscilar en el tiempo a una frecuencia que depende de la intensidad del campo magnético transversal. Sin embargo, el estado base, al ser un estado de equilibrio térmico, no cambia con el tiempo. Por lo tanto, su magnetización permanece constante. En la figura (D.3)

se muestra que la energía para todos los estados se mantiene constante. Esto es previsible, ya que el sistema no dispone de ningún mecanismo de absorción o disipación de energía.

En la figura (D.5) se observa el efecto de usar el operador  $\sigma^-$  en un solo espín sobre la magnetización. Los tres estados tienden a una magnetización constante de  $-0,5$  en la zona ferromagnética; mientras que en la zona desordenada, el estado  $|\downarrow\rangle^{\otimes 4}$  tiende a una magnetización distinta en comparación con los estados base y  $|\uparrow\rangle^{\otimes 4}$ , alcanzando el valor  $-1$  cuando la intensidad de campo magnético es suficientemente mayor al valor de  $J$ . La figura (D.6) muestra que, cuando  $h = 10$ , el estado  $|\downarrow\rangle^{\otimes 4}$  mantiene su energía en el tiempo, mientras que los estados base y  $|\uparrow\rangle^{\otimes 4}$  tienden a un estado excitado que, por su magnetización, se puede afirmar que no es un autoestado del hamiltoniano.

A partir del anterior análisis se concluye que tras un tiempo  $\tau$ , en el que los estados base y  $|\uparrow\rangle^{\otimes 4}$  han alcanzado valores constantes de magnetización y energía, el efecto del operador  $\sigma^-$  en un espín es voltearlo en dirección contraria al campo magnético, es decir, mantenerlo en el estado  $|\downarrow\rangle$ . Voltar el espín en dirección contraria a  $h$  requiere que el sistema gane energía. Este argumento explica porque en la figura (D.6) la energía de los estados base y  $|\uparrow\rangle^{\otimes 4}$  aumenta rápidamente mientras que la energía del estado  $|\downarrow\rangle^{\otimes 4}$  disminuye en cierta cantidad, pero tiende a ser constante al aumentar  $h$ , pues su primer espín ya se encuentra en el estado  $|\downarrow\rangle$ . La disminución de energía del estado  $|\downarrow\rangle^{\otimes 4}$  se explica con la figura (D.4): la población de la proyección sobre  $|1111\rangle$  muestra, en general, una tendencia decreciente pero aproximándose a 1 al aumentar  $h$ . Por lo tanto, la evolución del estado  $|\downarrow\rangle^{\otimes 4}$  es un estado superpuesto, donde existirán tanto espines  $|\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$  que afectarán en la energía total del estado.

El análisis de los resultados con  $\sigma^+$  en un espín es análogo al análisis previamente realizado para  $\sigma^-$ . La diferencia más relevante es que los estados base y  $|\uparrow\rangle^{\otimes 4}$  tienden a mantener su energía constante al aumentar  $h$ , mientras que el estado  $|\downarrow\rangle^{\otimes 4}$  libera energía hasta alcanzar un estado de equilibrio; véase la figura (D.9). Los operadores de Lindblad  $\sigma^-$  y  $\sigma^+$  sobre el primer espín se relaciona a sistemas acoplados con un campo de radiaciones con infinitos modos [13] o a campos bosónicos disipativos con un conjunto finito de autoenergías y tasas de intercambio de energía

con un baño térmico externo [18].

Se extrapolan las conclusiones de los casos  $\sigma^\pm$  en un espín al caso de  $\sigma^\pm$  en todos los espines. Con la notación de las expresiones (2.27), el efecto del operador  $\hat{L}_1$  es que satura la magnetización de la cadena al orientar todos los espines en dirección contraria al campo magnético. En  $h = 10$ , la magnetización de los tres estados tiende rápidamente a  $-1$  y su energía alcanza el valor máximo correspondiente a la energía del estado  $|\downarrow\rangle^{\otimes 4}$ ; véase las figuras (D.11, D.12). Por otro lado, el operador  $\hat{L}_2$  tiende a alinear los espines en dirección al campo magnético y, con  $h = 0$ , alcanza la magnetización 1. Además, el sistema libera energía hasta alcanzar la mínima, correspondiente al estado  $|\uparrow\rangle^{\otimes 4}$ ; véase las figuras (D.14, D.15).

La diferencia substancial entre los resultados de los operadores escalera en un espín y en todos los espines es el tiempo en el que la magnetización y la energía alcanzan los valores constantes; es decir, el tiempo  $\tau$  definido anteriormente. Este tiempo es menor cuando se aplican operadores escalera en todos los espines respecto a aplicarlos en un espín, pues se permite que todos los espines de la cadena tengan un mecanismo de absorción o disipación de energía en forma de fotones. Así, en la figura (D.15), cuando  $h = 10$ , la energía es liberada rápidamente porque la alineación de los espines en dirección del campo magnético provoca la emisión de fotones desde los 4 sitios de la cadena. Este fenómeno se conoce como superradiancia, que es similar al fenómeno de emisión estimulada en los láseres, y se estudia en el modelo de Dicke. Este modelo supone un ensamble de  $N'$  sistemas de dos niveles acoplados a una cavidad cuantizada con un solo modo de vibración. Además, exhibe una transición a fase superradiante cuando  $N' \rightarrow \infty$  [49]. La superradiancia en el modelo de Ising ya ha sido estudiada mediante el acople de los hamiltonianos de Ising y de Dicke [50], y en sistemas de dos niveles sin interacciones entre elementos [51], [52].

Cuando se utilizan ambos operadores escalera en todos los espines, multiplicados por un mismo coeficiente, se obtienen los resultados de las figuras (D.17, D.18). En este caso, el tiempo  $\tau$  es el menor de todos los casos en los que se utilizan operadores escalera, y las oscilaciones de la magnetización se amortiguan rápidamente. La energía de los estados tiende a cero, lo que indica que el sistema alcanza un estado de equilibrio

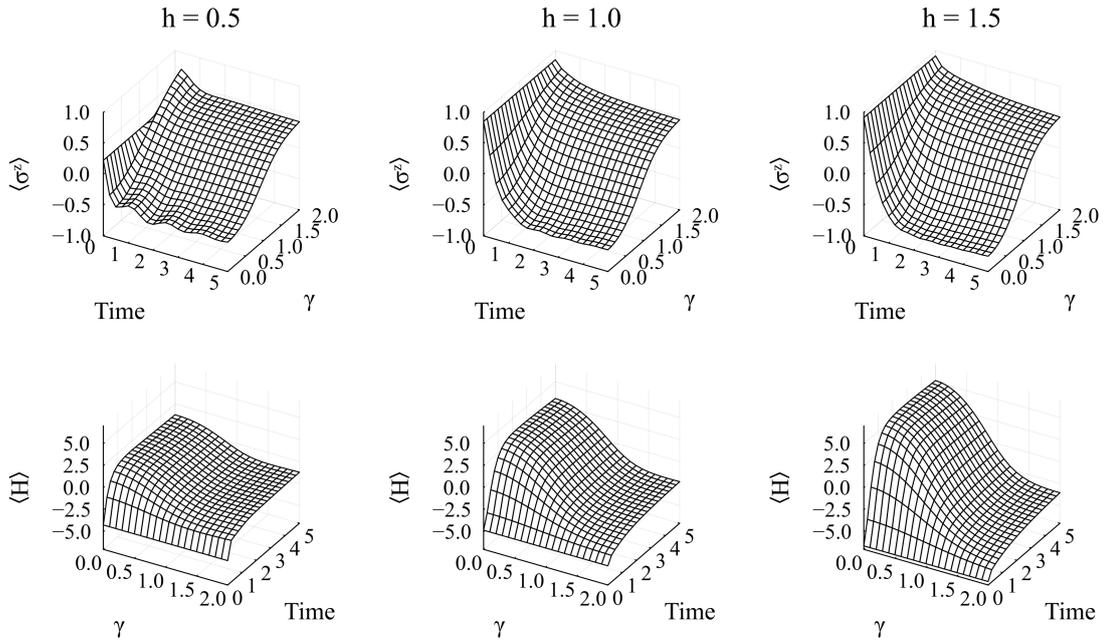


Figura 3.12: Evolución temporal de la magnetización y energía del estado base de una cadena cuántica de Ising con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC, utilizando  $\hat{L}_1$  y  $\hat{L}_2$  como operadores de Lindblad. El coeficiente que multiplica a  $\hat{L}_1$  es 1, y se varía el coeficiente  $\gamma$  que se multiplica al operador  $\hat{L}_2$ .

en el que absorbe y libera energía a la misma tasa. En la figura (3.12), se observa que el estado alcanza valores de saturación al aumentar el parámetro  $\gamma$ , que modula el coeficiente de  $\hat{L}_2$ , y también con el transcurso del tiempo. Sin embargo, el comportamiento significativo que emerge es que el sistema tiende a absorber energía pero mantiene los espines alineados con el campo magnético. Este comportamiento es contrario al observado en los casos en que se aplican  $\hat{L}_1$  y  $\hat{L}_2$ .

En las figuras (D.20, D.21, D.23, D.24), los resultados de los casos en que los operadores de Lindblad son de transición entre estados computacionales y autoestados, muestran que la magnetización y la energía tienden rápidamente a cero, sin oscilaciones, y a tasas independientes de  $h$ . Sin embargo, la tasa de tendencia a cero de las transiciones entre autoestados es mayor a las transiciones entre estados computacionales. Al considerar las transiciones ponderadas con los operadores de la ecuación (2.29), se obtienen los resultados de la figura (D.25). La magnetización y energía del estado base son constantes en el tiempo para todo valor de  $\beta$  excepto cero; no existe un comportamiento distintivo que resulte de únicamente aplicar de estos operadores.

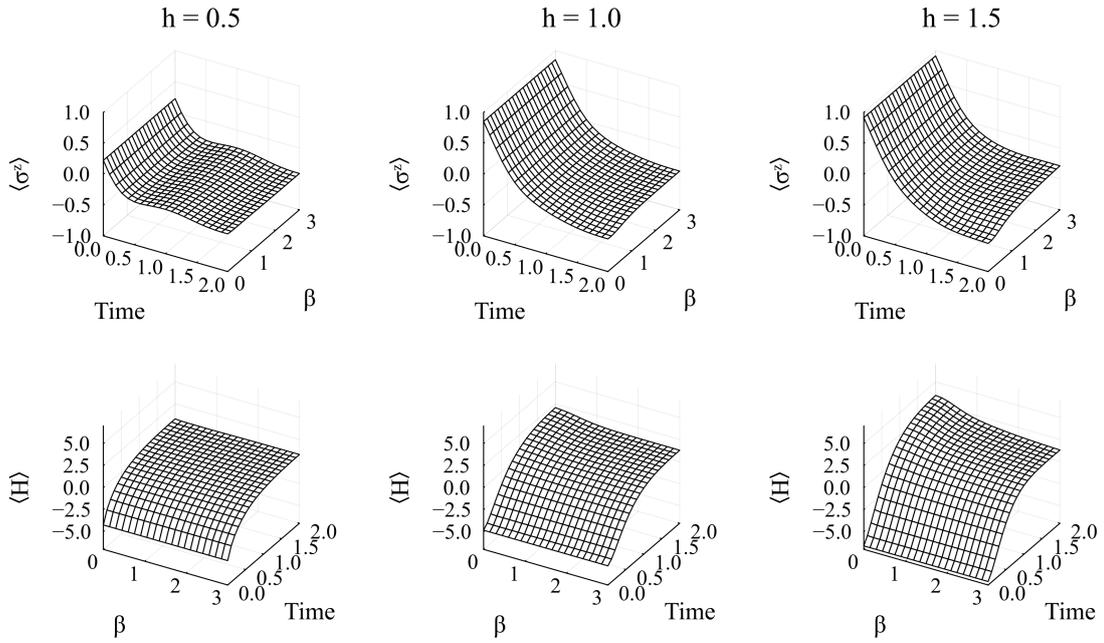


Figura 3.13: Evolución temporal de la magnetización y energía del estado base de una cadena cuántica de Ising con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. Se utilizaron los siguientes operadores de Lindblad: transiciones ponderadas entre autoestados y los operadores  $1,0 \cdot \hat{L}_1$  y  $\gamma \hat{L}_2$ , con  $\gamma = 0,5$ .

En las figuras (3.13, 3.14) se analiza el comportamiento de una cadena de Ising en un entorno que permite la emisión y absorción de energía, así como la transición ponderada entre autoestados, lo cual sugiere la termalización de la cadena. Se observa que el sistema alcanza estados de equilibrio que dependen principalmente de la intensidad del campo magnético transversal  $h$  y, en menor medida, del parámetro  $\beta$ . En particular, en la figura (3.13), donde se ha definido  $\gamma = 0,5$ , se evidencia un mayor efecto del parámetro  $\beta$  en el caso de  $h = 1,5$ , mostrando una disminución de la energía del estado base al incrementar  $\beta$ . Este resultado concuerda con un ligero aumento en la magnetización en dirección del campo magnético.

Debido a la naturaleza general del análisis realizado, resulta difícil definir con precisión un diseño experimental que permita probar la validez de los resultados obtenidos. No obstante, los hallazgos de Morales [53] sobre la formación de cadenas de nanopartículas de magnetita bajo la aplicación de un campo magnético proporcionan una base relevante. En su estudio, se reporta la variación temporal de la magnetización máxima de una cadena de nanopartículas de 34 nm. Cualitativamente, la curva

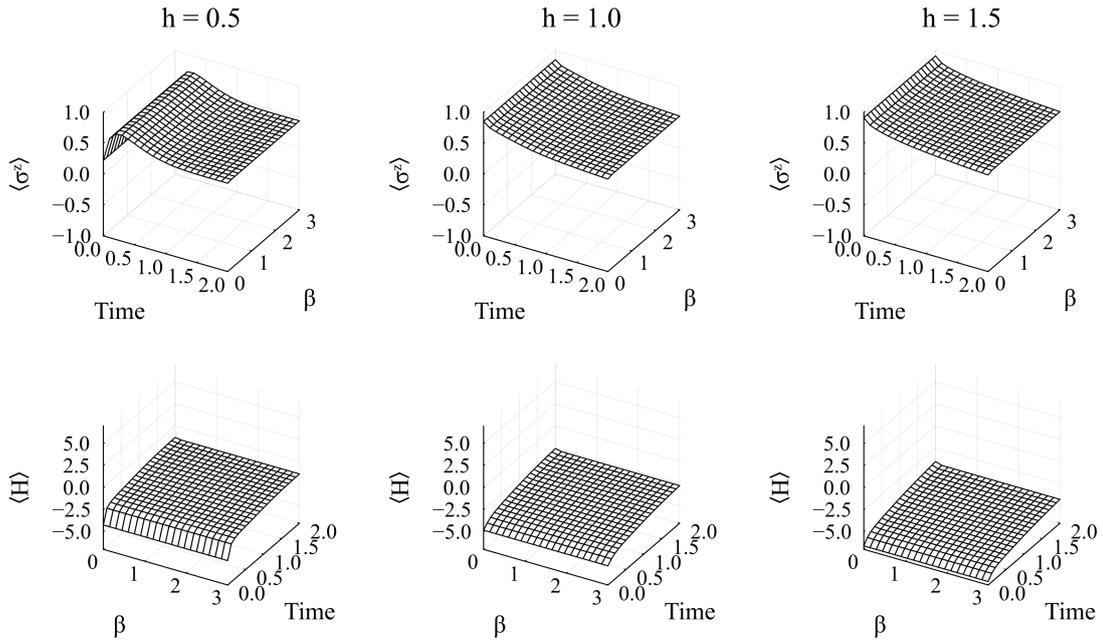


Figura 3.14: Evolución temporal de la magnetización y energía del estado base de una cadena cuántica de Ising con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. Se utilizaron los siguientes operadores de Lindblad: transiciones ponderadas entre autoestados y los operadores  $1,0 \cdot \hat{L}_1$  y  $\gamma \hat{L}_2$ , con  $\gamma = 2,0$ .

de magnetización observada se asemeja al perfil correspondiente al caso  $h = 0,5$  en la figura (3.14), mostrando un ligero aumento de la magnetización que se atenúa rápidamente.

### 3.3. Conclusiones y recomendaciones

La simulación de la cadena de Ising ha sido robustamente validada con resultados teóricos y prácticos mencionados en la bibliografía. Ahora se dispone de un método novedoso para estudiar el modelo unidimensional de Ising, el cual utiliza nuevas herramientas de programación y ofrece la posibilidad de ejecución en un procesador cuántico real.

Se han presentado resultados que, hasta el momento de finalización de este trabajo, no han sido reportados en la literatura, como el comportamiento antisimétrico de la correlación entre espines en el caso PBC, mostrado en la figura (3.4), o las brechas de energía en los casos con condiciones de borde periódicas de la figura (3.9).

El análisis de la evolución temporal de una cadena cuántica de 4 es-

spines, utilizando la ecuación GKSL y condiciones de contorno periódicas (PBC), revela que los operadores escalera inducen la saturación de la magnetización y la energía del sistema. La magnetización presenta oscilaciones cuya frecuencia depende de la magnitud del campo transversal. Además, los resultados indican que, al utilizar el operador  $\hat{L}_2$ , la cadena exhibe el fenómeno de superradiancia.

Por otro lado, el uso de transiciones entre estados computacionales y autoestados resulta en una rápida disminución de la magnetización y la energía. Sin embargo, la inclusión de operadores escalera permite que el sistema tienda a estados de equilibrio, los cuales pueden interpretarse como estados de equilibrio térmico.

La simulación de la cadena cuántica de Ising estará disponible en un repositorio en línea <sup>1</sup>, siguiendo una filosofía *open source* para fomentar la colaboración abierta. A continuación, se mencionan algunas ideas que surgieron durante la realización de este trabajo y que podrían ser objeto de investigaciones futuras utilizando esta simulación.

## Recomendaciones

- El comportamiento antisimétrico de la correlación entre espines de la cadena con PBC puede ser utilizado para estudiar una cadena cuántica de Ising con condiciones PBC como unidad de transmisión de información. Dado que su estado base corresponde a una superposición de cadenas con mitades mayormente orientadas en dirección del campo magnético o en la dirección contraria, estas mitades podrían servir como bits lógicos compuestos por varios bits físicos. Esta idea se postularía como un enfoque para abordar el problema del ruido en las computadoras cuánticas, donde una de las propuestas es generar estados lógicos compuestos por varios qubits de manera que, aunque algunos qubits sean afectados por el ruido, el estado general del sistema, que representa el estado lógico, permanezca inalterado.
- En el contexto de información y computación cuánticas, es común generar estados entrelazados para la transmisión segura de infor-

---

<sup>1</sup><https://github.com/JJNaranjo512/Quantum-Ising-Chain-with-Cirq-and-OpenFermion>

mación o como estados iniciales en la ejecución de protocolos cuánticos. Esta simulación supone un punto de partida para estudiar el uso de cadenas de espines, o de estados tipo Ising, para la codificación y transmisión de estados con un grado de entrelazamiento ajustable. Se puede encontrar información adicional sobre la transmisión de estados cuánticos utilizando cadenas de espines en la referencia [54].

- En el análisis de la evolución temporal con la ecuación GKSL, se recomienda calcular numéricamente el tiempo de saturación  $\tau$  y desarrollar un método para minimizar la distancia traza entre el operador densidad del estado saturado y un estado térmico. Este estado térmico dependería del parámetro  $\beta$  y estaría compuesto por los autovalores y autovectores del hamiltoniano. Dado que en un estado térmico el parámetro  $\beta$  es el inverso de la temperatura, este enfoque permitiría predecir la temperatura final de un sistema que ha evolucionado hasta alcanzar un estado estacionario cuando está acoplado a un entorno.

# Capítulo A

---

## Anexo A: argumentos de las funciones locales

---

En este anexo se describen los argumentos de las funciones locales definidas para la simulación en Cirq y OpenFermion. De manera general, existen argumentos *por defecto*, a los que necesariamente hay que asignar un valor, y argumentos *opcionales*, que no necesitan un valor de asignación. Los argumentos *opcionales* ya tienen un *valor predeterminado*, pero se puede asignar un valor arbitrario.

Nombre	Tipo	Descripción	P.d.	O	V.p.
num_qubits	int	Número de espines	✓		
J	float	Intensidad de interacción entre espines	✓		
h	float	Intensidad del campo magnético transversal	✓		
periodic	bool	Determina si la cadena es cerrada o abierta		✓	True
Boundary Conditions	bool	Determina si la cadena es ABC o PBC con 0 o 1, respectivamente		✓	0
printModel	bool	Imprimir o no el hamiltoniano en la consola		✓	False

Cuadro A.1: Argumentos de la función local `QuantumIsingHamiltonian`. Los argumentos se clasifican en *por defecto* (P.d.) y *opcionales* (O). Se muestra el *valor predeterminado* (V.p.) de los argumentos opcionales.

<b>Nombre</b>	<b>Tipo</b>	<b>Descripción</b>	<b>P.d.</b>	<b>O</b>	<b>V.p.</b>
num_qubits	int	Número de espines	✓		
Quad_Hamiltonian	Quadratic Hamiltonian	Estructura que almacena un hamiltoniano cuadrático en los operadores $a_k$ y $a_k^\dagger$ .	✓		
InitialState	list	Lista que determina el estado computacional inicial.		✓	[]
repetitions	int	Número de veces que se compila el circuito cuántico.		✓	10000
print InitialModes	bool	Imprime o no las compuertas iniciales que se aplican con InitialState.		✓	False
print FullCircuit	bool	Imprime o no el circuito cuántico.		✓	False

Cuadro A.2: Argumentos de la función local `SimulateHamiltonian`. Los argumentos se clasifican en *por defecto* (P.d.) y *opcionales* (O). Se muestra el *valor predeterminado* (V.p.) de los argumentos opcionales.

<b>Nombre</b>	<b>Tipo</b>	<b>Descripción</b>	<b>P.d.</b>	<b>O</b>	<b>V.p.</b>
num_qubits	int	Número de espines	✓		
Quad_Hamiltonian	Quadratic Hamiltonian	Estructura que almacena un hamiltoniano cuadrático en los operadores $a_k$ y $a_k^\dagger$ .	✓		
qi	string	Determina el tipo de operador de Pauli que se aplicará al espín 1. Se ingresa "X" o "Z".	✓		
qj	string	Determina el tipo de operador de Pauli que se aplicará al espín i-ésimo. Se ingresa "X" o "Z".	✓		
repetitions	int	Número de veces que se compila el circuito cuántico.	✓		
InitialState	list	Lista que determina el estado computacional inicial.		✓	[]

Cuadro A.3: Argumentos de la función local `Correlation`. Los argumentos se clasifican en *por defecto* (P.d.) y *opcionales* (O). Se muestra el *valor predeterminado* (V.p.) de los argumentos opcionales.

<b>Nombre</b>	<b>Tipo</b>	<b>Descripción</b>	<b>P.d.</b>	<b>O</b>	<b>V.p.</b>
Quad_Hamiltonian	Quadratic Hamiltonian	Estructura que almacena un hamiltoniano cuadrático en los operadores $a_k$ y $a_k^\dagger$ .	✓		
Initial_st_vector	list	Lista que almacena el estado inicial del circuito cuántico.	✓		
Final_st_vector	list	Lista que almacena el estado final del circuito cuántico.	✓		
print_Energies	bool	Imprime o no los valores de la energía de los estados inicial y final.		✓	False

**Cuadro A.4:** Argumentos de la función local `GetEnergies`. Los argumentos se clasifican en *por defecto* (P.d.) y *opcionales* (O). Se muestra el *valor predeterminado* (V.p.) de los argumentos opcionales.

# Capítulo B

---

## **Anexo B: sobre la simulación en Cirq y OpenFermion**

---

En este anexo se muestran resultados adicionales a los mostrados en el apartado *Resultados sobre la simulación de la cadena cuántica de Ising*, que clarifican la discusión realizada en *Resultados, conclusiones y recomendaciones*.

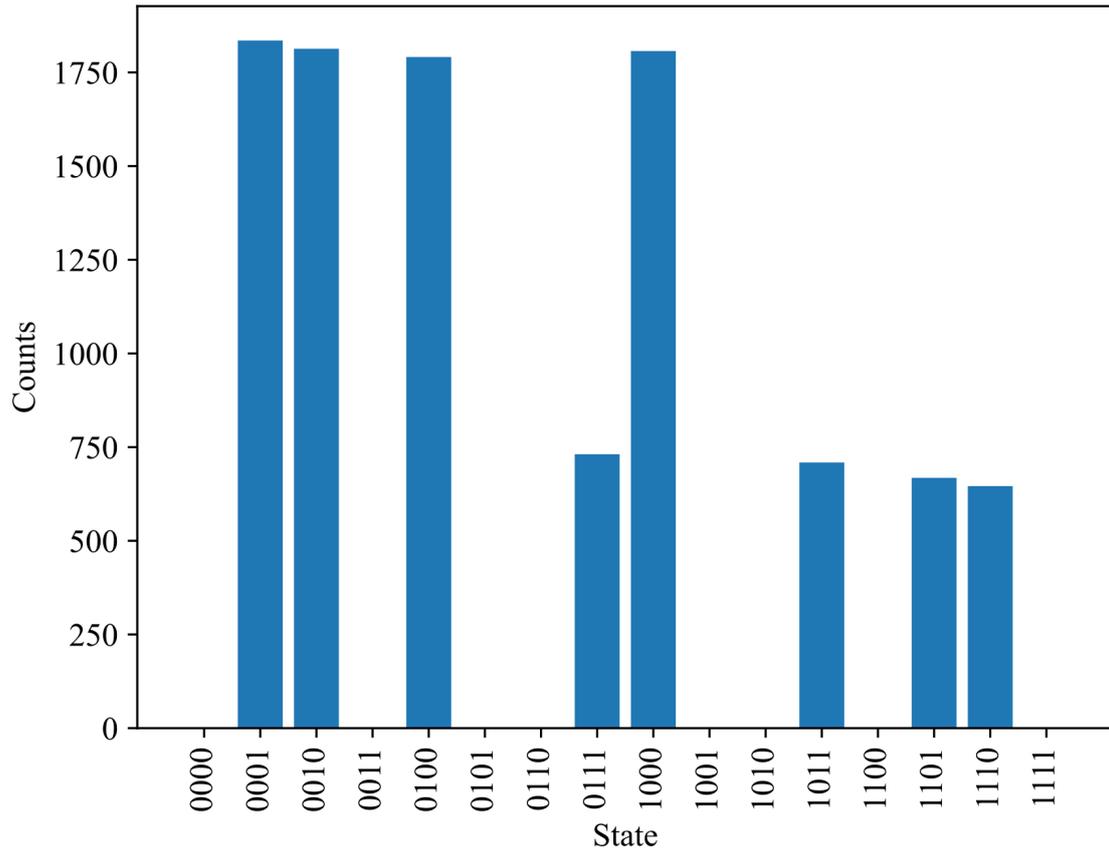


Figura B.1: Resultados de la compilación de un circuito cuántico que representa una cadena cuántica de Ising de 4 espines con  $J = 1$  y  $h = 0,5$  en el caso PBC. El circuito se compiló 10000 veces.

<b>Caso</b>	<b>ABC</b>		<b>PBC</b>		<b>OBC</b>	
<b>Parámetro</b>	a	b	a	b	a	b
<b>Valor</b>	0,16057	0,43597	0,2798	-0,08343	0,10487	0,1979
<b>Varianza</b> ( $\cdot 10^{-6}$ )	1,9902	16,793	104,79	1076,9	2,7087	22,856

Cuadro B.1: Valores y varianza de los parámetros óptimos de los ajustes de la figura B.4.

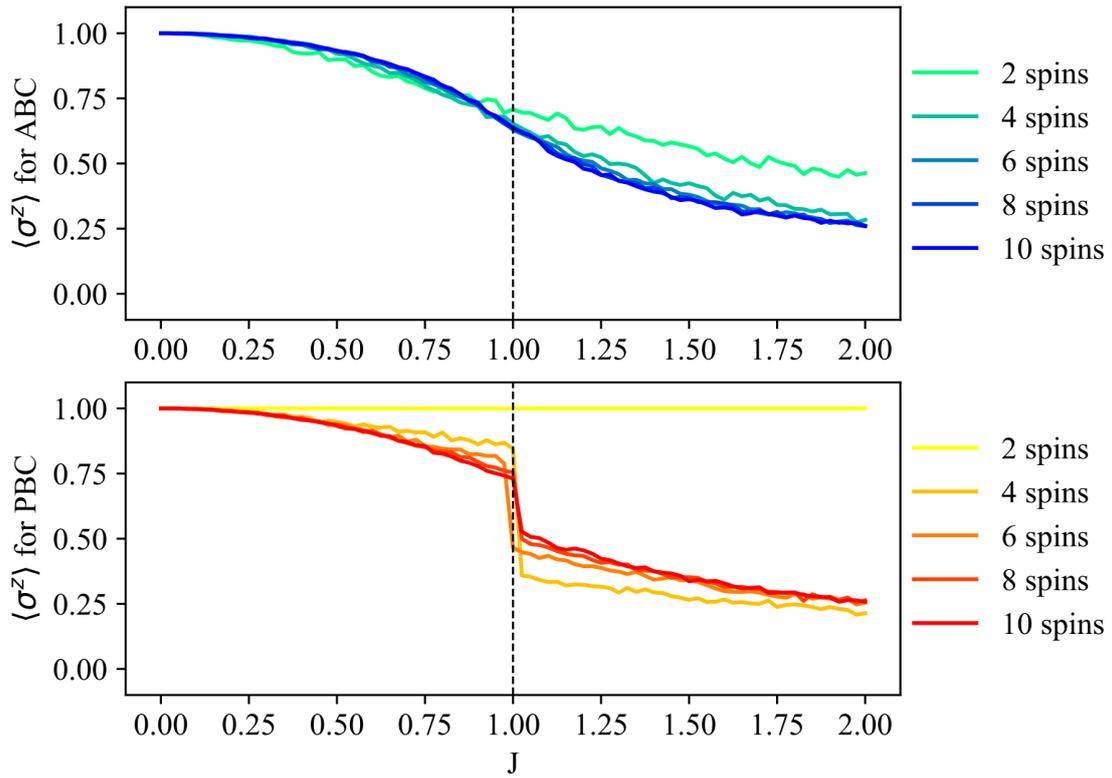


Figura B.2: Magnetización en dirección Z al variar el número de espines y la intensidad de interacción entre espines  $j$ . Se definió  $h = 1$  y 3000 repeticiones.

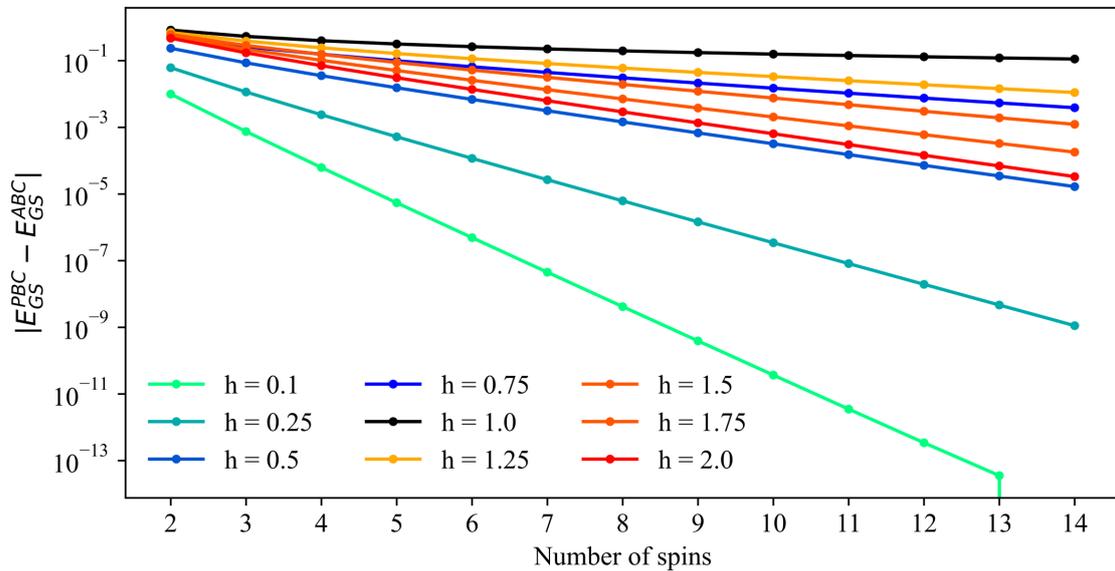


Figura B.3: Gráfico en escala logarítmica de la diferencia entre las energías de los estados base de PBC y ABC al aumentar el número de espines a distintos valores de  $h$ . Se definió  $J = 1$ . Estos son resultados de la función `GetEnergies`.

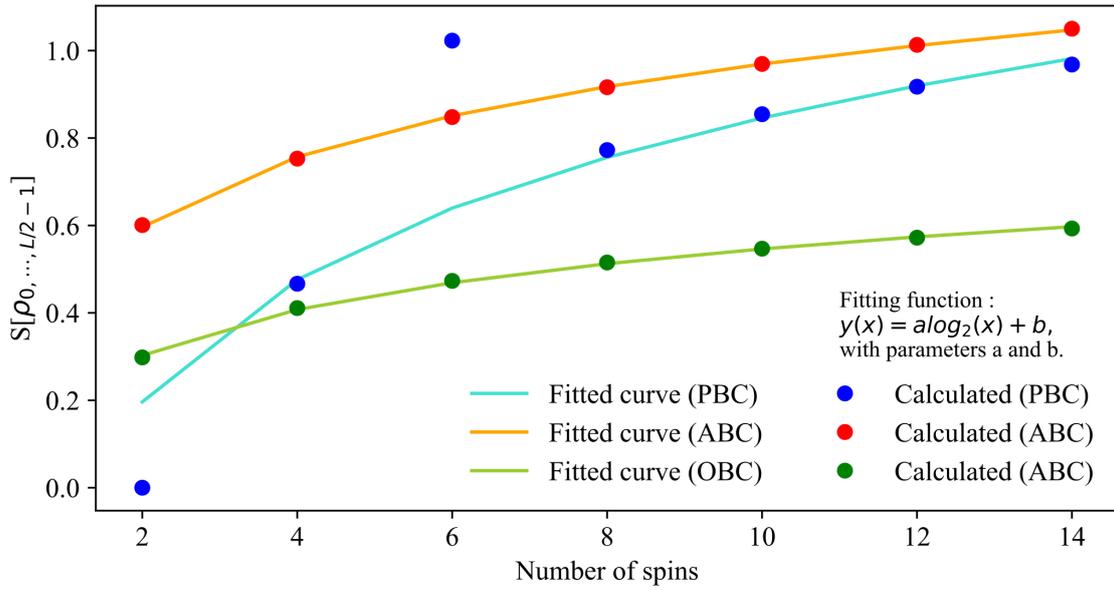


Figura B.4: Entropía de entrelazamiento en el punto crítico al variar el número de espines. Se definió  $J = 1$ . Se muestran los ajustes a una función logarítmica, los parámetros óptimos son los de la tabla (B.1). En el caso PBC, se excluyeron los valores de entropía para  $N = 2$  y  $N = 6$ , pues son valores atípicos provocados por la forma de extracción de datos de la simulación y errores numéricos de computación.

# Capítulo C

---

## Anexo D: sobre el modelo de dos espines

---

Los resultados sobre el caso  $N = 2$  con condiciones ABC y OBC concuerdan con lo esperado de la simulación. Sin embargo, el caso PBC muestra incoherencias: su magnetización en dirección Z es constante, véase la figura (3.3), y su entropía de entrelazamiento es constante y cero, véase la figura (3.10). En el conjunto de ecuaciones (C.2) se muestran los estados finales que la simulación retorna con  $J=1$ ,  $h=0$  e `InitialState = []`, en todos los casos de condiciones de borde. Los estados de los casos ABC y OBC son el estado de Bell  $|\beta_{00}\rangle$  [8], con un desfase global  $e^{i\frac{\pi}{4}}$ .

$$\begin{aligned} ABC & : (0,5 + 0,5i) [|00\rangle + |11\rangle] \equiv \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} [|00\rangle + |11\rangle] \\ OBC & : (0,5 + 0,5i) [|00\rangle + |11\rangle] \equiv \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} [|00\rangle + |11\rangle] \\ PBC & : i|00\rangle \equiv e^{i\frac{\pi}{2}} |00\rangle \end{aligned} \quad (C.1)$$

El estado del caso PBC no muestra una paridad  $\varphi = -1$ . Esto indica que el circuito cuántico que ejecuta `SimulateHamiltonian` no genera el espín volteado en la zona ferromagnética. Este argumento se refuerza al utilizar la función `GetEnergies` y observar que, en efecto, el estado  $i|00\rangle$  no es el estado de menor energía en la zona ferromagnética, pero si lo es en la zona de desorden magnético. Este problema se soluciona con el argumento `InitialState`, cambiando su valor a `[0]` cuando  $h < J$  y a

[ ] cuando  $h \geq J$ . Así, en la zona ferromagnética, el estado base resulta ser el estado de Bell  $|\beta_{01}\rangle$  con un desfase global de  $e^{-i\frac{\pi}{2}}$ , ecuación (C.2), que muestra tener la menor energía. Esto indica que la magnetización en dirección Z es 0 en la zona ferromagnética y cambia súbitamente a 1 al atravesar el punto crítico. Además, los estados de Bell son estados entrelazados, por lo que su entropía de entrelazamiento será distinta de cero.

$$PBC : -0,71i [ |01\rangle + |10\rangle ] \equiv \frac{e^{-i\frac{\pi}{2}}}{\sqrt{2}} [ |01\rangle + |10\rangle ] \quad (C.2)$$

# Capítulo D

---

## Anexo C: sobre la simulación en `QSWalk.jl`

---

En este anexo se muestran resultados adicionales a los mostrados en el apartado *Resultados sobre la evolución temporal con la ecuación GKSL*, que clarifican la discusión realizada en *Resultados, conclusiones y recomendaciones*.

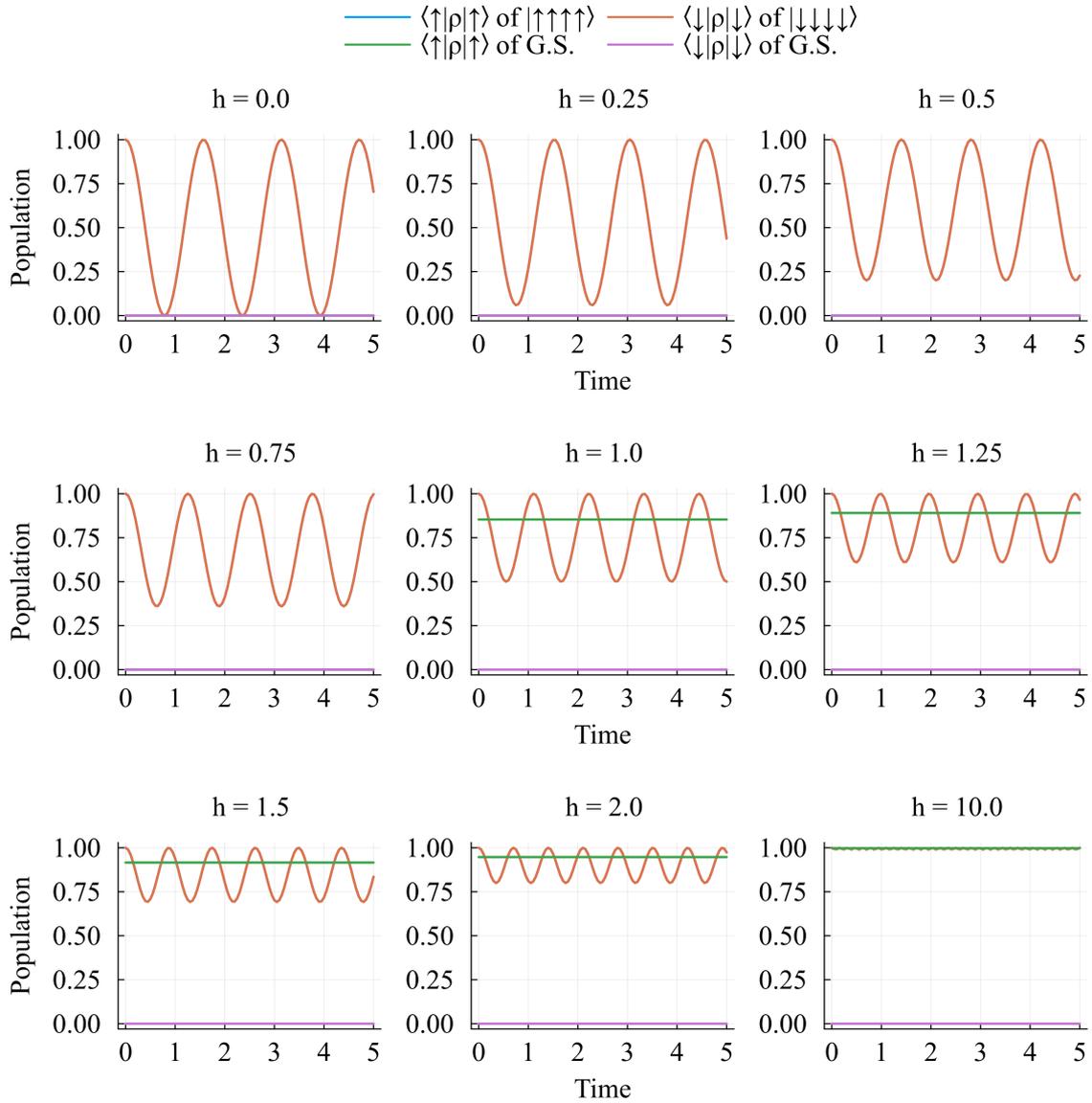


Figura D.1: Evolución temporal de las poblaciones de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC, sin interacciones con un entorno. Es decir, el sistema es cerrado.

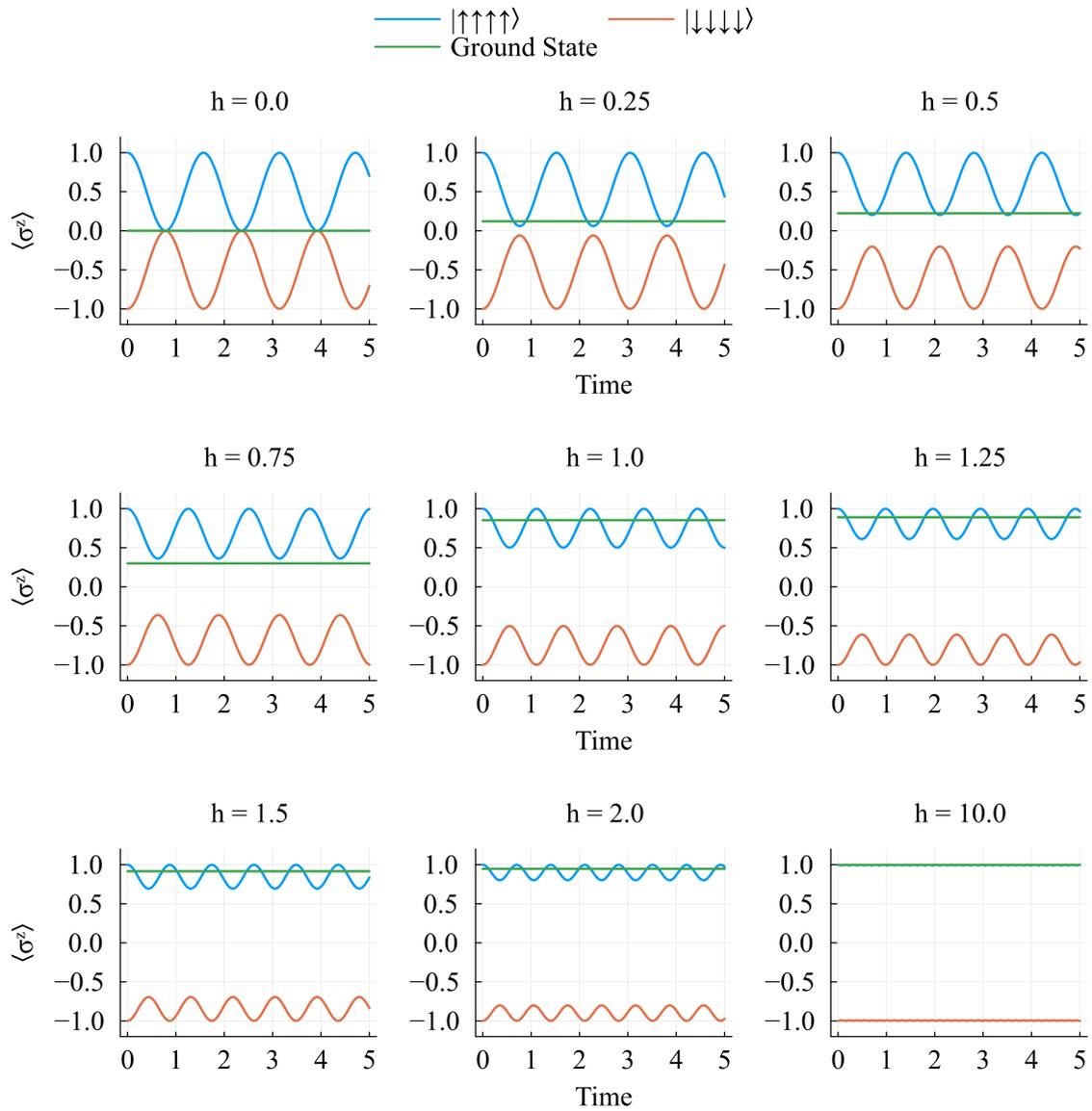


Figura D.2: Evolución temporal de la magnetización de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC, sin interacciones con un entorno. Es decir, el sistema es cerrado.

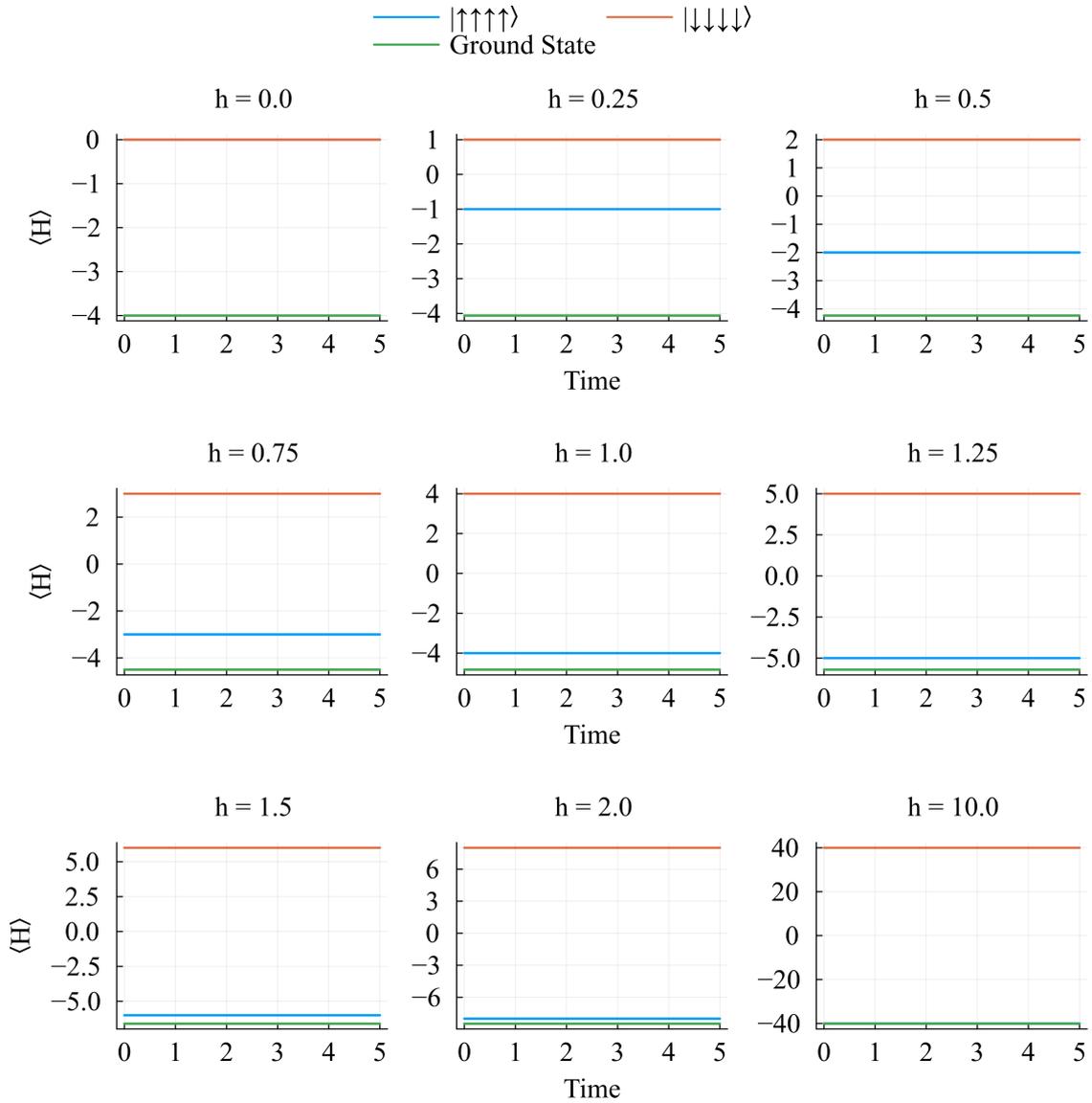


Figura D.3: Evolución temporal de la energía de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC, sin interacciones con un entorno. Es decir, el sistema es cerrado.

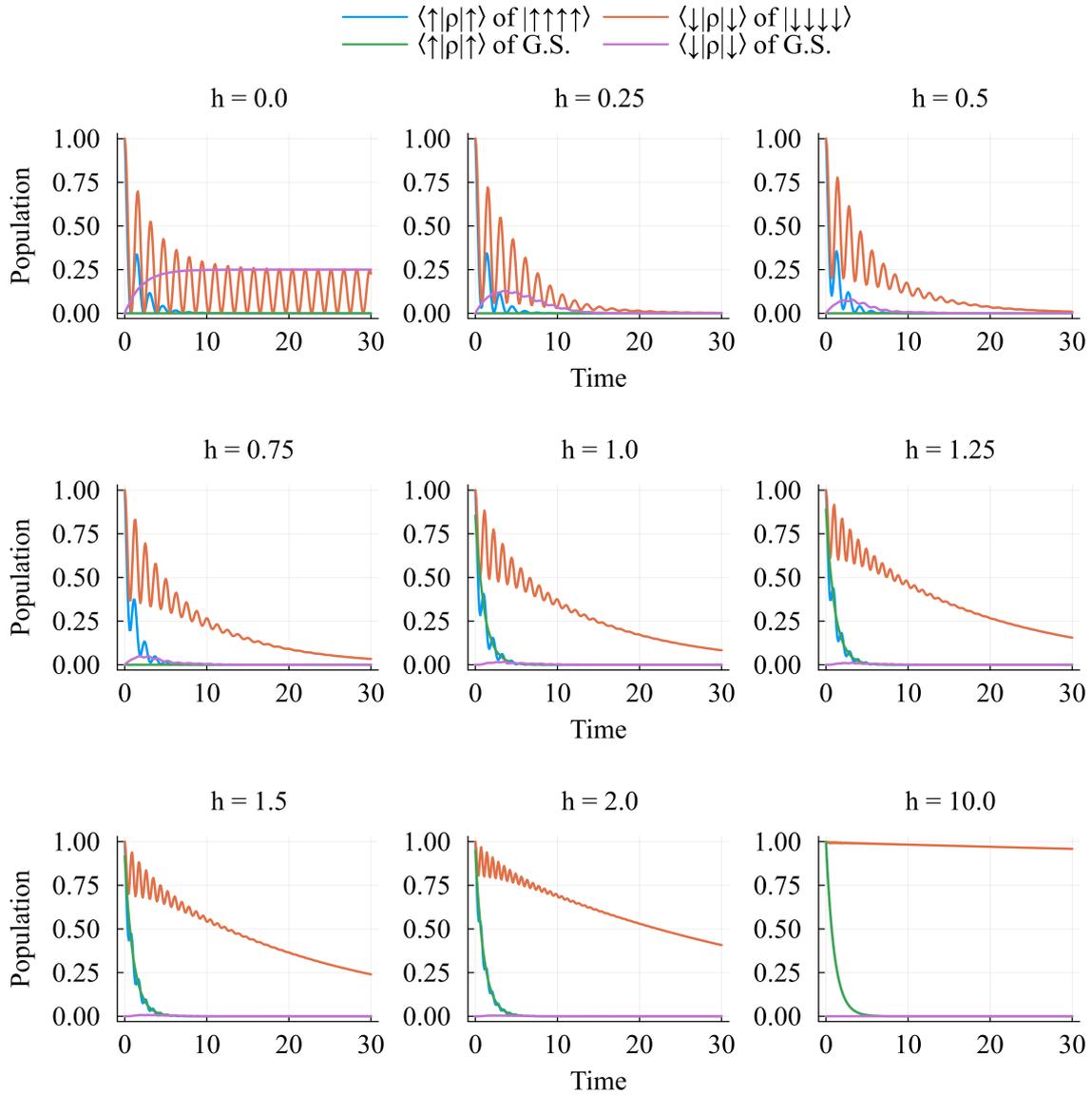


Figura D.4: Evolución temporal de las poblaciones de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sigma^-$  en el espín 0.

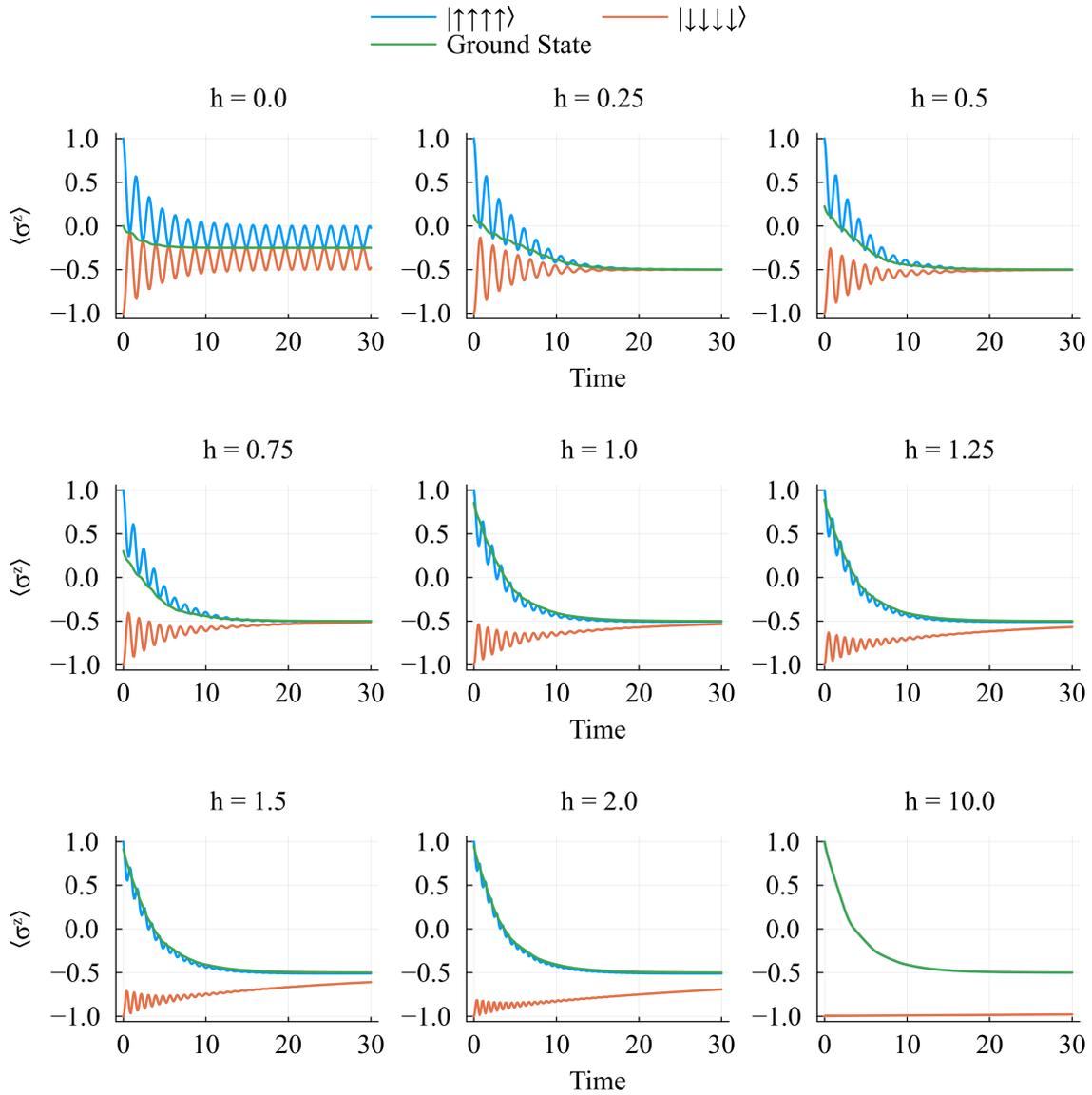


Figura D.5: Evolución temporal de la magnetización de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sigma^-$  en el espín 0.

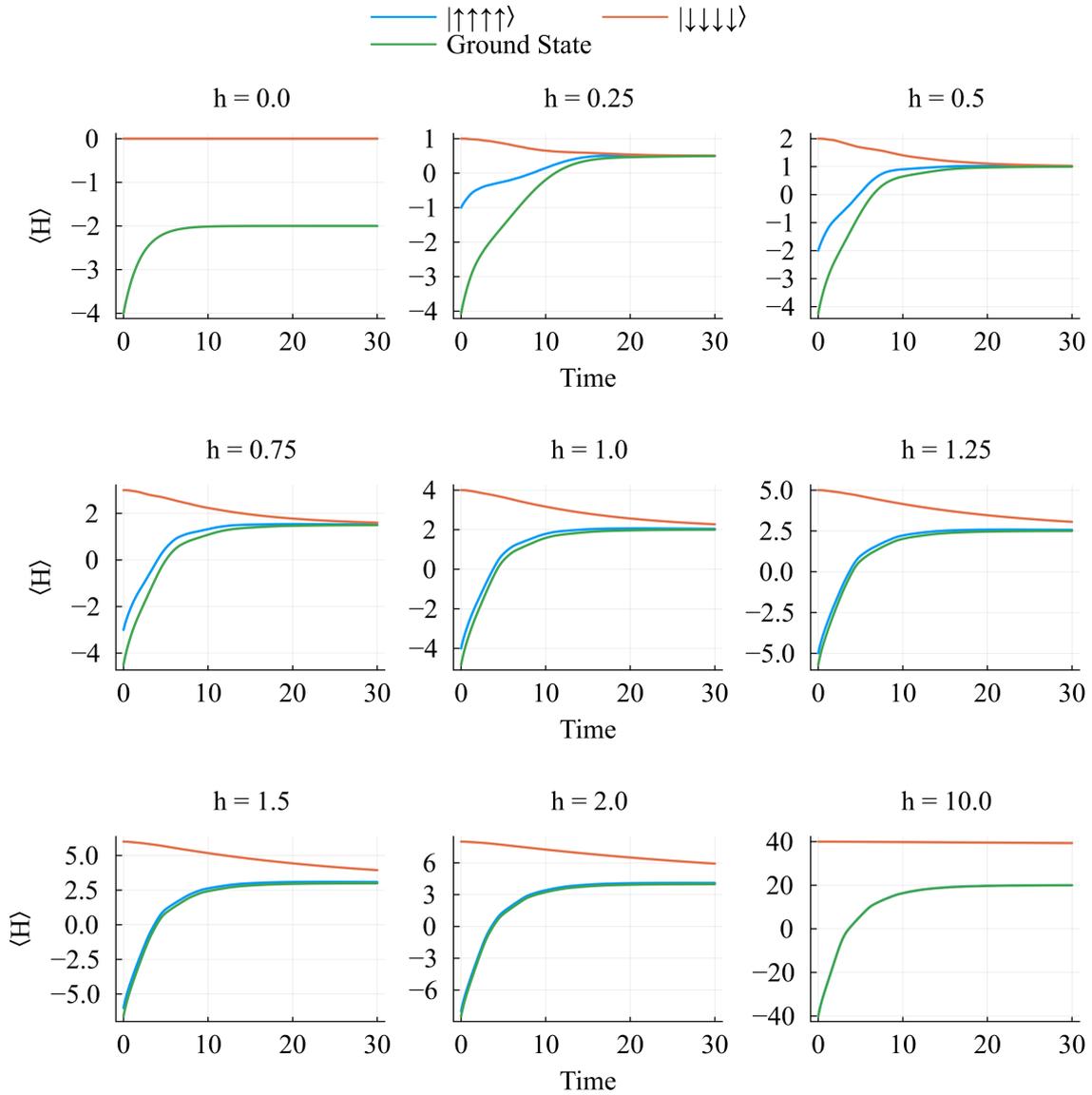


Figura D.6: Evolución temporal de la energía de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sigma^-$  en el espín 0.

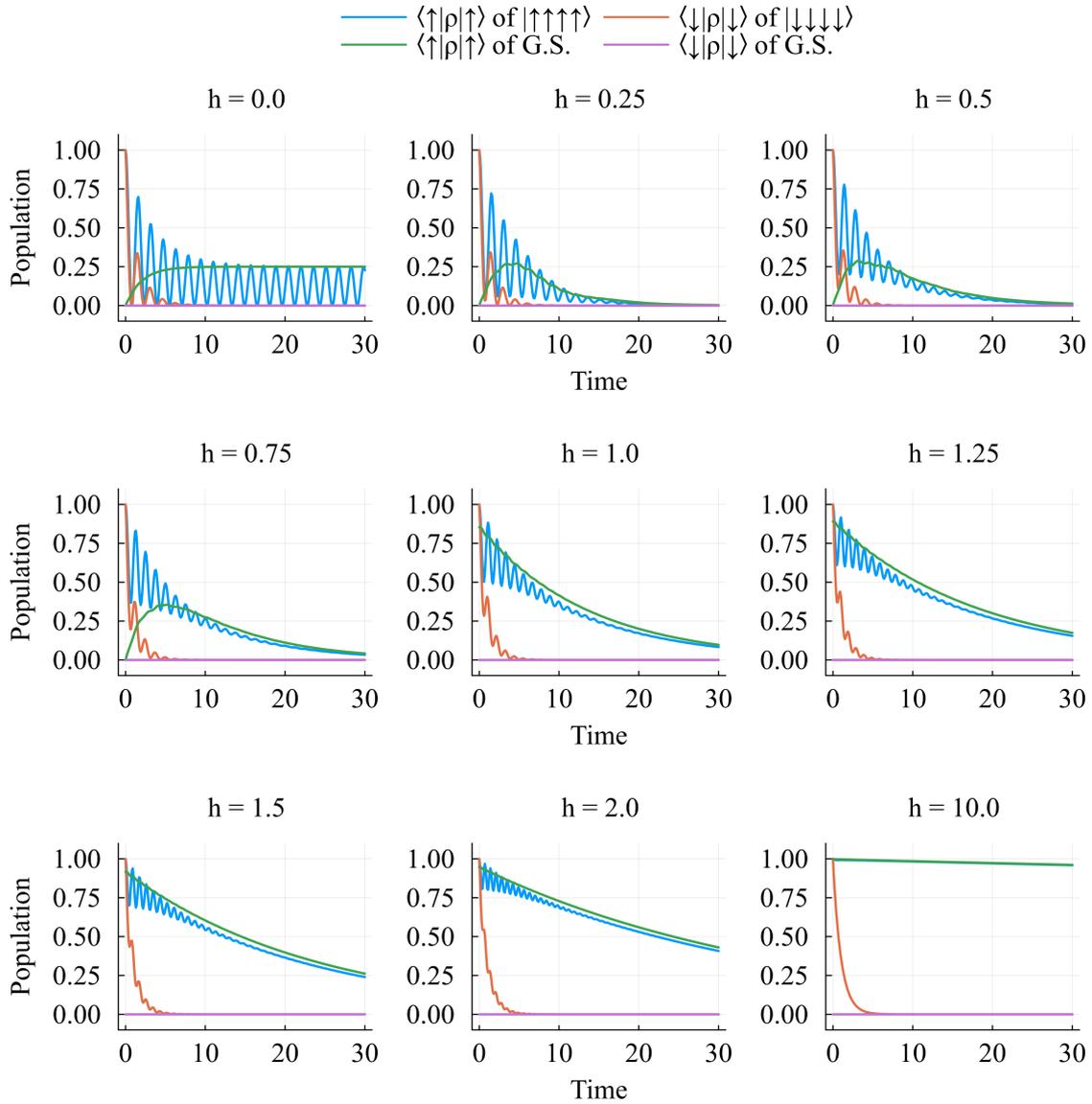


Figura D.7: Evolución temporal de las poblaciones de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sigma^+$  en el espín 0.

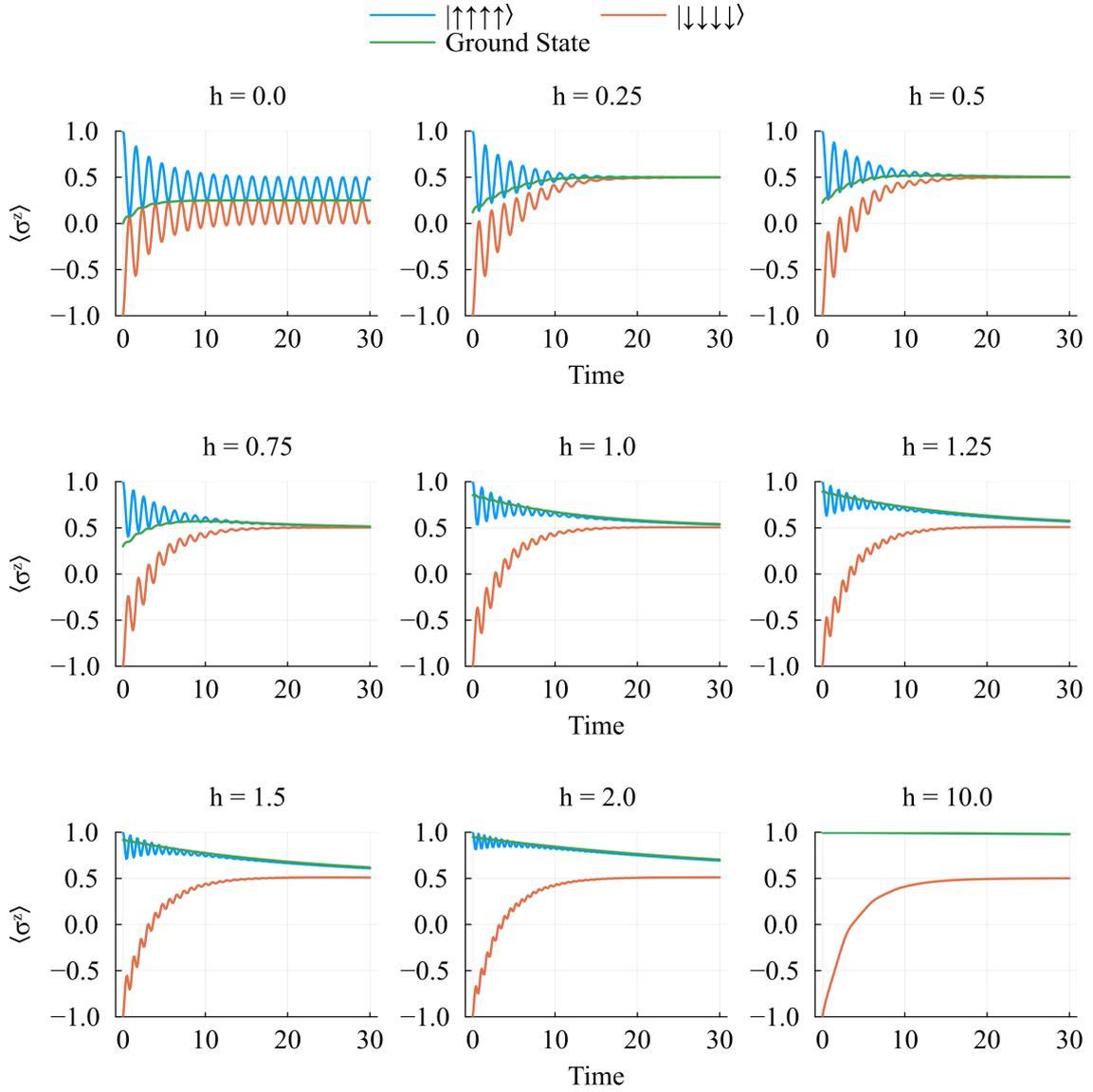


Figura D.8: Evolución temporal de la magnetización de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sigma^+$  en el espín 0.

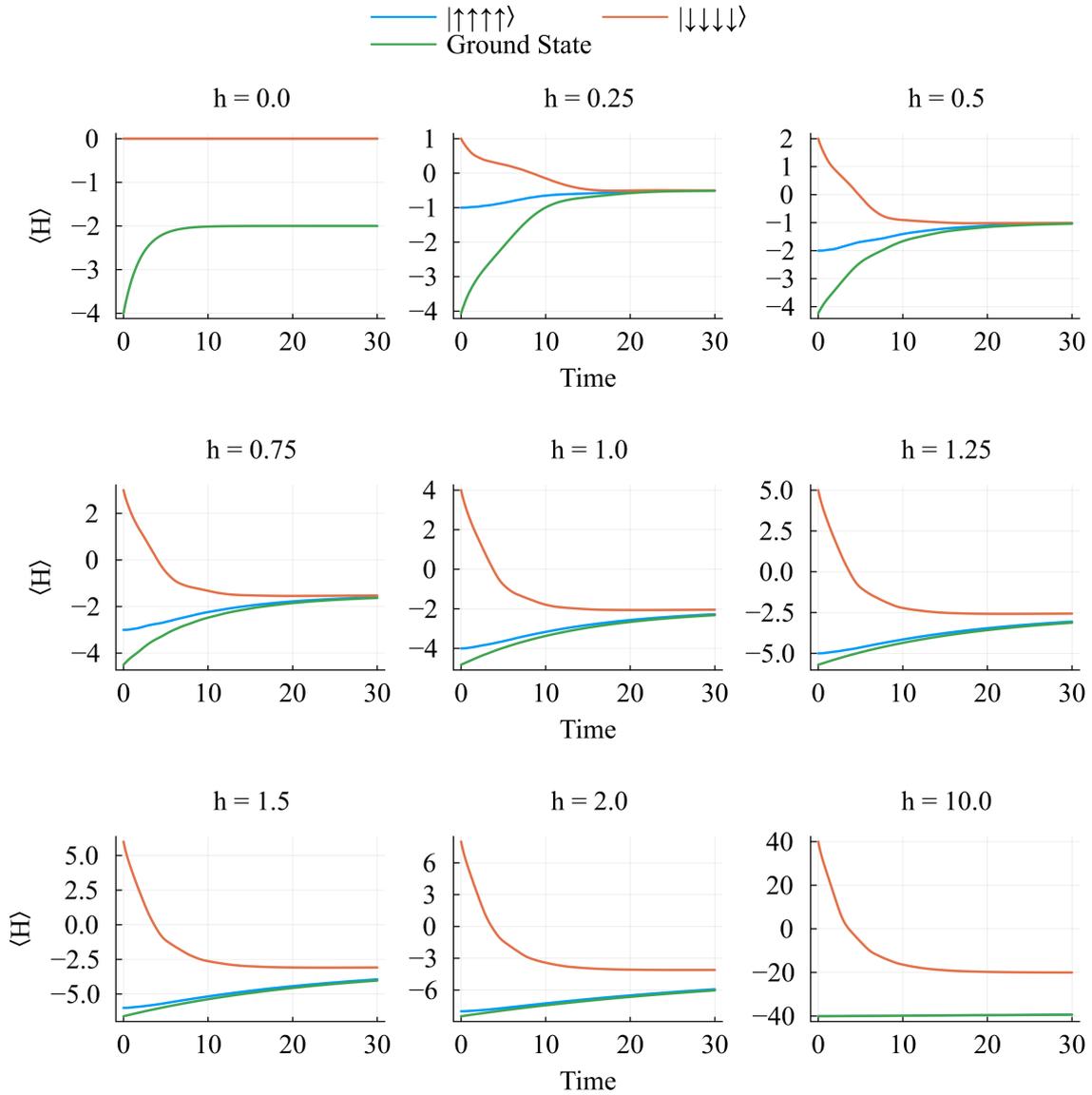


Figura D.9: Evolución temporal de la energía de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sigma^+$  en el espín 0.

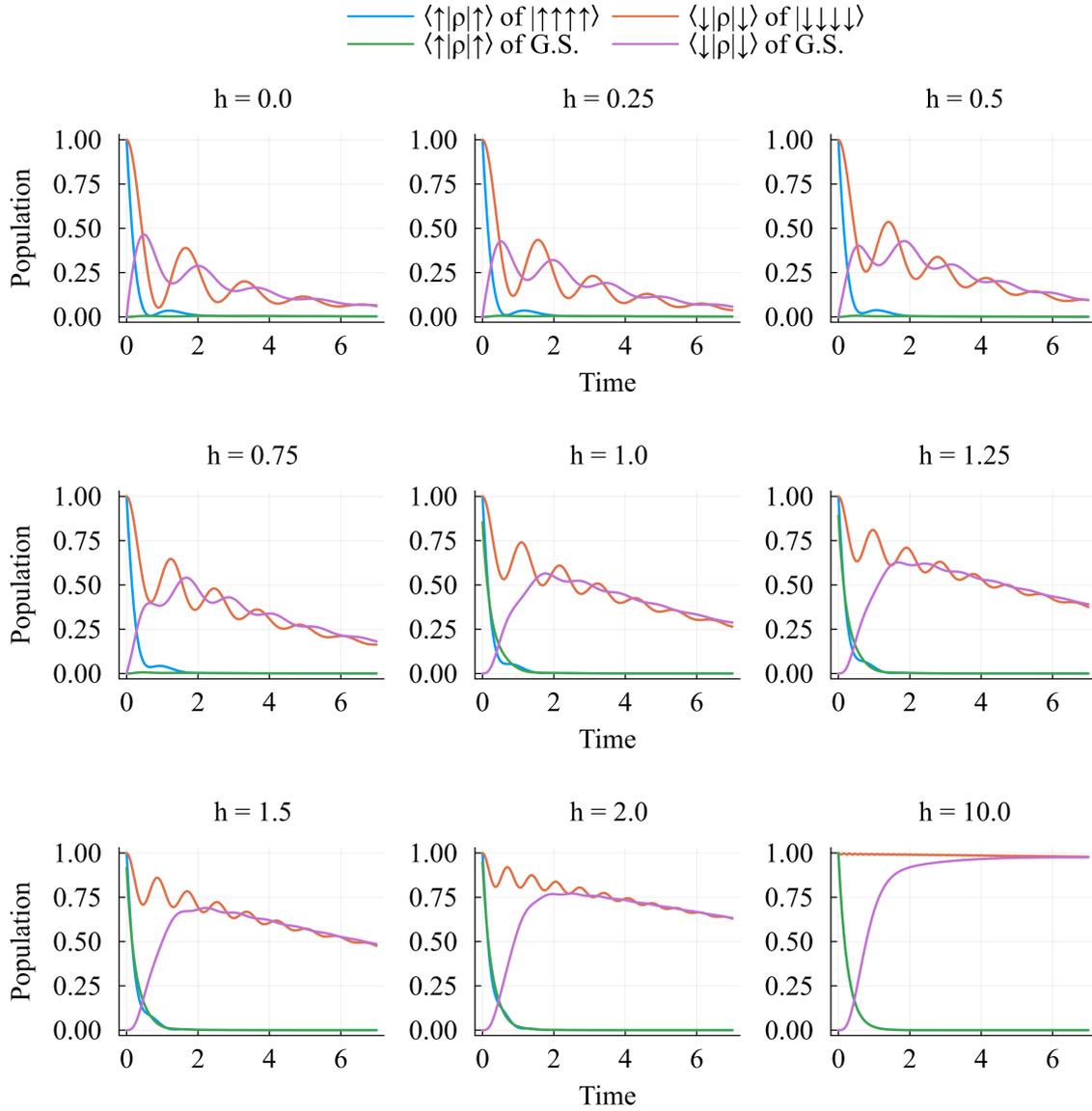


Figura D.10: Evolución temporal de las poblaciones de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^-$ .

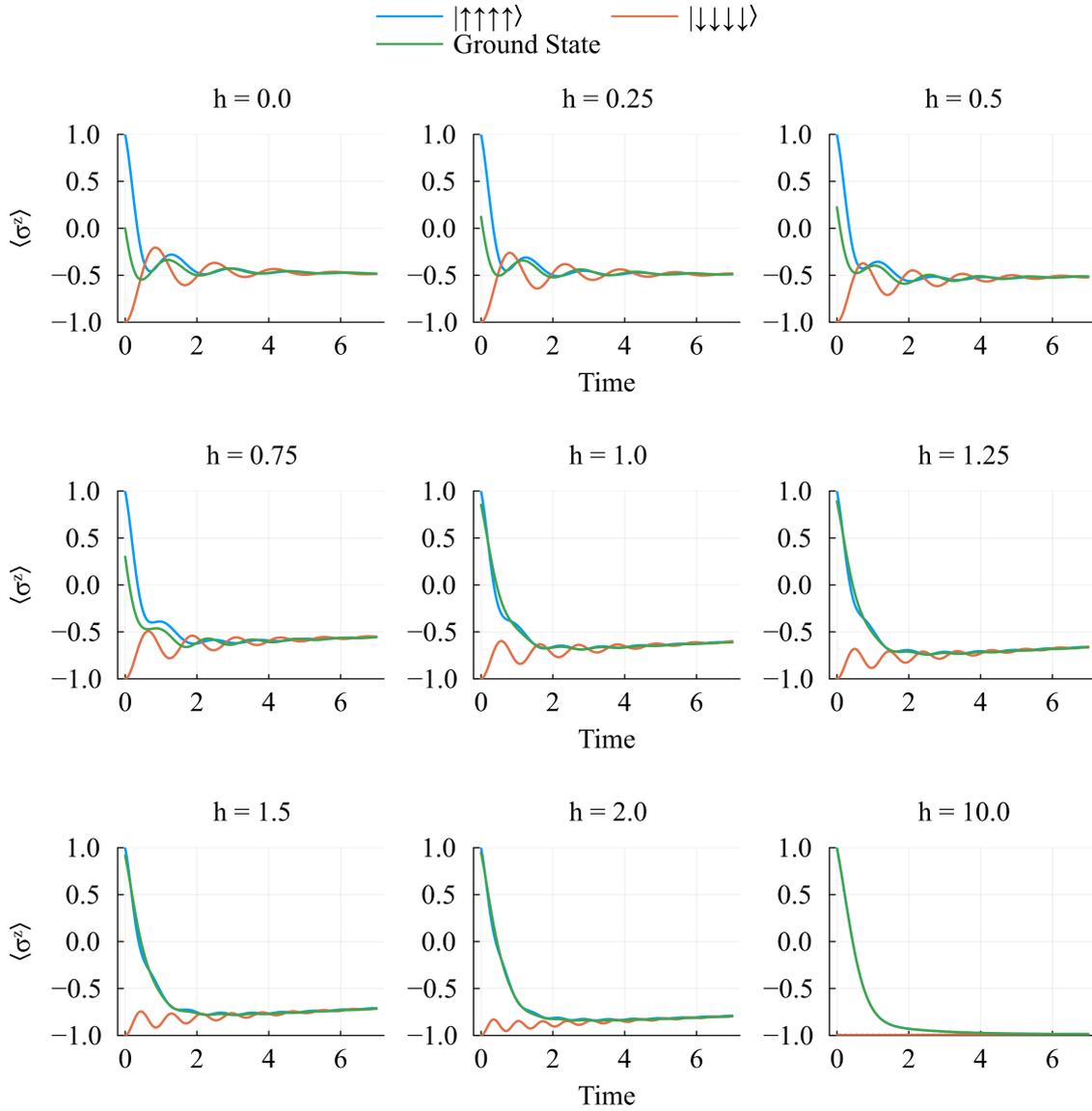


Figura D.11: Evolución temporal de la magnetización de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^-$ .

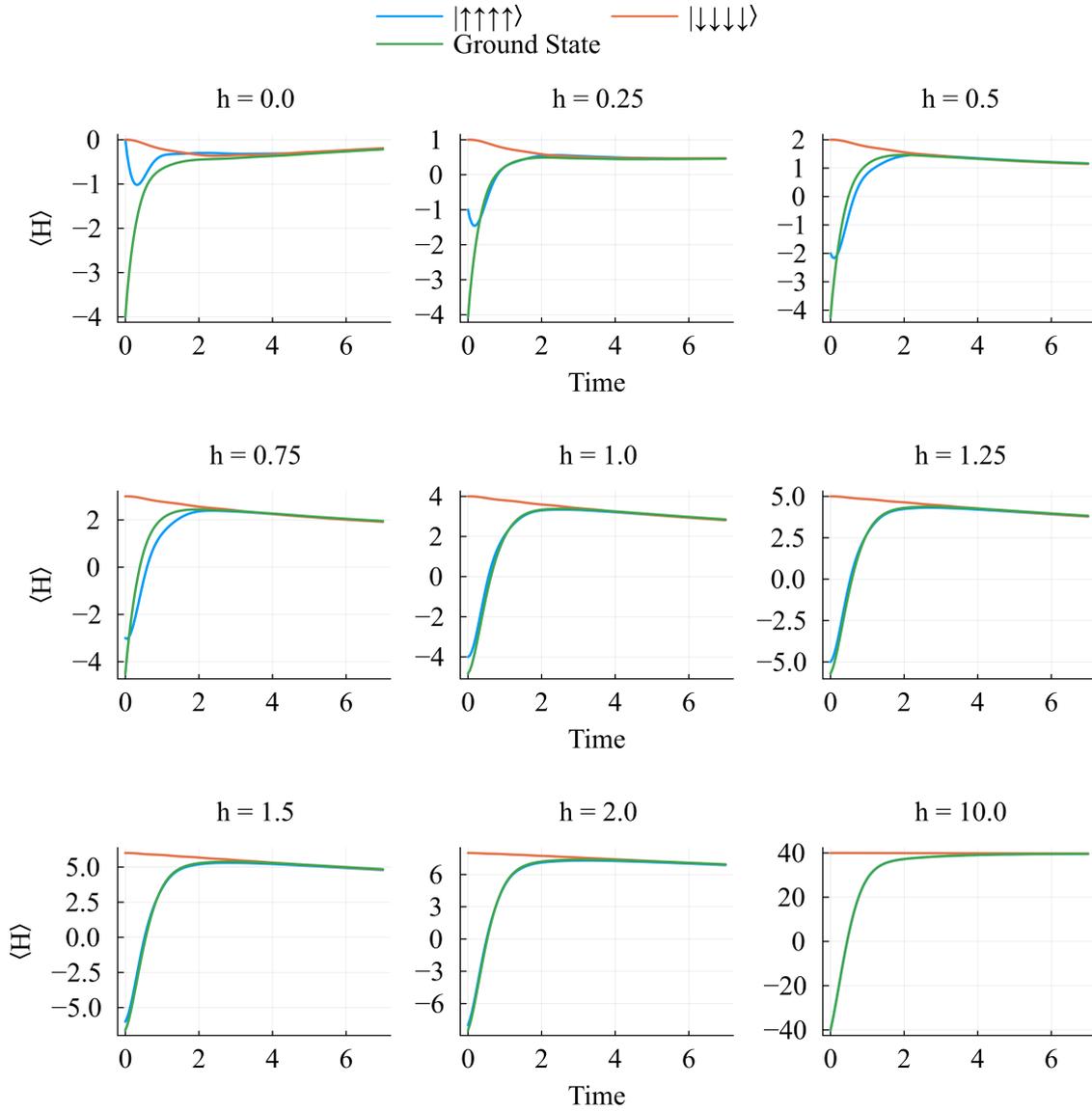


Figura D.12: Evolución temporal de la energía de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^-$ .

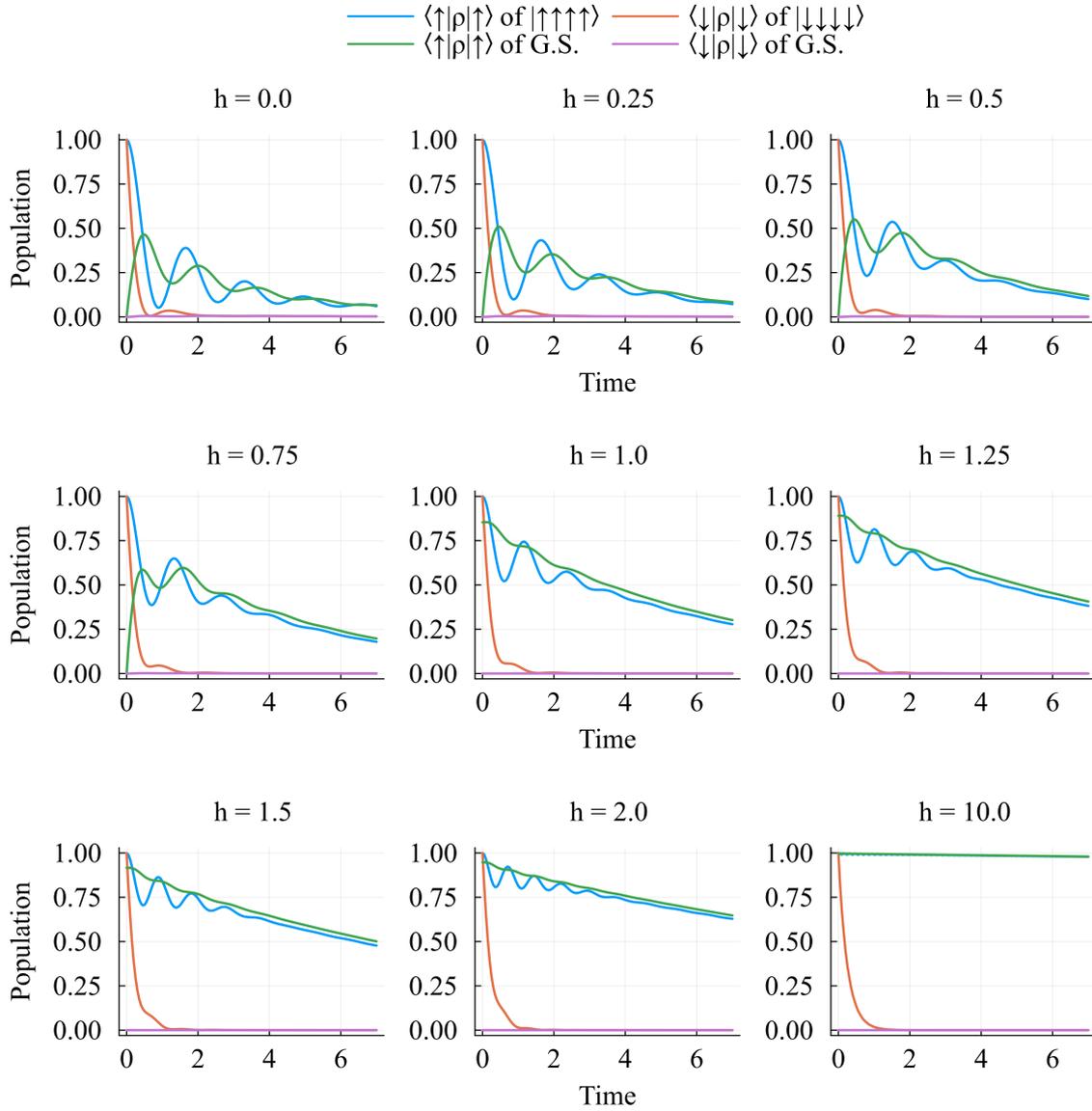


Figura D.13: Evolución temporal de las poblaciones de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+$ .

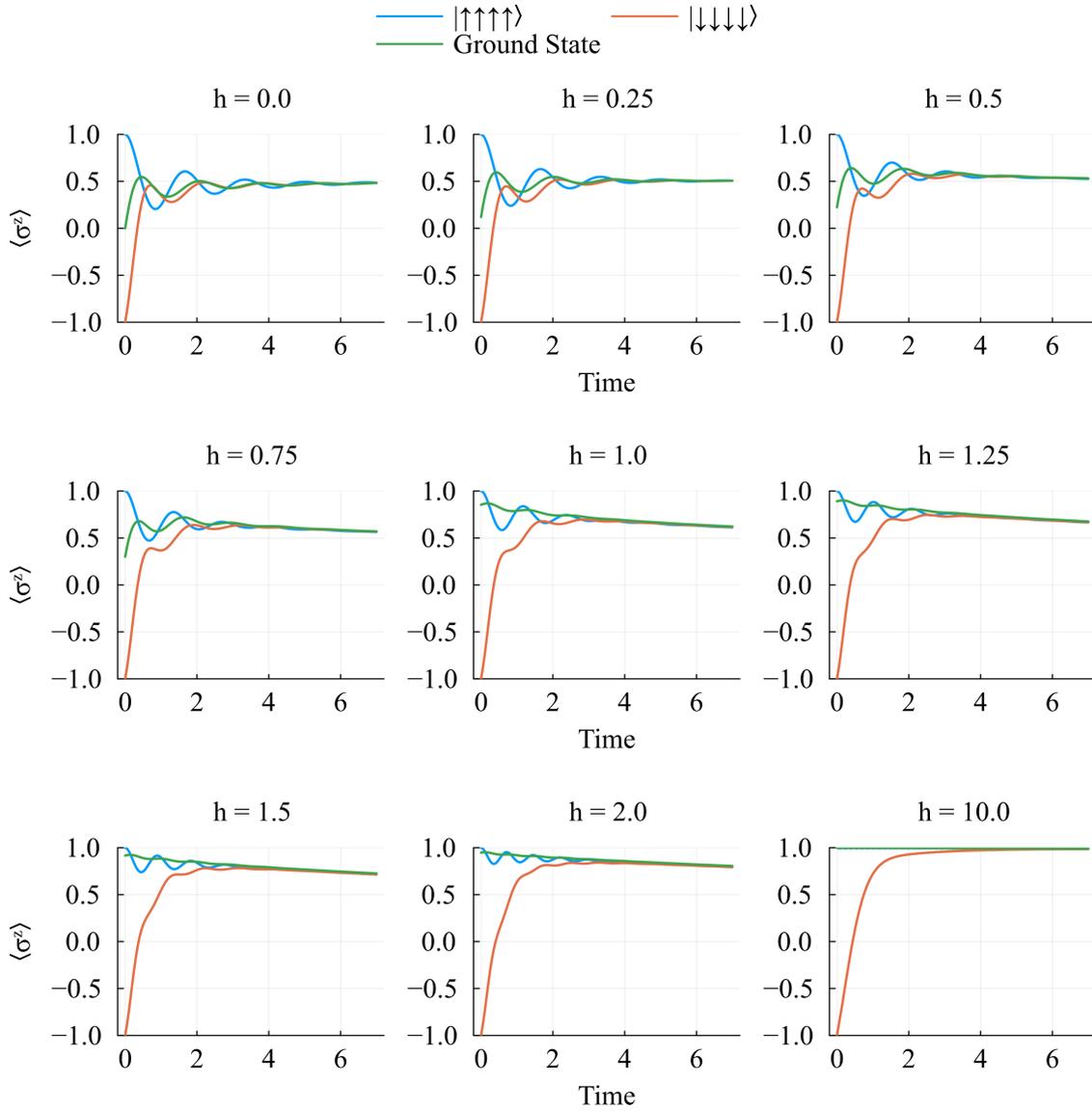


Figura D.14: Evolución temporal de la magnetización de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+$ .

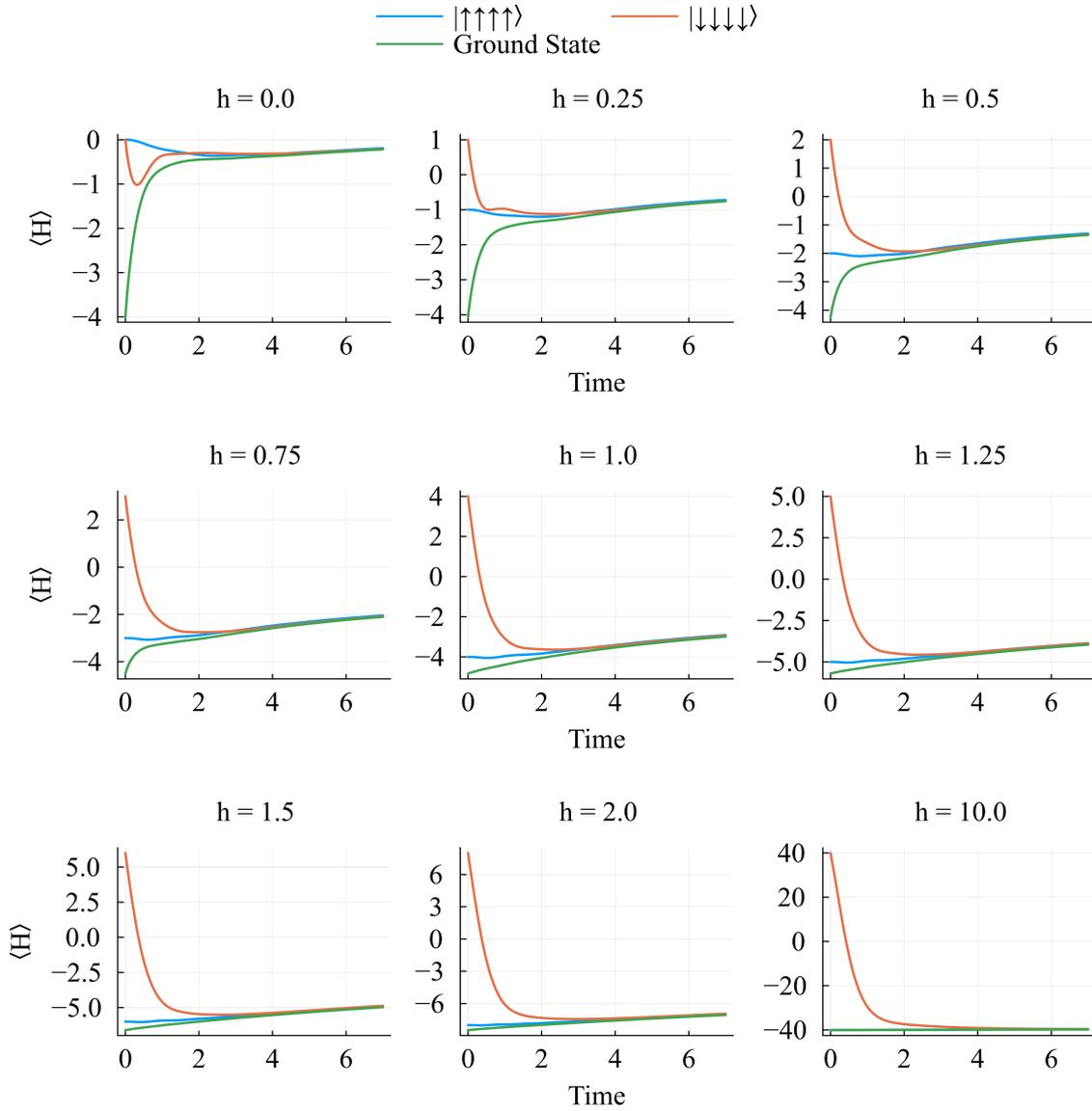


Figura D.15: Evolución temporal de la energía de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. El operador de Lindblad es  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+$ .

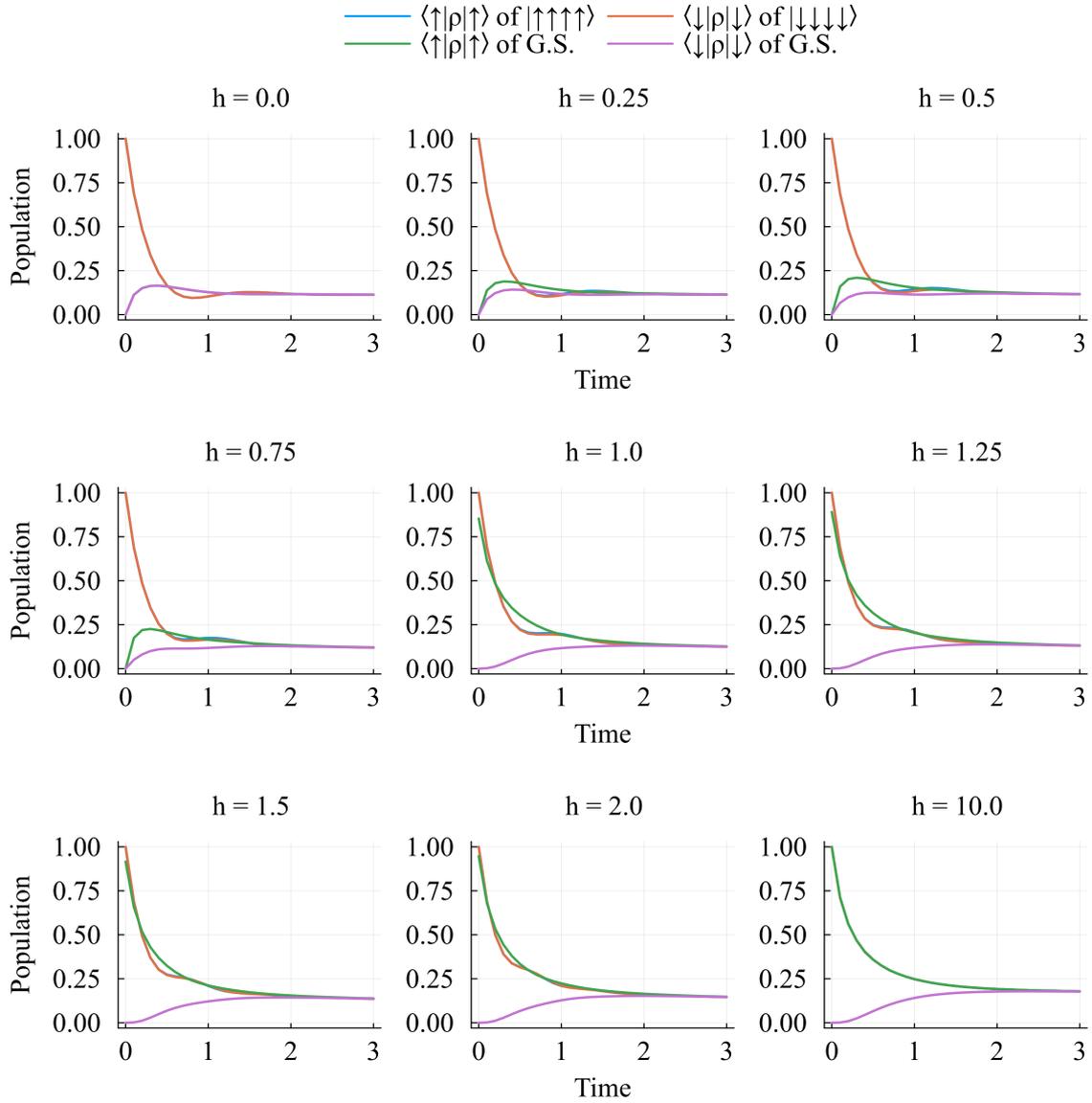


Figura D.16: Evolución temporal de las poblaciones de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. Los operadores de Lindblad son  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^-$  y  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+$ .

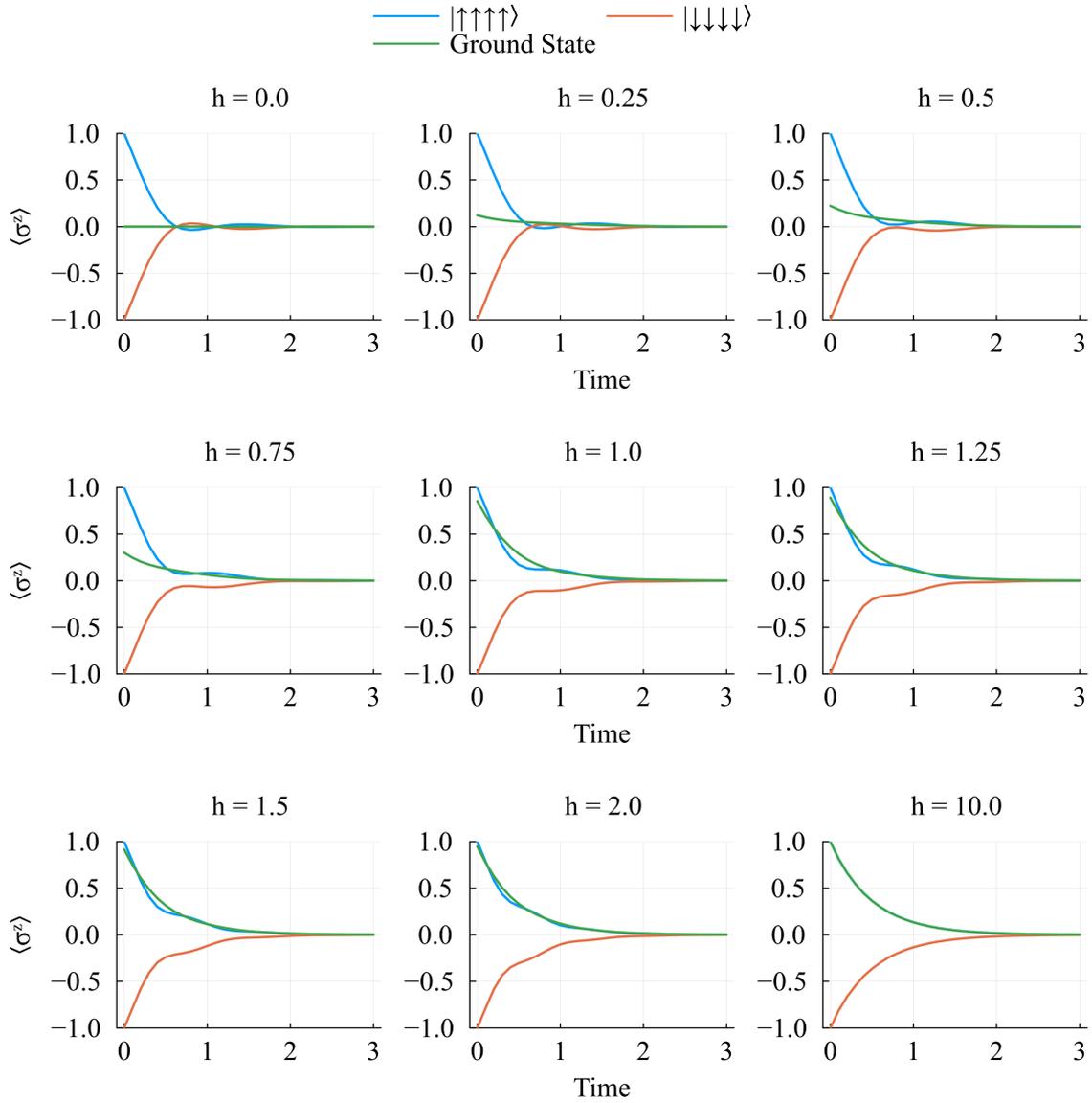


Figura D.17: Evolución temporal de la magnetización de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. Los operadores de Lindblad son  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^-$  y  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+$ .

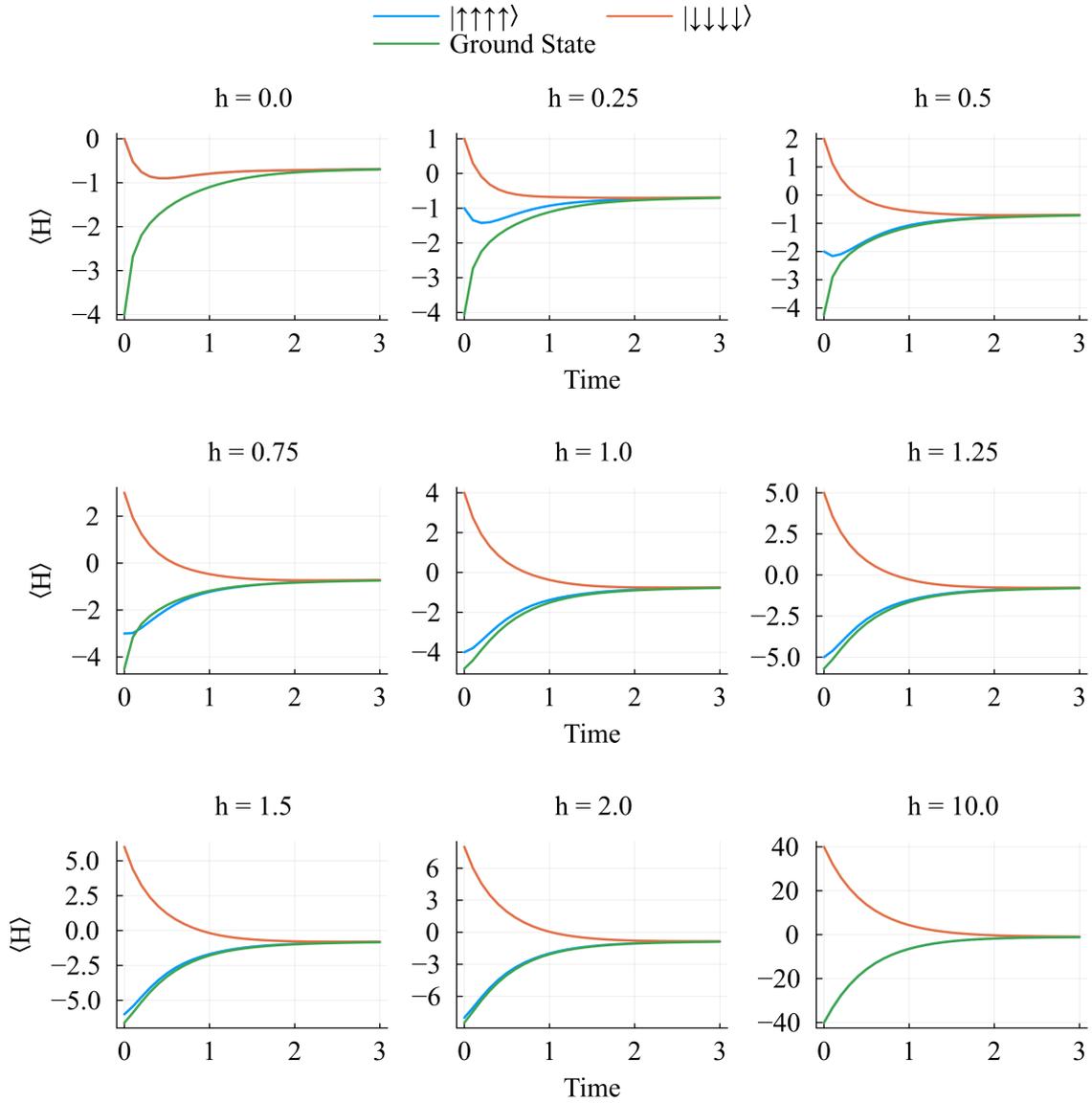


Figura D.18: Evolución temporal de la energía de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. Los operadores de Lindblad son  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^-$  y  $\sum_{i=0}^3 \sigma_i^+$ .

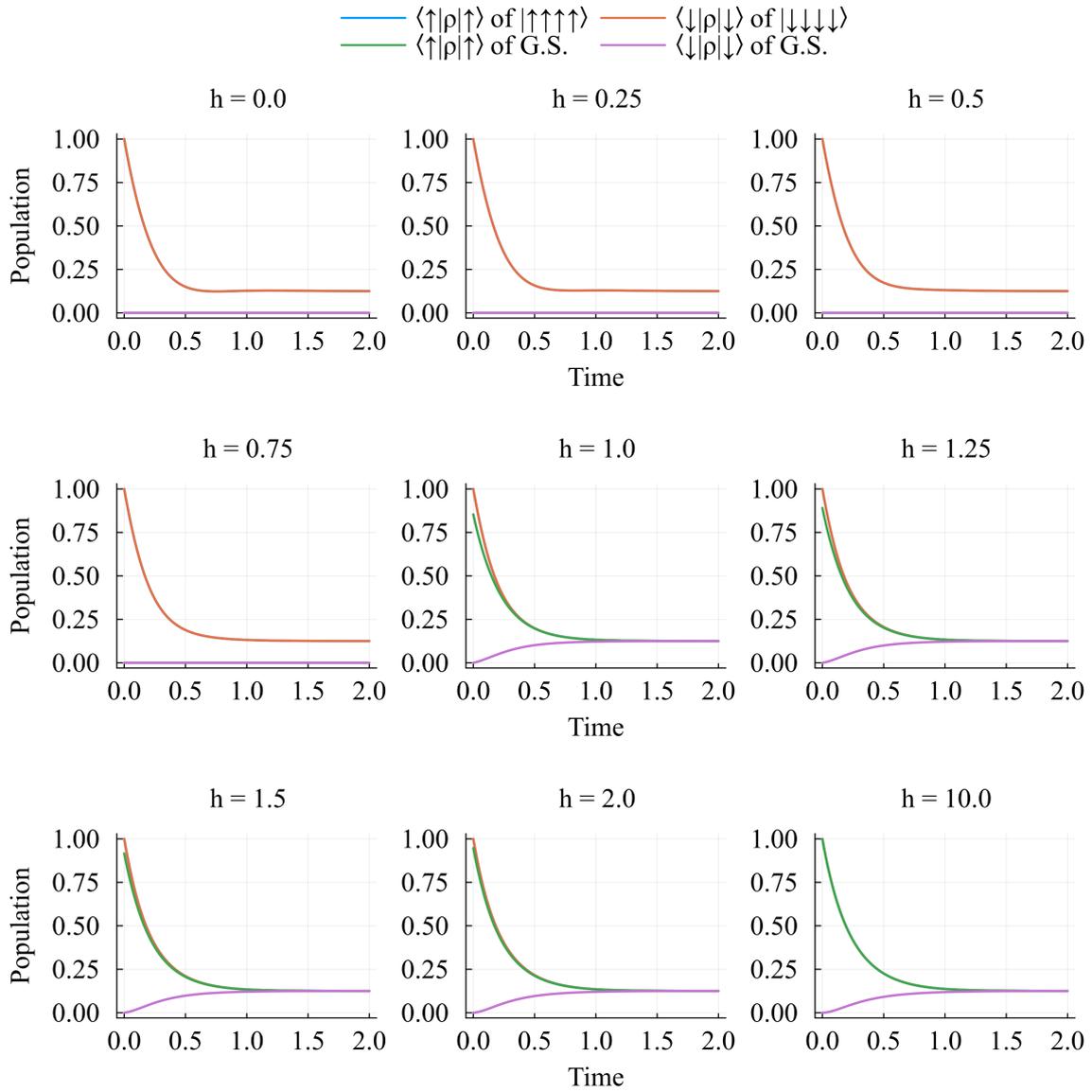


Figura D.19: Evolución temporal de las poblaciones de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones  $h_{ij} |i\rangle \langle j|$  entre los estados computacionales.

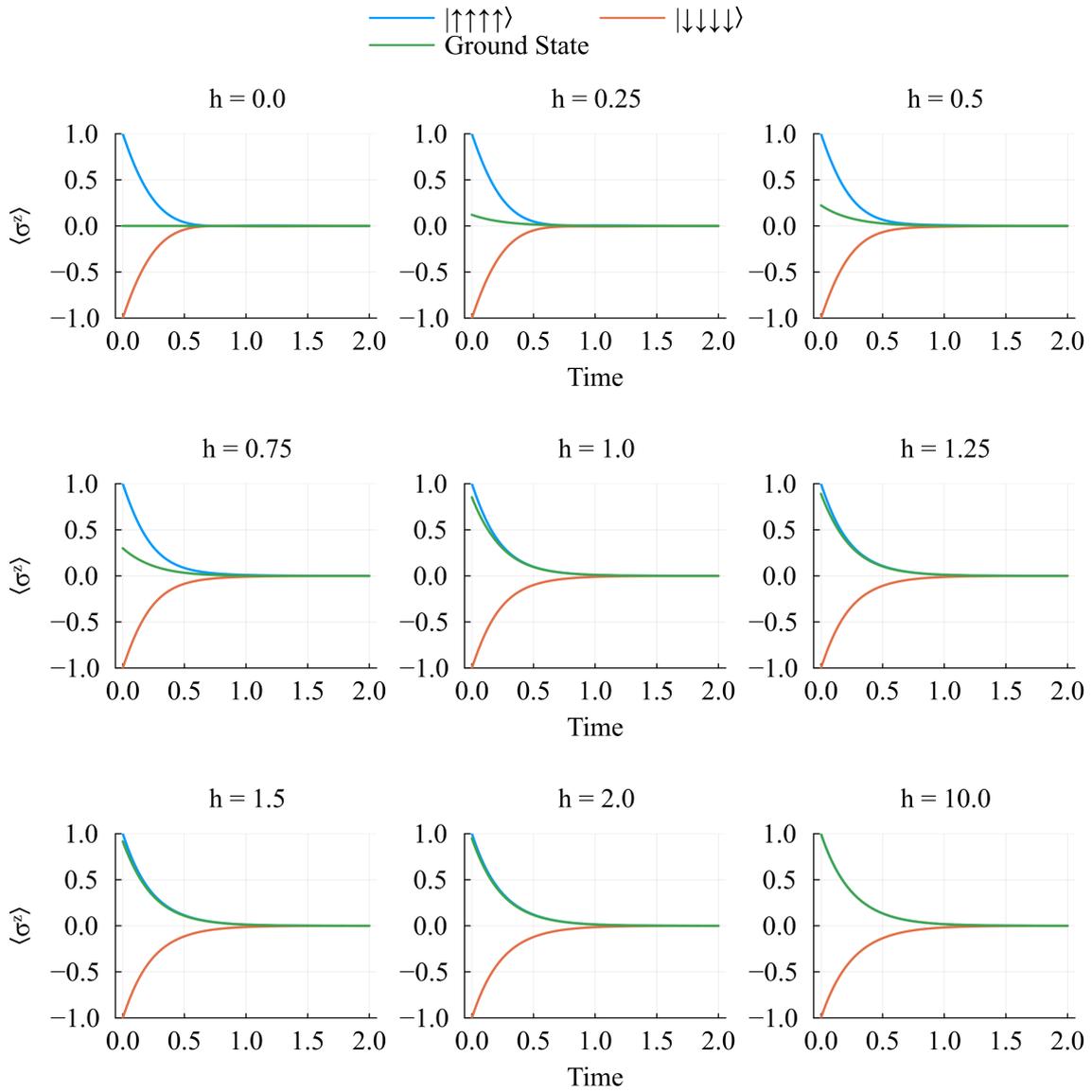


Figura D.20: Evolución temporal de la magnetización de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones  $h_{ij} |i\rangle \langle j|$  entre los estados computacionales.

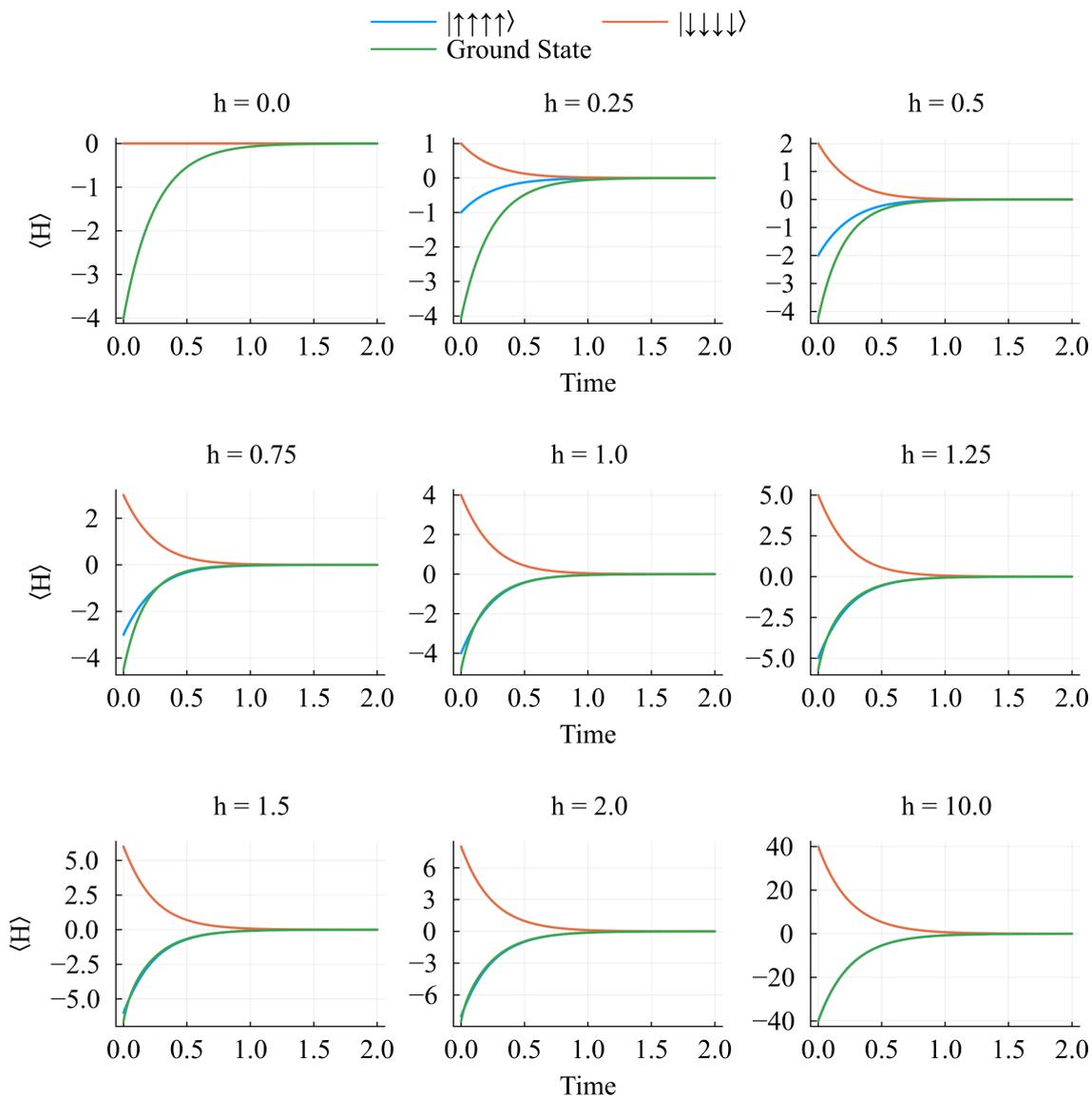


Figura D.21: Evolución temporal de la energía de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones  $h_{ij} |i\rangle \langle j|$  entre los estados computacionales.

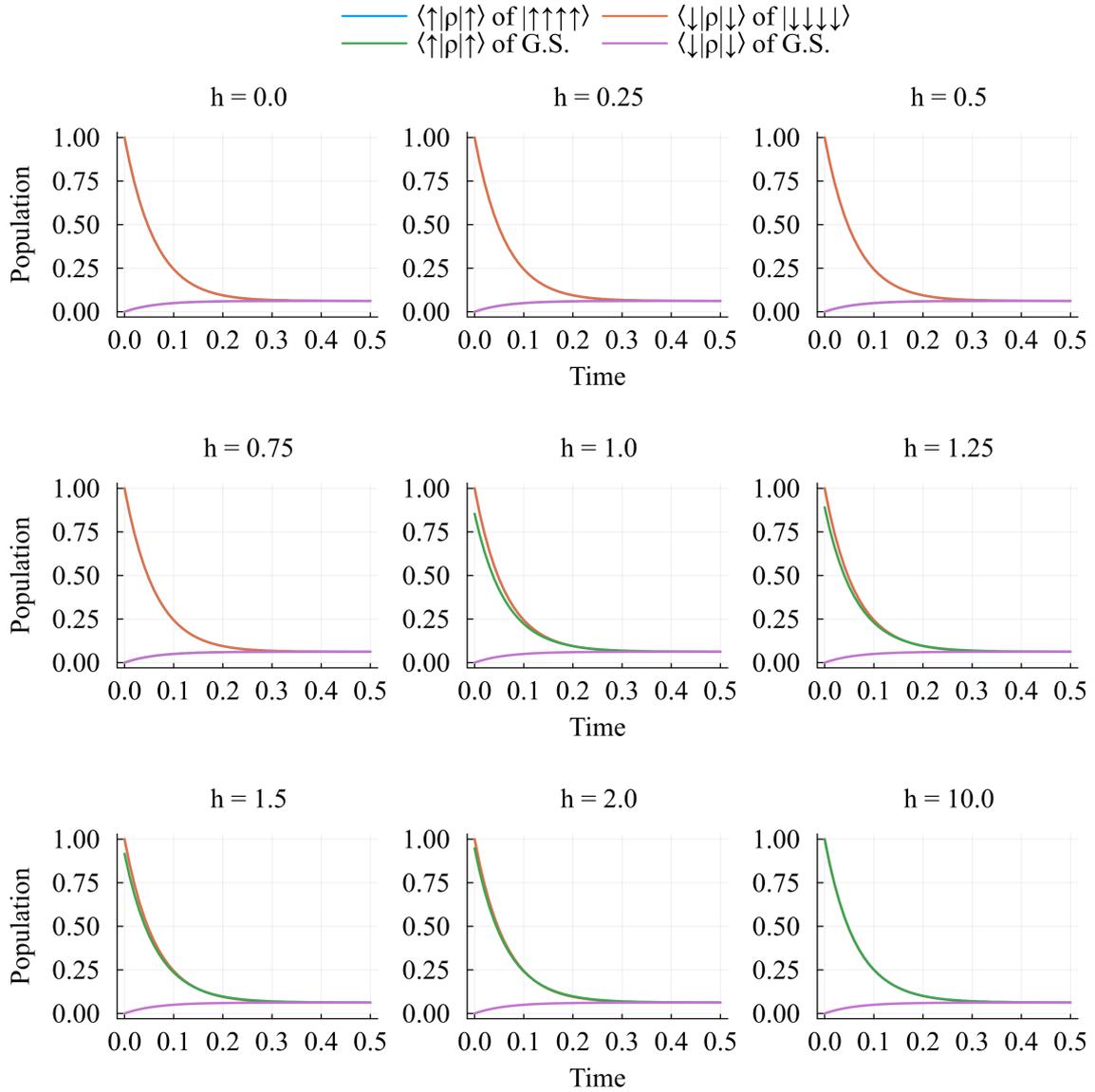


Figura D.22: Evolución temporal de las poblaciones de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones entre los autoestados del hamiltoniano.

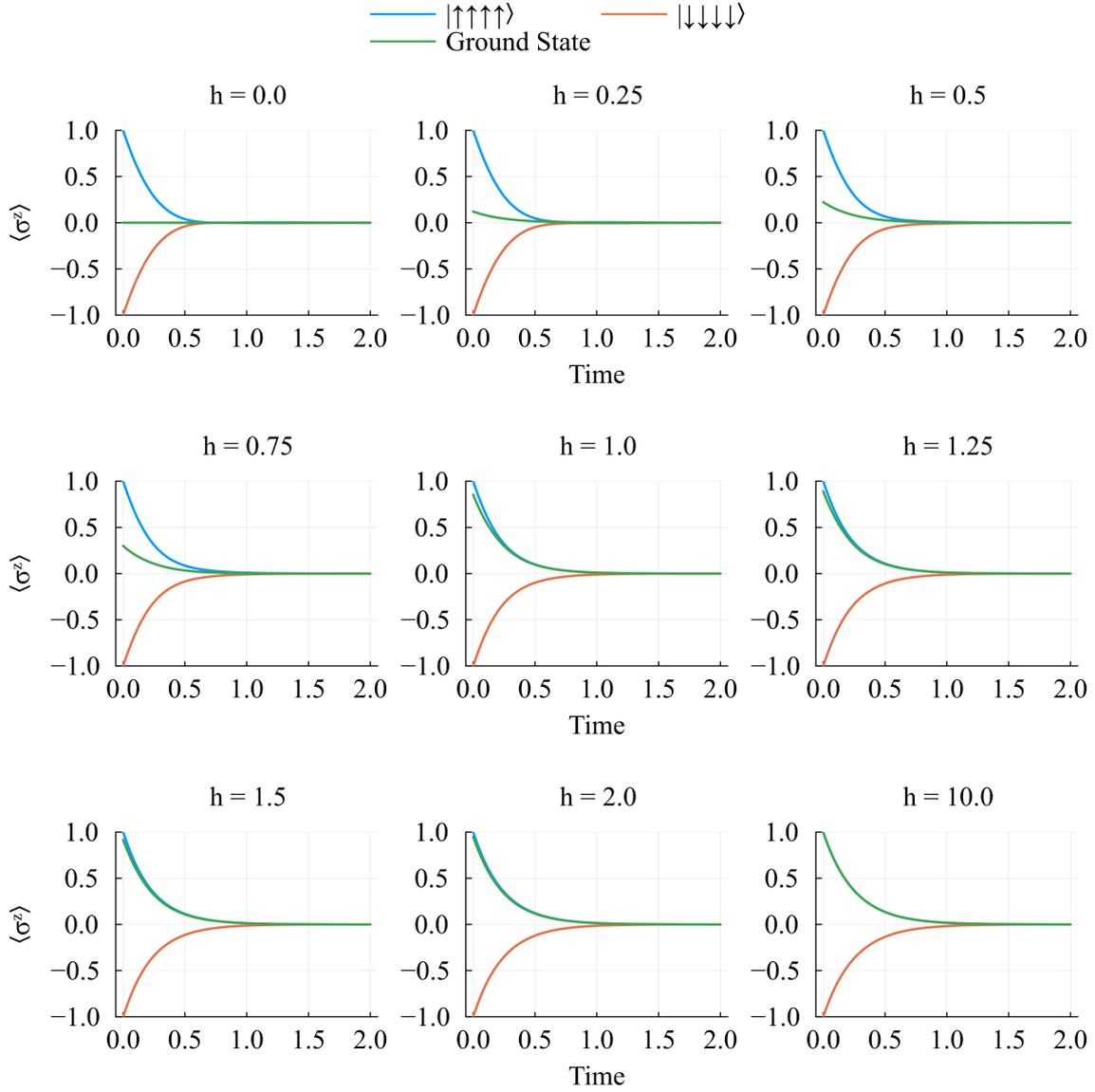


Figura D.23: Evolución temporal de la magnetización de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones entre los autoestados del hamiltoniano.

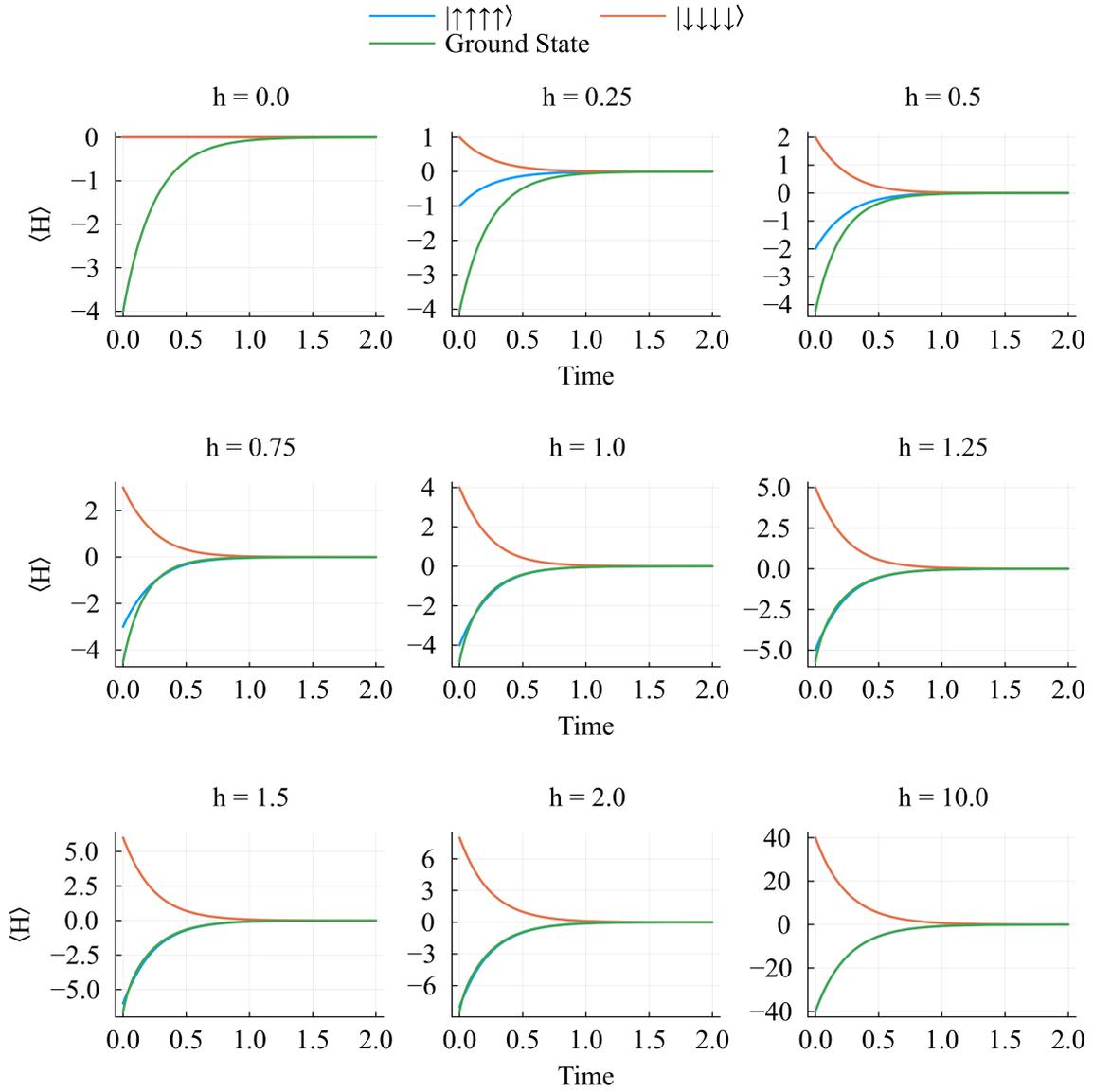


Figura D.24: Evolución temporal de la energía de los estados  $|0\rangle^{\otimes N}$ ,  $|1\rangle^{\otimes N}$  y base de una cadena cuántica de Ising definida con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC. Los operadores de Lindblad son las transiciones entre los autoestados del hamiltoniano.

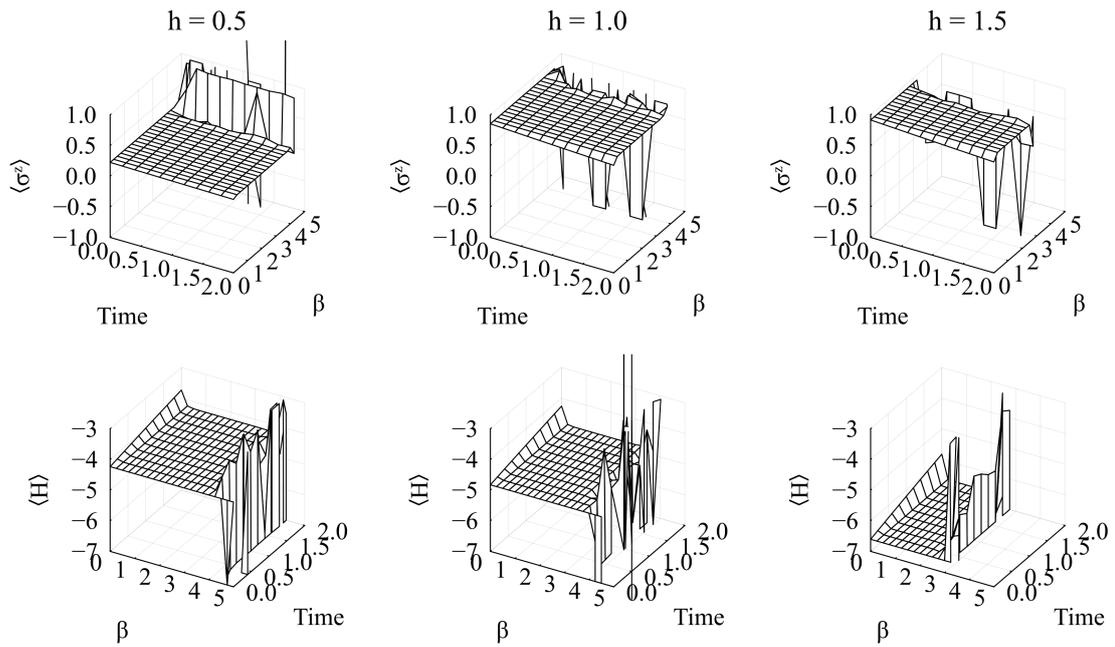


Figura D.25: Evolución temporal de la magnetización y energía del estado base de una cadena cuántica de Ising con  $N = 4$ ,  $J = 1$  y PBC, utilizando transiciones ponderadas entre autoestados como operadores de Lindblad. La forma de estos operadores es la ecuación (2.29). La aparición de picos y bajadas súbitas de las magnitudes al aumentar  $\beta$  se deben al límite de cálculo computacional de valores muy pequeños o muy altos de Julia.

---

## Referencias bibliográficas

---

- [1] Dan Browne, Sougato Bose, Florian Mintert, and M. S. Kim. From quantum optics to quantum technologies. *Progress in Quantum Electronics*, 54:2–18, 2017.
- [2] Wolfgang P. Schleich, Kedar S. Ranade, Christian Anton, Markus Arndt, Markus Aspelmeyer, Manfred Bayer, Gunnar Berg, Tommaso Calarco, Harald Fuchs, Elisabeth Giacobino, Markus Grassl, Peter Hänggi, Wolfgang M. Heckl, Ingolf Volker Hertel, Susana Huelga, Fedor Jelezko, Bernhard Keimer, Jörg P. Kotthaus, Gerd Leuchs, Norbert Lütkenhaus, Ueli Maurer, Tilman Pfau, Martin B. Plenio, Ernst Maria Rasel, Ortwin Renn, Christine Silberhorn, Jörg Schiedmayer, Doris Schmitt-Landsiedel, Kurt Schönhammer, Alexey Ustinov, Philip Walther, Harald Weinfurter, Emo Welzl, Roland Wiesendanger, Stefan Wolf, Anton Zeilinger, and Peter Zoller. Quantum technology: from research to application. *Applied Physics B: Lasers and Optics*, 122(5), 2016.
- [3] Masoud Mohseni, Peter Read, and Hartmut Neven. Commercialize early quantum technologies. *Nature*, 543:171–174, 2017.
- [4] Will Zeng, Blake Johnson, Robert Smith, Nick Rubin, Matt Reagor, Colm Ryan, and Chad Rigetti. First quantum computers need smart software. *Nature*, 549(7671):149–151, 2017.
- [5] Samudra Dasgupta and Travis S. Humble. Stability of Noisy Quantum Computing Devices. pages 1–8, 2023.

- [6] Kishor Bharti, Alba Cervera-Lierta, Thi Ha Kyaw, Tobias Haug, Sumner Alperin-Lea, Abhinav Anand, Matthias Degroote, Hermanni Heimonen, Jakob S. Kottmann, Tim Menke, Wai-Keong Mok, Sukin Sim, Leong-Chuan Kwek, and Alán Aspuru-Guzik. Noisy intermediate-scale quantum algorithms. *Rev. Mod. Phys.*, 94:015004, Feb 2022.
- [7] François Chapeau-Blondeau. Modeling and Simulation of a Quantum Thermal Noise on the Qubit. *Fluctuation and Noise Letters*, 21(6):1–15, 2022.
- [8] Michael Nielsen and Isaac Chuang. Quantum Computation and Information. In *Quantum Computation and Information*, chapter EPR and th, pages 115–117. Cambridge University Press, New York, 10th anniv edition, 2010.
- [9] JOHN PRESKILL. *FAULT-TOLERANT QUANTUM COMPUTATION*, pages 213–269.
- [10] Jonathan Foldager, Arthur Pesah, and Lars Kai Hansen. Noise-assisted variational quantum thermalization. *Scientific Reports*, 12(1):1–11, 2022.
- [11] John Watrous. The Theory of Quantum Information. *The Theory of Quantum Information*, pages 1–590, 2018.
- [12] Walter Greiner, Ludwig Neise, and Horst Stöcker. *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. Springer Verlag, New York, 1995.
- [13] Daniel Manzano. A short introduction to the Lindblad master equation. *AIP Advances*, 10(2):1–28, 2020.
- [14] James D. Whitfield, César A. Rodríguez-Rosario, and Alán Aspuru-Guzik. Quantum stochastic walks: A generalization of classical random walks and quantum walks. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 81(2), 2010.
- [15] G. Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, 48(2):119 – 130, 1976.
- [16] Vittorio Gorini, Andrzej Kossakowski, and E. C.G. Sudarshan. Completely positive dynamical semigroups of N-level systems. *Journal of Mathematical Physics*, 17(5):821–825, 1975.

- [17] H.P. Breuer and F Petruccione. The Theory of Open Quantum Systems. 2002.
- [18] Simon B. Jäger, Tom Schmit, Giovanna Morigi, Murray J. Holland, and Ralf Betzholz. Lindblad Master Equations for Quantum Systems Coupled to Dissipative Bosonic Modes. *Physical Review Letters*, 129(6), 2022.
- [19] Boris V. Bondarev. Lindblad Equation for Harmonic Oscillator: Uncertainty Relation Depending on Temperature. *Applied Mathematics*, 08(11):1529–1538, 2017.
- [20] Sebastian Franke, Stephen Hughes, Mohsen Kamandar Dezfouli, Philip Trøst Kristensen, Kurt Busch, Andreas Knorr, and Marten Richter. Quantization of Quasinormal Modes for Open Cavities and Plasmonic Cavity Quantum Electrodynamics. *Physical Review Letters*, 122(21):1–6, 2019.
- [21] Katherine L. Brown, William J. Munro, and Vivien M. Kendon. Using Quantum Computers for Quantum Simulation. *Entropy*, 12(11):2268–2307, 2010.
- [22] Y. Cao, J. Romero, and A. Aspuru-Guzik. Potential of quantum computing for drug discovery. *IBM Journal of Research and Development*, 62(6), 2018.
- [23] Seth Lloyd. Universal quantum simulators. *Science*, 273(5278):1073–1078, 1996.
- [24] Matthew P. Harrigan, Kevin J. Sung, Matthew Neeley, Kevin J. Satzinger, Frank Arute, Kunal Arya, Juan Atalaya, Joseph C. Bardin, Rami Barends, Sergio Boixo, Michael Broughton, Bob B. Buckley, David A. Buell, Brian Burkett, Nicholas Bushnell, Yu Chen, Zijun Chen, Ben Chiaro, Roberto Collins, William Courtney, Sean Demura, Andrew Dunsworth, Daniel Eppens, Austin Fowler, Brooks Foxen, Craig Gidney, Marissa Giustina, Rob Graff, Steve Habegger, Alan Ho, Sabrina Hong, Trent Huang, L. B. Ioffe, Sergei V. Isakov, Evan Jeffrey, Zhang Jiang, Cody Jones, Dvir Kafri, Kostyantyn Kechedzhi, Julian Kelly, Seon Kim, Paul V. Klimov, Alexander N. Ko-

- rotkov, Fedor Kostritsa, David Landhuis, Pavel Laptev, Mike Lindmark, Martin Leib, Orion Martin, John M. Martinis, Jarrod R. McClean, Matt McEwen, Anthony Megrant, Xiao Mi, Masoud Mohseni, Wojciech Mruczkiewicz, Josh Mutus, Ofer Naaman, Charles Neill, Florian Neukart, Murphy Yuezhen Niu, Thomas E. O'Brien, Bryan O'Gorman, Eric Ostby, Andre Petukhov, Harald Putterman, Chris Quintana, Pedram Roushan, Nicholas C. Rubin, Daniel Sank, Andrea Skolik, Vadim Smelyanskiy, Doug Strain, Michael Streif, Marco Szalay, Amit Vainsencher, Theodore White, Z. Jamie Yao, Ping Yeh, Adam Zalcman, Leo Zhou, Hartmut Neven, Dave Bacon, Erik Lucero, Edward Farhi, and Ryan Babbush. Quantum approximate optimization of non-planar graph problems on a planar superconducting processor. *Nature Physics*, 17(3):332–336, 2021.
- [25] Hongye Yu, Yusheng Zhao, and Tzu-Chieh Wei. Realizing large-size quantum spin chains on cloud quantum computers. 2022.
- [26] Cirq Developers. Cirq, May 2024.
- [27] Guido Van Rossum and Fred L. Drake. *Python 3 Reference Manual*. CreateSpace, Scotts Valley, CA, 2009.
- [28] Google Quantum AI.
- [29] Jarrod R McClean, Nicholas C Rubin, Kevin J Sung, Ian D Kivlichan, Xavier Bonet-Monroig, Yudong Cao, Chengyu Dai, E Schuyler Fried, Craig Gidney, Brendan Gimby, Pranav Gokhale, Thomas Häner, Tarini Hardikar, Vojtěch Havlíček, Oscar Higgott, Cupjin Huang, Josh Izaac, Zhang Jiang, Xinle Liu, Sam McArdle, Matthew Neeley, Thomas O'Brien, Bryan O'Gorman, Isil Ozfidan, Maxwell D Radin, Jhonathan Romero, Nicolas P D Sawaya, Bruno Senjean, Kanav Setia, Sukin Sim, Damian S Steiger, Mark Steudtner, Qiming Sun, Wei Sun, Daochen Wang, Fang Zhang, and Ryan Babbush. Openfermion: the electronic structure package for quantum computers. *Quantum Science and Technology*, 5(3):034014, jun 2020.
- [30] Google AI Quantum. Hartree-Fock on a superconducting qubit quantum computer. *Science*, 369(6507):1084–1089, 2020.

- [31] Adam Glos, Jarosław Adam Mischczak, and Mateusz Ostaszewski. QSWALK.JL: Julia package for quantum stochastic walks analysis. *Computer Physics Communications*, 235(2017):414–421, 2019.
- [32] Jeff Bezanson, Alan Edelman, Stefan Karpinski, and Viral B Shah. Julia: A fresh approach to numerical computing. *SIAM Review*, 59(1):65–98, 2017.
- [33] Shigetoshi Katsura. Statistical mechanics of the anisotropic linear Heisenberg model. *Physical Review*, 127(5):1508–1518, 1962.
- [34] Elliott Lieb, Theodore Schultz, and Daniel Mattis. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Annals of Physics*, 16(3):407–466, 1961.
- [35] J.J. Sakurai and Jim Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, third edit edition, 2021.
- [36] Djordje Radicevic. Spin Structures and Exact Dualities in Low Dimensions. 2018.
- [37] S. Sachdev. Quantum Phase Transitions. *Encyclopedia of Mathematical Physics: Five-Volume Set*, (3):289–295, 2004.
- [38] Michael A Nielsen. The Fermionic canonical commutation relations and the Jordan-Wigner transform. *Arxiv*, pages 1–8, 2005.
- [39] Glen Bigan Mbeng, Angelo Russomanno, and Giuseppe E. Santoro. The quantum Ising chain for beginners. pages 1–56, 2020.
- [40] G. G. Cabrera and R. Jullien. Role of boundary conditions in the finite-size Ising model. *Physical Review B*, 35(13):7062–7072, 1987.
- [41] Zhang Jiang, Kevin J. Sung, Kostyantyn Kechedzhi, Vadim N. Smelyanskiy, and Sergio Boixo. Quantum Algorithms to Simulate Many-Body Physics of Correlated Fermions. *Physical Review Applied*, 9(4):1–23, 2018.
- [42] N. Kitanine, J. M. Maillet, N. A. Slavnov, and V. Terras. Spin-spin correlation functions of the XXZ-1/2 Heisenberg chain in a magnetic field. *Nuclear Physics B*, 641(3):487–518, 2002.

- [43] J. I. Latorre, E. Rico, and G. Vidal. Ground state entanglement in quantum spin chains. *Quantum Information and Computation*, 4(1):48–92, 2004.
- [44] Ferenc Iglói and Yu Cheng Lin. Finite-size scaling of the entanglement entropy of the quantum Ising chain with homogeneous, periodically modulated and random couplings. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2008(6), 2008.
- [45] Sangyun Lee, Hyukjoon Kwon, and Jae Sung Lee. Estimating Entanglement Entropy via Variational Quantum Circuits with Classical Neural Networks. *Physical Review E*, pages 1–13, 2023.
- [46] Pierre Pfeuty. The one-dimensional Ising model with a transverse field. *Annals of Physics*, 57(1):79–90, 1970.
- [47] Alba Cervera-Lierta. Exact ising model simulation on a quantum computer. *Quantum*, 2:1–11, 2018.
- [48] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev. Entanglement in Quantum Critical Phenomena. *Physical Review Letters*, 90(22):4, 2003.
- [49] Peter Kirton, Mor M. Roses, Jonathan Keeling, and Emanuele G. Dalla Torre. Introduction to the Dicke Model: From Equilibrium to Nonequilibrium, and Vice Versa. *Advanced Quantum Technologies*, 2(1-2):1–18, 2019.
- [50] Jonas Rohn, Max Hörmann, Claudiu Genes, and Kai Phillip Schmidt. Ising model in a light-induced quantized transverse field. *Physical Review Research*, 2(2):1–15, 2020.
- [51] Andreas Kruckenhauser. Spontaneous Emission and Superradiance. *BSc Dissertation*, 2015.
- [52] Hanzhen Ma, Oriol Rubies-Bigorda, and Susanne F. Yelin. Superradiance and subradiance in a gas of two-level atoms. pages 1–20, 2022.
- [53] Irene Morales, Rocio Costo, Nicolas Mille, Julian Carrey, Antonio Hernando, and Patricia de la Presa. Time-dependent AC magnetometry and chain formation in magnetite: The influence of particle

size, initial temperature and the shortening of the relaxation time by the applied field. *Nanoscale Advances*, 3(20):5801–5812, 2021.

- [54] A. Bayat and V. Karimipour. Thermal effects on quantum communication through spin chains. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 71(4), 2005.