



Universidad
Zaragoza



TRABAJO DE FIN DE GRADO

MODELOS DE RESERVORIOS MAGNÓNICOS
BASADOS EN *WAVEGUIDE QED*

Autor:

Andrés Martín Megino

Directores:

Dra. María José Martínez Pérez

Juan Román Roche

Ponente:

Dr. David Zueco Láinez

Universidad de Zaragoza

Facultad de ciencias

Departamento de física de la materia condensada

Curso 2020 - 2021

"All we have to decide is what to do with the time that is given to us."
Gandalf the Grey
J.R.R. Tolkien, The Fellowship of the Ring

En primer lugar, dedico este trabajo y todo lo que su elaboración a significado a mis padres, Lucía y Javi.

En segundo lugar, quiero destacar en este pequeño espacio el apoyo y la ayuda de los cuatro supervisores de este trabajo, a los cuales estoy muy agradecido. A Pepa, a Juan y en especial, a David y a Carlos. Me faltan líneas en esta página para agradecer vuestra disponibilidad y la paciencia que habéis tenido conmigo en todo este trayecto. Sin duda, vuestra labor ha reavivado mi interés por esta fascinante disciplina.

Índice

1. Introducción	1
2. Objetivos y resumen de los contenidos	2
3. Fundamento teórico. Ondas de espín.	2
4. Interacción dipolar magnón-espín. Descripción del modelo.	6
4.1. Aproximación de onda rotante (RWA)	8
4.2. Caso unidimensional	11
4.3. Condición de resonancia	14
4.4. Caso bidimensional	15
5. Emisión espontánea	17
5.1. Regla de oro de Fermi	18
5.2. Estudio de la dinámica de las funciones de onda	19
5.2.1. Aproximación markoviana. Teoría de Wigner-Weisskopf.	20
5.2.2. Régimen no markoviano. Resolución numérica de las ecuaciones.	23
6. Conclusiones	24
Referencias	25
A. Desarrollo del hamiltoniano de interacción dipolar	26
B. Hamiltoniano de espín con término de anisotropía	30
C. Detalles sobre la aproximación markoviana	31
C.1. Conservación del número de excitaciones	31
C.2. Extensión al continuo de la función espectral $G(\omega)$	32
C.3. Sobre la función kernel $\mathcal{K}(u)$	33

1. Introducción

A comienzos del siglo XX, los físicos aprendieron muchas cosas, y quizá la más importante de ellas fue que aún quedaba mucho por conocer del universo. Tanto en la escala más grande como en la más pequeña. Esto mismo debió pensar Max Plank cuando resolvió la catástrofe del ultravioleta mediante su famosa ecuación $E = \hbar\omega$, la cual marcó el comienzo de la revolución cuántica. No obstante, ni siquiera él, pionero en el estudio de la interacción luz-materia a través de esta teoría, hubiera sido capaz de advertir la gran cantidad de avances y aplicaciones que esta rama de la física propiciaría a partir de entonces.

En este trabajo, la interacción luz-materia suscita interés dentro del marco de la óptica cuántica: los átomos y las moléculas pueden interactuar a través de su carga y espín con el campo electromagnético, emitiendo o absorbiendo fotones. Con las condiciones de contorno adecuadas, este campo puede ser confinado y por tanto cuantizarse. La cuantificación del campo electromagnético se formaliza empleando la electrodinámica cuántica (QED por sus siglas en inglés) aplicada a cavidades resonantes o guías de ondas, teoría que en este ámbito estudia la interacción de la materia con fotones confinados en un medio propagante, concretamente con el espín electrónico de los átomos. El objetivo principal de este confinamiento es maximizar la interacción luz-materia, la cual es ya de por sí débil. Si este acoplo tiene una magnitud suficiente, podrán explorarse algunas posibles aplicaciones. Una de ellas, con gran potencial desde el punto de vista de las tecnologías cuánticas, es la comunicación: situando dos átomos o qubits (sistemas cuánticos discretos) a una distancia suficiente, se puede lograr que sus espines electrónicos interactúen indirectamente a través de los fotones confinados, que se propagan a la velocidad de la luz por la guía de ondas.

Con estas premisas, se está en disposición de presentar el tema principal del trabajo: el estudio del comportamiento de sistemas con un número discreto de niveles de energía acoplados a un medio propagante. En cuanto a este último, es habitual que se trabaje con guías de onda QED, en las que el acoplo se manifiesta en forma de fotones. No obstante, en este texto se va a construir desde los cimientos una analogía de este modelo, pues resulta interesante plantear la aplicabilidad de otro candidato a medio propagante que interactúe con un átomo o qubit. Aquí, el candidato propuesto consiste en una colección de espines localizados, los cuales estarán modelizados usando el hamiltoniano de Heisenberg para medios ferromagnéticos. Esta colección tomará el papel de la guía de ondas, y en lugar de fotones se tendrán ondas de espín o magnones: cuasipartículas que describen los modos de excitación fundamentales de un medio ferromagnético. De esta forma, se sustituye la interacción luz-materia por la interacción dipolar entre los espines del medio y el del qubit. Podría cuestionarse la aplicabilidad de un modelo de estas características a raíz de una de las premisas de las que parte: la localización espacial tanto del qubit como de los espines del medio ferromagnético. No obstante, en la actualidad, la capacidad de manipulación de la materia incluso a escalas moleculares es abrumadora: el ser humano es desde hace años capaz de desenvolverse notablemente en esta disciplina, pudiendo incluso distinguir y manipular átomos uno a uno.

Algunas de las características del modelo original construido en este trabajo de fin de grado, que lo hacen interesante para su aplicación en tecnologías cuánticas y que lo distinguen de las guías de onda QED, son:

- Las ondas de espín se pueden usar para transmitir información de manera eficiente, ya que

presentan bajas pérdidas energéticas y de coherencia.

- Los magnones carecen de carga y por lo tanto no disipan energía a través de corriente eléctrica.
- Las propiedades de las ondas de espín pueden ser modificadas a través de su relación de dispersión. Una forma de hacerlo es aplicando un campo magnético externo.

2. Objetivos y resumen de los contenidos

En primer lugar, en la sección 3 de este trabajo se ofrece una descripción microscópica de las ondas de espín, junto con una rigurosa derivación del hamiltoniano de cuasipartículas bosónicas (siguiendo el desarrollo presentado en la referencia [2]) que las define matemáticamente y que será fundamental en las siguientes partes. La intención es asentar el formalismo matemático involucrado en todo el trabajo e introducir al lector a los conceptos físicos que se manejan de la manera más efectiva posible. A continuación, en la sección 4 se explica la construcción del modelo original, objeto central de este trabajo de fin de grado. Se parte del hamiltoniano total del sistema, que incluye tanto los términos individuales como el de interacción dipolar \mathcal{H}_{d-d} . El objetivo de esta sección central es describir tal interacción a partir de la reescritura de \mathcal{H}_{d-d} en función de los operadores J^\pm y J^z del qubit y de los operadores de creación y aniquilación magnónicos $b_{\mathbf{k}}$ y $b_{\mathbf{k}}^\dagger$. Esto se hace para una geometría general del medio ferromagnético, pero se particulariza para dos redes de Bravais sencillas, en una y dos dimensiones. Así mismo, se ofrece una justificación del uso de una versión simplificada de tal hamiltoniano, a partir de la aproximación de onda rotante (RWA). Esta reduce considerablemente la complejidad de \mathcal{H}_{d-d} y conduce a un hamiltoniano de interacción espín-bosón, muy parecido al obtenido de la cuantización del campo electromagnético en la cavidad QED [7, 10].

Por último, en la sección 5 se pretende estudiar la dinámica del sistema con el cálculo de la emisión espontánea en los niveles excitados de menor energía (estados de una única excitación), partiendo de la regla de oro de Fermi y concluyendo con la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger en este subespacio de funciones de onda. El objetivo aquí es distinguir dos regímenes de comportamiento diferentes, vinculados a la relación entre la anchura energética Δ del qubit y la banda de energías magnónicas y también al cumplimiento de la condición de resonancia (explicada en la subsección 4.3).

3. Fundamento teórico. Ondas de espín.

A los físicos, y a los científicos en general, les gusta clasificar. Dentro de una de las múltiples ramas de la física de materiales, los medios magnéticos se estudian por separado según las propiedades que presenten, y en este sentido quizá sea el ferromagnetismo uno de los comportamientos más comunes. En los materiales ferromagnéticos, los momentos dipolares atómicos $\vec{\mu}$ experimentan una interacción de largo alcance, también conocida como interacción de canje, que tiende a alinearlos paralelamente. A temperaturas suficientemente bajas, este hecho da lugar a susceptibilidades magnéticas de alto orden de magnitud y también a la presencia de magnetización remanente (en ausencia de campo externo).

Sin embargo, el ferromagnetismo y la interacción de canje no pueden comprenderse desde el punto de vista de la física clásica; es necesario un tratamiento cuántico. En este sentido, es coherente comenzar este trabajo relacionando los momentos dipolares magnéticos de los átomos o iones, que son el objeto clásico que describe microscópicamente la interacción magnética, con un agente puramente cuántico: el espín de los electrones de la corteza. Esta relación se verá con mayor detalle más adelante, a partir del término de Zeeman.

El hamiltoniano de Heisenberg constituye el modelo teórico fundamental del comportamiento ferromagnético en el marco microscópico. Este hamiltoniano tiene en cuenta que los espines del material están localizados en el espacio y se escribe como:

$$\mathcal{H}_{\mathcal{J}} = - \sum_{i,j} \mathcal{J}_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (3.1)$$

Donde $\mathcal{J}_{ij} > 0$ es la integral de intercambio, que cuantifica la intensidad de la interacción entre el espín \vec{S}_i del átomo i y el de j , \vec{S}_j , y tiene en cuenta el principio de exclusión de Pauli y la repulsión de Coulomb. Por construcción, el estado de menor energía corresponde a tener todos los espines alineados paralelamente. Aunque por simetría esta dirección es arbitraria, supóngase que tal alineamiento se produce en el sentido positivo del eje Z . En tal caso se define $|G\rangle = \prod_i |S, S^z = S\rangle$, la función de onda correspondiente al estado fundamental.

Este hamiltoniano es una forma más que conveniente de introducir al lector en el formalismo matemático de las cuestiones físicas que se pretenden exponer en el trabajo. Y para proseguir con esta introducción, se tratará de simplificarlo considerando interacción de campo medio a primeros vecinos (n.n.). Es decir, se escribirá la integral de intercambio a partir de aquí como:

$$\mathcal{J}_{ij} = \begin{cases} \mathcal{J} & \text{si } j \text{ e } i \text{ son primeros vecinos} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad \rightarrow \quad \mathcal{H}_{\mathcal{J}} = -\mathcal{J} \sum_{i,j;nn} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (3.2)$$

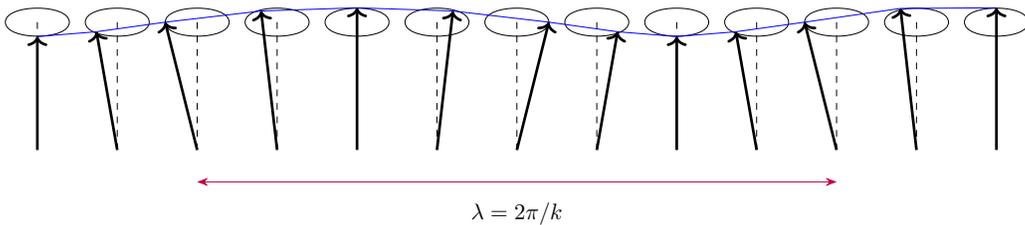


Figura 1: esquema de la interpretación clásica de las ondas de espín y su longitud de onda. Estos modos de excitación quedan caracterizados por su vector de ondas \mathbf{k} .

En este punto, uno podría plantearse cómo construir las funciones de onda de los primeros estados excitados. Una opción bastante factible a primera vista sería $S_i^- |G\rangle$, es decir, disminuir en una unidad la tercera componente del espín de i . No obstante, puede verse que existen estados de menor energía, que pueden describirse como una precesión periódica de los espines (entendidos como vectores clásicos) en torno a la posición de mínima energía, tal y como se representa en la figura 1.

Estas son las ondas de espín, que corresponden al fin y al cabo a excitaciones de pequeña energía del estado fundamental.

En términos cuánticos, las ondas de espín pueden ser tratadas matemáticamente como cuasipartículas, de forma semejante a los fotones. El objetivo ahora será buscar la cuantización de estas excitaciones a partir de la modificación del hamiltoniano de Heisenberg. Además, se va a complicar intencionadamente esta tarea añadiendo a (3.2) el término de Zeeman [2], que tiene en cuenta la relación entre momento dipolar magnético y espín que hemos mencionado anteriormente [1]:

$$\vec{\mu} = -g_J \mu_B \vec{J} \stackrel{L=0}{=} -g_e \mu_B \vec{S} \quad (3.3)$$

Siendo $g_e \cong 2,0043$ el factor de Landé del electrón y $\mu_B = |e|/2m$ el magnetón de Bohr. Estrictamente, esta relación también ha de tener en cuenta el momento angular orbital \vec{L} . No obstante, se supondrá que este es nulo para la capa electrónica, lo cual valida la expresión (3.3). Asumiendo que el campo magnético va dirigido en el sentido negativo del eje Z , el término de Zeeman es:

$$\mathcal{H}_Z = -\vec{\mu} \vec{B}_{ext} = -g_e \mu_B B_{ext} \cdot S^z \quad (3.4)$$

Este término indica que en presencia de un campo magnético externo, los espines tienden a apuntar en su misma dirección pero en sentido contrario. Considérese entonces un conjunto de N espines en los nodos de una red de Bravais. Sumando (3.2) y (3.4), se define el hamiltoniano total \mathcal{H}_R :

$$\mathcal{H}_R = \mathcal{H}_{\mathcal{J}} + \mathcal{H}_Z = -\mathcal{J} \sum_{i,j;nm} \vec{S}_i \vec{S}_j - g_e \mu_B B_{ext} \sum_i S_i^z \quad (3.5)$$

Cabe mencionar que a lo largo de este escrito, todos los operadores de espín están adimensionalizados, de tal manera que \mathcal{J} y $g_e \mu_B B_{ext}$ tienen unidades de energía. Para llegar al hamiltoniano característico de las cuasipartículas, se va a comenzar empleando los operadores escalera $S_j^\pm = S_j^x \pm i S_j^y$, tal que:

$$\mathcal{H}_{\mathcal{J}} = -\mathcal{J} \sum_{i,j;nm} \left[\frac{1}{2} \left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) + S_i^z S_j^z \right] - g_e \mu_B B_{ext} \sum_i S_i^z \quad (3.6)$$

El estado fundamental $|\Psi_0\rangle$ corresponde a la situación de tener todos los spines alineados en una dirección y sentido comunes, que debido al término de Zeeman serán $|\Psi_0\rangle = \prod_i |S, S_z = S\rangle_i$. La primera premisa del modelo teórico va a ser considerar un régimen de bajas energías o pequeñas oscilaciones, en el que conviene pasar de los operadores escalera S_j^\pm a los operadores bosónicos a_j^\dagger y a_j con $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \mathbb{I}$ mediante la transformación de Holstein-Primakoff [2]:¹

$$S_j^+ = \sqrt{2S} \left(\mathbb{I} - \frac{1}{2S} a_j^\dagger a_j \right)^{1/2} a_j; \quad S_j^- = \sqrt{2S} \left(\mathbb{I} - \frac{1}{2S} a_j^\dagger a_j \right)^{1/2} a_j^\dagger \quad (3.7)$$

En el régimen propuesto, se considerará que la tercera componente del espín apenas se desvía en promedio de su valor en el estado fundamental, es decir, $\langle S^z \rangle / N \simeq S$. Esto supondrá [2]:

¹Sea A un operador lineal, se define el operador raíz cuadrada $B := A^{1/2}$ como aquel que verifica $B^2 = A$.

$$\left. \begin{aligned} [S_j^+, S_j^-] &= 2S_j^z \\ [S_j^+, S_j^-] &= 2(S - a_j^\dagger a_j) \end{aligned} \right\} \implies S_j^z = S \cdot \mathbb{I} - a_j^\dagger a_j \quad (3.8)$$

$$\langle S^z \rangle = \langle \Sigma_j S_j^z \rangle = \langle NS \cdot \mathbb{I} - \Sigma_j a_j^\dagger a_j \rangle = N \left(S - \langle a_j^\dagger a_j \rangle \right) \implies \langle a_j^\dagger a_j \rangle \ll S \quad (3.9)$$

Asumiendo estas excitaciones de baja energía, con (3.9) se aproxima la transformación (3.7) a:

$$S_j^+ \cong \sqrt{2S} a_j; \quad S_j^- \cong \sqrt{2S} a_j^\dagger \quad (3.10)$$

Juntando (3.6) y (3.10), tomando S_j^z como en (3.8) y despreciando el término de segundo orden:²

$$\mathcal{H}_J = E_0 + (2\mathcal{J}S\nu + g_e\mu_B B_{ext}) \sum_i a_i^\dagger a_i - 2\mathcal{J}S \sum_{i,j;nn} a_i^\dagger a_j \quad (3.11)$$

Siendo $E_0 = -\mathcal{J}\nu S^2 N - g_e\mu_B B_{ext} NS = \langle \Psi_0 | \mathcal{H}_R | \Psi_0 \rangle$ la energía correspondiente al estado fundamental y ν el número de primeros vecinos en la red. Para dar el último paso, se van a reexpresar los operadores bosónicos en función de los vectores de onda \mathbf{k} mediante la transformada de Fourier:

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} b_{\mathbf{k}}; \quad a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} b_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (3.12)$$

Donde \mathbf{R}_j es el vector posición del átomo j en la red. En cuanto al dominio de sumación, serán los vectores de onda \mathbf{k} cuya forma viene dada por las condiciones de contorno periódicas de Born-von Karman. Puede verse fácilmente que la relación de conmutación entre los nuevos operadores es equivalente a la de a_j y a_j^\dagger teniendo en cuenta (3.12):

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^\dagger] = \frac{1}{N} \sum_{j_1 j_2} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{j_1} - \mathbf{R}_{j_2})} [a_{j_1}, a_{j_2}] = \frac{1}{N} \sum_{j_1} \mathbb{I} = \mathbb{I} \quad (3.13)$$

Por otro lado, incluyendo (3.12) en (3.11) se tiene [2]:

$$\sum_j a_j^\dagger a_j = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \underbrace{\sum_j e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{R}_j}}_{=N\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \quad (3.14a)$$

$$\sum_{i,j;nn} a_i^\dagger a_j = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \underbrace{\sum_j e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{R}_j}}_{=N\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} \left(\sum_{\mathbf{d}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{d}} \right) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} = \nu \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \quad (3.14b)$$

Donde $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\nu} \sum_{\mathbf{d}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{d}}$ con $\mathbf{d} \equiv \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$ siendo el vector que une el átomo j con sus primeros vecinos. Finalmente se obtiene el hamiltoniano aproximado, que describe las ondas de espín en medios ferromagnéticos, junto con la relación de dispersión:

²Se usa que $\sum_{i,j;nn} [a_i^\dagger a_j + a_i a_j^\dagger] = \sum_{i,j;nn} [a_i^\dagger a_j + \delta_{ij} + a_j^\dagger a_i] = 2 \sum_{i,j;nn} a_i^\dagger a_j$ pues $i \neq j$ en el sumatorio.

$$\hbar\omega(\mathbf{k}) = 2\mathcal{J}S\nu(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) + g_e\mu_B B_{ext} \quad (3.15)$$

$$\mathcal{H}_R = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega(\mathbf{k}) \cdot b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \quad (3.16)$$

Su forma es la deseada, confirma que las excitaciones de ondas de espín pueden ser tratadas como cuasipartículas bosónicas, de la misma manera que se hace con los fotones o los fonones.

4. Interacción dipolar magnón-espín. Descripción del modelo.

En la sección anterior se ha proporcionado una forma de interpretar las ondas de espín como cuasipartículas a partir de la reexpresión del hamiltoniano en (3.5): los magnones. En esta se va a proceder a la construcción del modelo de interacción entre dichas cuasipartículas y un espín o qubit adyacente. Este último estará descrito por el momento angular total \vec{J} de un átomo situado en una posición \vec{r} , a cierta distancia del conjunto de espines (ver figuras 4 a la izquierda y 6 a la izquierda para visualizar esta construcción para dos geometrías diferentes) descrito por tal hamiltoniano magnónico, con el que se acoplará mediante la interacción dipolar magnética. De esta forma, el medio ferromagnético actuará como un reservorio de energía acoplado al qubit; la excitación o desexcitación de este estará ligada a la emisión o absorción de un magnón.

Las hipótesis de partida en las que se basa el modelo son:

1. Se asume que todos los momentos magnéticos considerados están localizados espacialmente.
2. En cuanto a los átomos del material ferromagnético, su momento angular orbital se considera nulo; únicamente se tiene en cuenta el espín electrónico S .
3. Para dar validez al hamiltoniano en (3.16), se supondrá que la temperatura a la que está sometida el sistema es lo suficientemente baja (régimen de baja energía).

Teniendo en cuenta que el hamiltoniano individual del qubit, con factor de Landé $g_J \neq g_e$, viene descrito por $\mathcal{H}_{Z0} = -\vec{\mu}\vec{B}_{ext} = -g_J\mu_B B_{ext}J^z$ para $\vec{B}_{ext} = -B_{ext}\hat{z}$, escribimos el hamiltoniano general del modelo definiendo $\vec{d}_j = \vec{r} - \vec{r}_j$, siendo $\vec{r}_j = (x_j, y_j, z_j)$ el vector posición de cada uno de los espines localizados del medio ferromagnético:

$$\mathcal{H}_{d-d} = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_j \frac{\vec{\mu}\vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}\hat{d}_j)(\vec{\mu}_j\hat{d}_j)}{d_j^3} = \frac{\mu_0 g_e g_J \mu_B^2}{4\pi} \sum_j \frac{d_j^2 \vec{J}\vec{S}_j - 3(\vec{J}\vec{d}_j)(\vec{S}_j\vec{d}_j)}{d_j^5} \quad (4.1)$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_R + \mathcal{H}_{Z0} + \mathcal{H}_{d-d} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega(\mathbf{k}) \cdot b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} - g_J\mu_B B_{ext}J^z + \frac{\mu_0 g_e g_J \mu_B^2}{4\pi} \sum_j \frac{d_j^2 \vec{J}\vec{S}_j - 3(\vec{J}\vec{d}_j)(\vec{S}_j\vec{d}_j)}{d_j^5} \quad (4.2)$$

La principal tarea ahora será reescribir \mathcal{H}_{d-d} en función de los operadores $b_{\mathbf{k}}$, $b_{\mathbf{k}}^\dagger$, J^\pm y J^z teniendo en cuenta dos distribuciones espaciales de los espines ferromagnéticos: la unidimensional y la bidimensional. El método de obtención de esta versión del hamiltoniano para cualquier disposición de los átomos ferromagnéticos queda descrito en el apéndice A. El resultado, como en él se detalla, es:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{d-d}} = & \sum_{\mathbf{k}} \left(\Lambda_{+-}(\mathbf{k}) J^+ b_{\mathbf{k}}^\dagger + \text{h.c.} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \left(\Lambda_{++}(\mathbf{k}) J^- b_{\mathbf{k}}^\dagger + \text{h.c.} \right) + \\
& + \sqrt{2S} J^z \left(\sum_{\mathbf{k}} \Lambda_+(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^\dagger + \text{h.c.} \right) - \left(J^- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{\lambda}_+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \text{h.c.} \right) - J^z \left(\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{\lambda}_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \text{h.c.} \right) \\
& + \left(J^+ S \sum_j \lambda_+(j) + \text{h.c.} \right) + J^z S \sum_j \lambda_0(j) \quad (4.3)
\end{aligned}$$

Donde:

$$\lambda_{+-}(j) = -\frac{\mu_0 g_e g_J \mu_B^2 \sqrt{2S}}{16\pi} \cdot \left[\frac{1}{d_j^3} - \frac{3(z-z_j)^2}{d_j^5} \right] \quad (4.4a)$$

$$\lambda_{++}(j) = -\frac{3\mu_0 g_e g_J \mu_B^2 \sqrt{2S}}{16\pi} \cdot \frac{((x-x_j) + i(y-y_j))^2}{d_j^5} \quad (4.4b)$$

$$\lambda_+(j) = -\frac{3\mu_0 g_e g_J \mu_B^2}{8\pi} \cdot \frac{(z-z_j)((x-x_j) + i(y-y_j))}{d_j^5} \quad (4.4c)$$

$$\lambda_0(j) = \frac{\mu_0 g_e g_J \mu_B^2}{4\pi} \left[\frac{1}{d_j^3} - \frac{3(z-z_j)^2}{d_j^5} \right] \quad (4.4d)$$

$$\Lambda_{+-}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \lambda_{+-}(j) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \quad (4.5a)$$

$$\Lambda_{++}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \lambda_{+-}(j) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}; \quad \Lambda_+(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \lambda_+(j) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \quad (4.5b)$$

$$\tilde{\lambda}_+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{N} \sum_j \lambda_+(j) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_j}; \quad \tilde{\lambda}_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{N} \sum_j \lambda_0(j) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_j} \quad (4.5c)$$

Los términos $\lambda_{++}(j)$, $\lambda_{+-}(j)$, $\lambda_+(j)$ y $\lambda_0(j)$ en (4.4) definen las funciones de acoplo entre el spin j -ésimo de la cadena y el spin \vec{J} para los diferentes modos de acoplo mostrados. Mientras tanto, los términos $\Lambda_{++}(\mathbf{k})$, $\Lambda_{+-}(\mathbf{k})$ y $\Lambda_+(\mathbf{k})$ informan sobre la intensidad del acoplo entre el qubit y el modo magnónico \mathbf{k} . Por otro lado, resulta interesante interpretar los elementos en (4.5c) como los acoplos entre diferentes modos magnónicos \mathbf{k} y \mathbf{k}' . Así mismo, cabe destacar que la notación de estas funciones de acoplo, tanto en (4.4) como en (4.5), está elegida a conciencia. Los subíndices escogidos describen lo que varía la acción de cada término el número total de excitaciones en el sistema, algo que será explicado fehacientemente en la siguiente subsección.

4.1. Aproximación de onda rotante (RWA)

Al igual que lo es en la óptica cuántica, la emisión espontánea va a ser uno de los elementos fundamentales de este trabajo, pues proporciona información de la intensidad del acoplo entre el qubit y el reservorio a través de la evolución temporal de los autoestados del hamiltoniano sin perturbar. En la sección 5 se tratará de estimar esta emisión espontánea, que es al fin y al cabo la probabilidad de excitación y desexcitación del qubit a través del acoplo entre este y el reservorio magnónico. Para llevar esto a cabo, se considerará únicamente el término de interacción que conserva el número de excitaciones y altera los autoestados del hamiltoniano a primer orden de perturbaciones. Es decir, el que va con la función de acoplo $\Lambda_{+-}(\mathbf{k})$.

Esta es la llamada aproximación de onda rotante (RWA por sus siglas en inglés). En las siguientes líneas se va a tratar de justificar esta aproximación, tomando una versión simplificada del modelo para explicar los conceptos en los que se basa.

Para comenzar, uno ha de fijarse en los posibles niveles energéticos del qubit. Según \mathcal{H}_{Z0} en (4.2), el estado fundamental será $|J, m_J = J\rangle$, y el de mayor energía será $|J, m_J = -J\rangle$. Para simplificar la notación de los autoestados de \mathcal{H}_{Z0} trataremos que esta haga referencia al nivel en el que se encuentra el qubit: $|0\rangle$ para el estado fundamental y $|2J\rangle$ para el estado de máxima energía. Esto se logra al definir el operador "nivel del qubit" Ξ^z y cambiando de base de los autoestados de $|J, m_J\rangle$ a los de $|J, \xi\rangle$, siendo $\xi = J - m_J$ los autovalores de Ξ^z . Este cambio de base, representado en la figura 2, no es más que una reordenación para ajustar la notación a una mejor descripción del problema.

$$\Xi^z := J \cdot \mathbb{I} - J^z; \quad |J, m_J\rangle = |J, \xi = J - m_J\rangle \quad (4.6)$$

Vista esta relación, vemos que será equivalente manejar Ξ^z y J^z . También definimos Ξ^\pm como:

$$\Xi^\pm = J^\mp \quad (4.7)$$

De hecho, con esto terminan de quedar claros los subíndices utilizados en (4.4) y (4.5): estos se refieren al número de excitaciones que crea o destruye cada término. Teniendo esto en cuenta y puesto que tanto los niveles de energía del qubit como el número de magnones en la cadena ferromagnética están cuantizados, definimos el observable que determina el número de excitaciones totales Ω del sistema

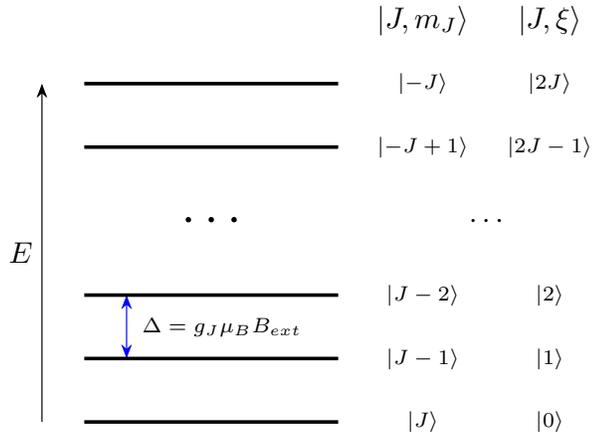


Figura 2: esquema explicativo del cambio de notación. Se pasa de usar J^z al nuevo operador "nivel del qubit".

como la suma del operador "número de magnones" y el operador "nivel del qubit":

$$\tilde{\Omega} = \sum_k b_k^\dagger b_k + \Xi^z \quad (4.8)$$

Recuperando (4.2), se reescribe el hamiltoniano teniendo en cuenta que las energías asociadas a \mathcal{H}_{Z0} y \mathcal{H}_R son varios órdenes de magnitud mayores que las correspondientes a la interacción dipolar. Es decir, \mathcal{H}_{d-d} puede tomarse como una perturbación del hamiltoniano sin interacción, tal que:

$$\mathcal{H} = \underbrace{\mathcal{H}_R + \mathcal{H}_{Z0}}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\mathcal{H}_{d-d}}_{\delta\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H} \quad (4.9)$$

Puede comprobarse también de (4.2) que $[\mathcal{H}_0, \tilde{\Omega}] = 0$, es decir, el hamiltoniano sin perturbación conserva el número de excitaciones. No obstante, $[\delta\mathcal{H}, \tilde{\Omega}] \neq 0$. Para reanudar la argumentación, supóngase que el reservorio magnónico tiene un único modo de excitación ω_0 tal que $\hbar\omega_0 = \Delta = gJ\mu_B B_{ext}$ (realmente este es el modo que más nos interesa, siempre que podamos fijar el valor de Δ dentro de la banda de energías magnónicas $\hbar\omega(k)$). Escribimos \mathcal{H}_0 y $\delta\mathcal{H}$ incorporando el observable Ξ^z . Salvando los múltiplos del operador, quedan:

$$\mathcal{H}_0 = \hbar\omega_0 b^\dagger b + \Delta \cdot \Xi^z \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{H} &= \left(\Lambda_{+-} b^\dagger \Xi^- + \text{h.c.} \right) + \left(\Lambda_{++} b^\dagger \Xi^+ + \text{h.c.} \right) + \sqrt{2S} J^z \left(\Lambda_+ b^\dagger + \text{h.c.} \right) + \\ &- \left(\Xi^- \tilde{\lambda}_+ b^\dagger b + \text{h.c.} \right) - J^z \left(\tilde{\lambda}_0 b^\dagger b + \text{h.c.} \right) + \left(\Xi^- S \sum_j \lambda_+(j) + \text{h.c.} \right) + J^z S \sum_j \lambda_0(j) = \\ &= \delta\mathcal{H}_1 + \delta\mathcal{H}_2 + \delta\mathcal{H}_3 + \delta\mathcal{H}_4 + \delta\mathcal{H}_5 + \delta\mathcal{H}_6 + \delta\mathcal{H}_7 \quad (4.11) \end{aligned}$$

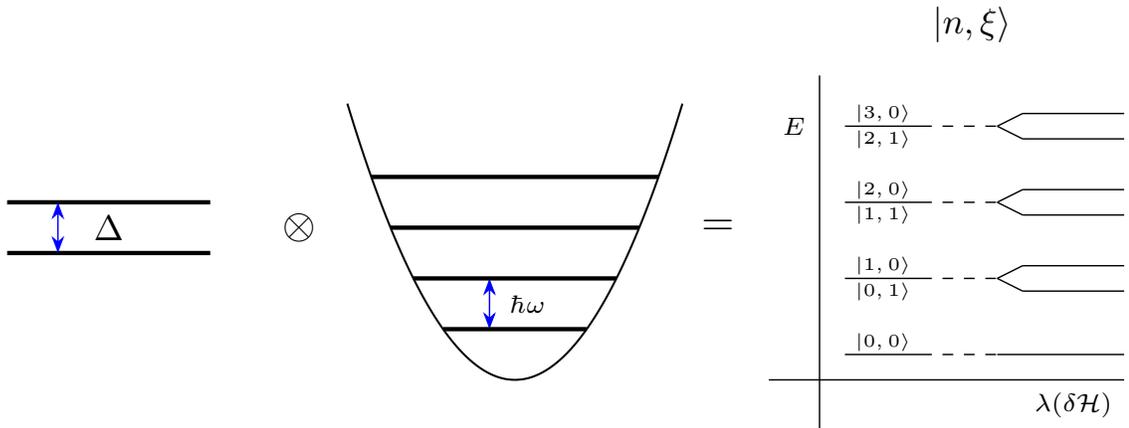


Figura 3: esquema explicativo del modelo de acoplo simplificado para justificar la aproximación de onda rotante. Se describen los niveles de energía del sistema del qubit (factor izquierdo) y del modo magnónico (factor derecho) desacoplados, y la ruptura de su degeneración por efecto del acoplo.

Escribiendo los autoestados de \mathcal{H}_0 , $|n, \xi\rangle$, se descubre que, salvo el fundamental, los niveles de energía están doblemente degenerados, y además estos subespacios de degeneración coinciden con los subespacios de número de excitaciones $\Omega = n + \xi = \text{cte}$:

$$|n, \xi\rangle; \quad E_{n,\xi}^{(0)} = \langle n, \xi | \mathcal{H}_0 | n, \xi \rangle = n\hbar\omega_0 + \Delta \cdot \xi = \Delta \cdot (n + \xi) \quad (4.12)$$

Para describir como interviene la interacción dipolar en el desdoblamiento de estos niveles, el cual se describe en la figura 3, y distinguir qué términos en (4.3) serán realmente relevantes, se tomará aquí $J = 1/2$ (como en dicha figura) a modo de simplificación. Y para calcular el efecto de la interacción dipolar, se aplica teoría de perturbaciones en cada uno de los subespacios (con $\Omega \neq 0$), tal que la corrección de las energías son los autovalores de la matriz:

$$A_\Omega = \sum_{i=1}^7 \begin{pmatrix} \langle \Omega, 0 | \delta\mathcal{H}_i | \Omega, 0 \rangle & \langle \Omega, 0 | \delta\mathcal{H}_i | \Omega - 1, 1 \rangle \\ \langle \Omega - 1, 1 | \delta\mathcal{H}_i | \Omega, 0 \rangle & \langle \Omega - 1, 1 | \delta\mathcal{H}_i | \Omega - 1, 1 \rangle \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^7 A_{\Omega,i} \quad (4.13)$$

Para concluir, puede verse fácilmente que de las siete componentes de $\delta\mathcal{H}$, sólo $\delta\mathcal{H}_1$, $\delta\mathcal{H}_5$ y $\delta\mathcal{H}_7$ contribuyen en las correcciones a primer orden. Esto se debe a que para $i = 2, 3, 4$ y 6 , $\delta\mathcal{H}_i$ aumenta o disminuye en una unidad el número de excitaciones Ω . Es decir, la función de ondas $\delta\mathcal{H}_i | n, \xi\rangle$ no pertenece al subespacio con número de excitaciones $\Omega = n + \xi$. De esta manera:

$$\begin{aligned} A_\Omega &= A_{\Omega,1} + A_{\Omega,5} + A_{\Omega,7} = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\Omega}\Lambda_{+-} \\ \sqrt{\Omega}\bar{\Lambda}_{+-} & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\Omega & 0 \\ 0 & \Omega - 1 \end{pmatrix} + \frac{S}{2} \begin{pmatrix} \sum_j \lambda_0(j) & 0 \\ 0 & -\sum_j \lambda_0(j) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.14)$$

Las contribuciones de $\delta\mathcal{H}_5$ y $\delta\mathcal{H}_7$ a primer orden de teoría de perturbaciones son diagonales. Esto se debe a que los autoestados $|n, \xi\rangle$ de \mathcal{H}_0 también son autoestados de estas componentes de la perturbación. Por consiguiente, aunque su presencia alterará los valores propios del hamiltoniano total, estas dos componentes por sí solas no modificarán los autoestados de \mathcal{H}_0 a primer orden, luego no afectarán a su evolución temporal, que es lo que nos va a interesar estudiar en la sección 5. Para aclarar esto, supóngase una función de onda $|\psi(t)\rangle = \sum_{n,\xi} c_{n,\xi}(t) |n, \xi\rangle$ cuya situación a $t = 0$ es un autoestado de \mathcal{H}_0 : $|\psi(0)\rangle = |n_0, \xi_0\rangle$. Aplicamos la ecuación de Schrödinger con $\mathcal{H}'_0 = \mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H}_5 + \delta\mathcal{H}_7$ para ver que este estado no evoluciona en el tiempo:

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = \mathcal{H}'_0 |\psi\rangle = \sum_{n,\xi} c_{n,\xi}(t) E'_{n,\xi} |n, \xi\rangle \implies |\psi(t)\rangle = e^{-itE'_{n_0,\xi_0}/\hbar} |n_0, \xi_0\rangle \equiv |n_0, \xi_0\rangle \quad (4.15)$$

De esta manera, queda justificado que aunque $\delta\mathcal{H}_5$ y $\delta\mathcal{H}_7$ alterarán los niveles de energía, no afectarán a la dinámica de los autoestados, a diferencia de $\delta\mathcal{H}_1$. Aunque lo correspondiente a partir de aquí sería tomar como hamiltoniano sin perturbar $\mathcal{H}'_0 = \mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H}_5 + \delta\mathcal{H}_7$, la contribución de las dos componentes perturbativas diagonales es varios órdenes de magnitud menor que la correspondiente a \mathcal{H}_0 . Consecuentemente, se seguirá tomando este hamiltoniano sin perturbación, como se había venido haciendo hasta ahora.

4.2. Caso unidimensional

En esta subsección se van a particularizar los resultados obtenidos al comienzo de la sección 4 cuando los N espines se disponen formando una cadena lineal con parámetro de red a . Se toma N impar, $N = 2 \cdot M + 1$, y se define el dominio de sumación en (4.2) como $j = -M, -M + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, M$. Esto no ha de tener repercusión en el caso de interés, en el que N tiende a infinito. Por otro lado, se debe recalcular $\gamma_{\mathbf{k}} \equiv \gamma_k$ a partir de su definición:³

$$d = \pm a \implies \gamma_k = \frac{1}{2} \left(e^{ika} + e^{-ika} \right) = \cos ka \quad (4.16)$$

Además, siendo ahora $\nu = 2$ el número de primeros vecinos, la relación de dispersión, representada en la figura 4 a la derecha, queda:

$$\hbar\omega(k) = 4\mathcal{J}S(1 - \cos ka) + g_e\mu_B B_{ext} \quad (4.17)$$

Como ya se comentón en la sección 3, el campo magnético suma un término extra sobre la relación de dispersión habitual [1].

Por último, las condiciones de contorno periódicas de Born-von Karman en una red de Bravais unidimensional dan la discretización de k :

$$k = \frac{2\pi n}{Na}; \quad n \in \mathbb{Z} \quad (4.18)$$

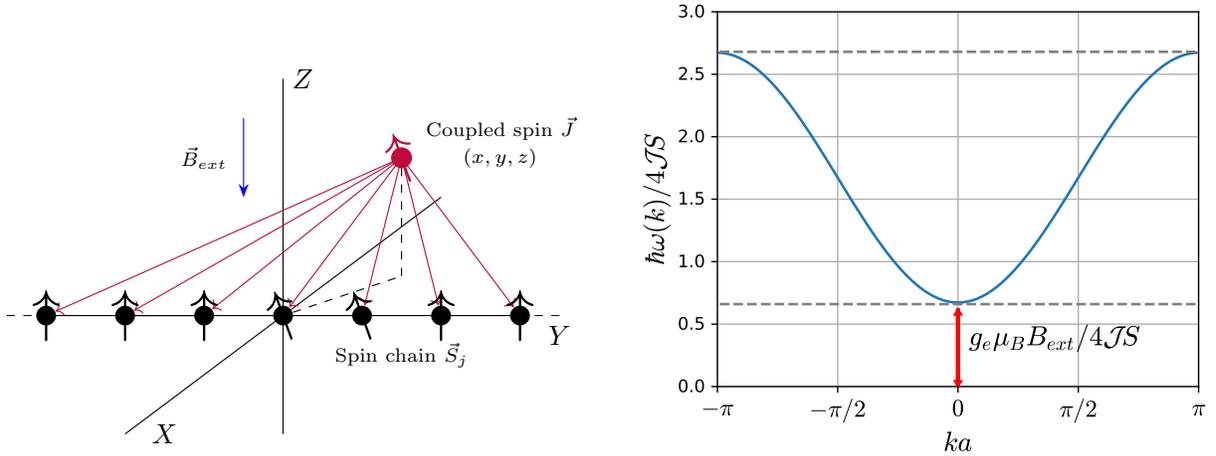


Figura 4: a la izquierda, esquema del modelo de reservorio unidimensional visto en tres dimensiones. Se representa la orientación de la cadena a lo largo de todo el eje Y , la dirección y sentido del campo magnético externo y la localización del espín acoplado denotado por \vec{J} .

A la derecha, se representa en azul la relación de dispersión para el modelo unidimensional en la primera zona de Brillouin. En rojo, el desplazamiento vertical de esta banda de energías provocado por el campo magnético externo. En esta figura, $g_e\mu_B B_{ext}/4\mathcal{J}S \cong 2/3$.

³Ahora k no es un vector, es un número real que también puede tomar valores negativos.

Para la construcción del modelo unidimensional de acoplo entre un qubit y el reservorio magnónico, que es el caso principal estudiado en este trabajo, se sitúa la cadena a lo largo del eje Y , tal que $\vec{r}_j = (0, a \cdot j, 0)$, y se incorpora el nuevo ingrediente al sistema: un átomo que será denotado usando su momento angular total \vec{J} en la posición \vec{r} . Esta disposición queda esquematizada en la figura 4 a la izquierda.

Cabe destacar que si suponemos que la cadena es lo suficientemente extensa, los acoplos dependerán de la posición del qubit en el plano XZ , es decir, podremos simplificar las ecuaciones tomado $\vec{r} = (x, 0, z)$. Además de esto, ha de tenerse en cuenta la aproximación de onda rotante, cuya justificación se ha hecho en la subsección 4.1. Así, el hamiltoniano de interacción dipolar en (4.3) podrá ser reexpresado como:

$$\mathcal{H}_{d-d} = \sum_k \left(\Lambda_{+-}(k) \cdot \Xi^- b_k^\dagger + \text{h.c.} \right) \quad (4.19)$$

En este punto ya sólo queda estudiar el aspecto funcional de $\Lambda_{+-}(k)$, recordando que también depende de la posición \vec{r} del qubit. Además, conviene recordar el dominio de sumación finito que representa la cadena de $N = 2M + 1$ espines, tal y como fue introducido al comienzo de esta subsección. Para escribir $\Lambda_{+-}(k)$, se deben particularizar las expresiones (4.4a) y (4.5a) a la geometría de este modelo unidimensional. Se define para ello $\tilde{x} = x/a$, $\tilde{z} = z/a$ y $\mathcal{C} = -\mu_0 g_e g_J \mu_B^2 \sqrt{2S} / (16\pi a^3)$. La ecuación (4.4a) con $\vec{r} = (x, 0, z)$ y $\vec{r}_j = (0, a \cdot j, 0)$ queda:

$$\lambda_{+-}(j) = \mathcal{C} \cdot \frac{\tilde{x}^2 + j^2 - 2\tilde{z}^2}{(\tilde{x}^2 + \tilde{z}^2 + j^2)^{5/2}} \quad (4.20)$$

Y con (4.20) y (4.5a) se llega a demostrar que, para el dominio de sumación escogido, $\Lambda_{+-}(k)$ es real:

$$\begin{aligned} \Lambda_{+-}(k) &= \frac{\mathcal{C}}{\sqrt{N}} \sum_j \frac{\tilde{x}^2 + j^2 - 2\tilde{z}^2}{(\tilde{x}^2 + \tilde{z}^2 + j^2)^{5/2}} e^{ikaj} = \\ &= \frac{\mathcal{C}}{\sqrt{N}} \sum_j \frac{\tilde{x}^2 + j^2 - 2\tilde{z}^2}{(\tilde{x}^2 + \tilde{z}^2 + j^2)^{5/2}} \cos(kaj) + i \frac{\mathcal{C}}{\sqrt{N}} \sum_j \frac{\tilde{x}^2 + j^2 - 2\tilde{z}^2}{(\tilde{x}^2 + \tilde{z}^2 + j^2)^{5/2}} \sin(kaj) = \\ &= \frac{\mathcal{C}}{\sqrt{N}} \sum_{j=-M}^M \frac{\tilde{x}^2 + j^2 - 2\tilde{z}^2}{(\tilde{x}^2 + \tilde{z}^2 + j^2)^{5/2}} \cos(kaj) \equiv \mathcal{F}(\tilde{x}, \tilde{z}, k) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Donde se ha aplicado que la parte imaginaria se anula debido a que se suma una función impar en j sobre un dominio simétrico (la cadena se extiende de la misma forma en el semieje Y positivo y en el negativo), y que $N = 2M + 1$ es impar.

A continuación se va a tratar de visualizar cómo es la dependencia de estas funciones de acoplo con las tres variables, fijando primero algunos parámetros de los que esta depende. Las gráficas proporcionadas a continuación se han construido para los valores numéricos de la tabla 1. Además de darle un sentido dimensional a los resultados a presentar, estos parámetros van a permitir verificar el carácter perturbativo de la interacción dipolar, tal y como se asumió en la subsección 4.1 para justificar la RWA, representando el cociente adimensional $\Lambda_{+-}(k) / (4\mathcal{J}S + g_J \mu_B B_{ext}) = \Lambda_{+-}(k) / \hbar \omega_{1/2}$. Por

otro lado, es razonable esperar que $\Lambda_{+-}(k) \sim r^{-3}$ dada la dependencia de la interacción dipolar con la distancia. Por esta razón, se va a rotar la posición del qubit en torno al eje Y , tal que $x = r \cos \theta$ y $z = r \sin \theta$. De esta forma, se analiza en esta situación la forma de $\Lambda_{+-}(k)$ para diferentes valores de θ y también se dibuja $\max_k |\Lambda_{+-}(k)|$ en función de este ángulo para distintos valores de r . El resultado lo muestran las dos gráficas de la figura 5.

Parámetro	Valor
gJ	3
a	1 nm
S	1/2
B_{ext}	1 T
\mathcal{J}	$k_b \cdot 1 \text{ K} \equiv 8,617 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$

Cuadro 1: tabla de valores típicos para los parámetros gJ , a , S , B_{ext} y \mathcal{J} . Se han utilizado para construir las figuras 5 y 7.

Aunque la diferencia es pequeña, la gráfica derecha de la figura 5 respalda la elección de $\vec{r} = (0, 0, z)$ para los cálculos realizados en la sección 5, pues es en esta situación donde se obtiene el acoplo máximo. Por otro lado, la gráfica izquierda de la figura 5 verifica que para los parámetros de la tabla 1, la interacción dipolar puede ser considerada como una perturbación, pues:

$$\left| \frac{\Lambda_{+-}(k)\sqrt{N}}{\hbar\omega_{1/2}} \right| < 10^{-3} \quad (4.22)$$

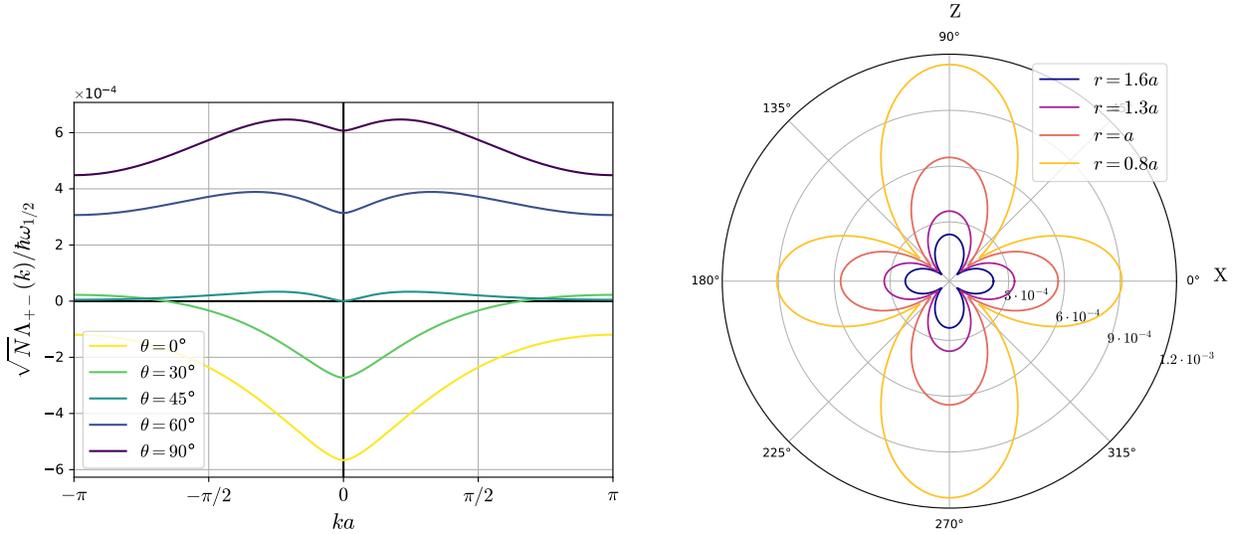


Figura 5: a la izquierda, representación de $\sqrt{N}\Lambda_{+-}(k)/\hbar\omega_{1/2}$ en la primera zona de Brillouin para $r = 1$ y desde $\theta = 0^\circ$ (sobre el eje X) hasta $\theta = 90^\circ$ (sobre el eje Z). $\hbar\omega_{1/2}$ es la energía magnónica correspondiente al centro de la relación de dispersión. Esta gráfica, obtenida para $N = 201$, informa de la magnitud relativa del acoplo.

A la derecha, representación de $\max_k (\sqrt{N}|\Lambda_{+-}(k)|/\Delta)$ frente a θ . De esta gráfica obtenemos que el acoplo máximo se obtiene situando el qubit sobre el eje Z , aunque la diferencia al situarlo sobre el eje X tiende a 0 al alejarlo de la cadena de espines. Por otro lado, el acoplo mínimo se obtiene en torno a las dos bisectrices. También se puede visualizar el decrecimiento de la intensidad de interacción con r . Gráfica obtenida para $N = 201$.

Cabe destacar que se elimina la dependencia de $\Lambda_{+-}(k)$ con \sqrt{N} pues el número de espines en la cadena no ha de inferir en el acoplo total, como se verá en la sección 5 al estimar la emisión

espontánea, en la que se pasará al continuo en k tomando el límite $N \rightarrow \infty$.

Por otro lado, también es de interés conocer la magnitud absoluta del acoplo, tomando los parámetros de la tabla 1: mientras que las energías de los magnones están entre $1,16 \cdot 10^{-4}$ y $4,61 \cdot 10^{-4}$ eV, la energía correspondiente al acoplo dipolar del qubit a una distancia igual al parámetro de red (1 nm) no supera los $3 \cdot 10^{-7}$ eV.

4.3. Condición de resonancia

En la sección 5 también se verá que la transición del qubit a un nivel de energía inferior estará ligada a la excitación de un magnón en la cadena lineal de energía $\hbar\omega = \Delta$, siendo Δ la diferencia energética entre dos niveles sucesivos. Esta es la condición de resonancia, y es fundamental en el modelo de acoplo por razones obvias: Δ debe corresponder a una energía de la banda $\hbar\omega(k)$ para que la probabilidad de transición sea considerable, como se verá más adelante.

En esta subsección se van a tratar de justificar los casos en los que se tiene esta condición de resonancia en función de los parámetros que regulan el hamiltoniano del qubit. Esta justificación se hará para $\mathcal{H}_{Z0} = -g_J\mu_B B_{ext} J^z$, tal y como tomamos al comienzo de esta sección 4 en la ecuación (4.2). Así mismo, se destaca la existencia de otros modelos hamiltonianos para describir los niveles energéticos del qubit. Un ejemplo de ellos es el hamiltoniano de Zeeman con término de anisotropía, el cual se explica en el apéndice B en base a las referencias [8, sección 4.1.1.].

El hamiltoniano \mathcal{H}_{Z0} modeliza el qubit considerando únicamente su momento angular total \vec{J} . En ausencia de campo externo, no habrá niveles de energía y los autoestados $|J, m_J\rangle$ estarán degenerados. La presencia del campo rompe esta degeneración y da lugar a $2J + 1$ niveles equiespaciados en energía. Definimos pues la diferencia energética entre niveles adyacentes como:

$$\Delta = g_J\mu_B B_{ext} \quad (4.23)$$

Si consideramos el modelo ferromagnético unidimensional, tomemos la relación de dispersión en (4.17). Entonces, tendremos la condición de resonancia si y sólo si:

$$\Delta = \hbar\omega(k) \iff g_J\mu_B B_{ext} \in (g_e\mu_B B_{ext}, g_e\mu_B B_{ext} + 8\mathcal{J}S) \iff g_e < g_J < g_e + \frac{8\mathcal{J}S}{\mu_B B_{ext}} \quad (4.24)$$

Ahora se entiende la razón de tomar el momento angular total en \mathcal{H}_{Z0} y no despreciar la contribución orbital para quedarse únicamente con el espín, como se hizo para los átomos de la cadena: para este modelo, es necesario que el factor de Landé correspondiente al momento magnético del qubit sea diferente al del electrón.

El teorema de Wigner-Eckart y el de la proyección [5, complemento D10] permiten determinar teóricamente el valor del factor de Landé en función de J y del espín y momento angular orbital del qubit, denotados aquí por l y s para distinguirlos de los correspondientes a los átomos del medio ferromagnético. El resultado, tomando $g_e \simeq 2$, es [5]:

$$g_J = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2J(J+1)} = 2 - \frac{\langle \vec{J} \cdot \vec{l} \rangle}{\langle J^2 \rangle} \quad (4.25)$$

Con (4.25), la doble desigualdad de (4.24) queda:

$$-\frac{8\mathcal{J}S}{\mu_B B_{ext}} < \frac{\langle \vec{J} \cdot \vec{l} \rangle}{\langle J^2 \rangle} = \frac{J(J+1) + l(l+1) - s(s+1)}{2J(J+1)} < 0 \quad (4.26)$$

- La primera desigualdad dice que no se obtendrá la condición de resonancia si la banda de energías magnónicas está muy desplazada en el eje vertical, es decir, si $8\mathcal{J}S \ll \mu_B B_{ext}$. Si por el contrario el campo es pequeño en relación a la integral de intercambio, $\mu_B B_{ext} \ll 8\mathcal{J}S$, esta se cumplirá trivialmente y bastará con fijarse en la segunda.
- Esta segunda desigualdad dice que para alcanzar la condición de resonancia, ha de cumplirse que $\langle \vec{J} \cdot \vec{l} \rangle < 0$, lo que puede ser interpretado como que el momento angular orbital y el total son antiparalelos. Matemáticamente, podemos reescribir y desarrollar esta desigualdad estricta:

$$s(s+1) > J(J+1) + l(l+1) \geq l(l+1) \implies s > l > 0 \quad (4.27)$$

Desde luego, si $l = 0$, $s = J$ y tenemos la igualdad. Por otra parte, sabemos que $J \geq J_{min} = s - l$, luego podemos desarrollar (4.27) para encontrar el rango de posibles valores de J en función de s y l . Todas estas condiciones, que permiten la resonancia, quedan resumidas en:

$$\left\{ \begin{array}{l} s > l > 0 \\ s - l \leq J \leq J_{lim} = \left\lfloor \sqrt{1/4 + (s-l)(s+l+1)} - 1/2 \right\rfloor \end{array} \right. \quad (4.28)$$

4.4. Caso bidimensional

Extendemos ahora el problema a un caso más general, en el que N^2 spines se disponen formando una red rectangular en el plano XY, cuya superficie será supuesta finita pero lo suficientemente extensa. En cuanto al campo magnético, se seguirá tomando en el sentido negativo del eje Z. Los cambios que esta extensión originará en el tratamiento previo tendrán repercusión en los índices de sumación. En este sentido, la nomenclatura será la siguiente, suponiendo parámetros de red a en X y b en Y:

$$\vec{r}_j = (x_j, y_j, 0) = (a \cdot j_x, b \cdot j_y, 0); \quad j_x, j_y \in \mathbb{Z} \quad (4.29)$$

Esta última ecuación define la red de Bravias rectangular, que a su vez permite recalculer la relación de dispersión de los magnones a partir de lo visto en la sección 3. El resultado, ya representado en la figura 6 a la derecha, es:

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\nu} \sum_{\mathbf{d}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{d}} = \frac{1}{4} \left(e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y b} + e^{-ik_y b} \right) = \frac{1}{2} (\cos(k_x a) + \cos(k_y b)) \quad (4.30)$$

$$\hbar\omega(\mathbf{k}) = 2JS\nu(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) + g\mu_B B_{ext} = 4JS(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y b)) + g\mu_B B_{ext} \quad (4.31)$$

Por otro lado, las condiciones de contorno periódicas de Born - Von Karman en este problema bidimensional nos dan, para $n, m \in \mathbb{Z}$:

$$\vec{k} = 2\pi \left(\frac{n}{Na} \hat{x} + \frac{m}{Nb} \hat{y} \right) \quad (4.32)$$

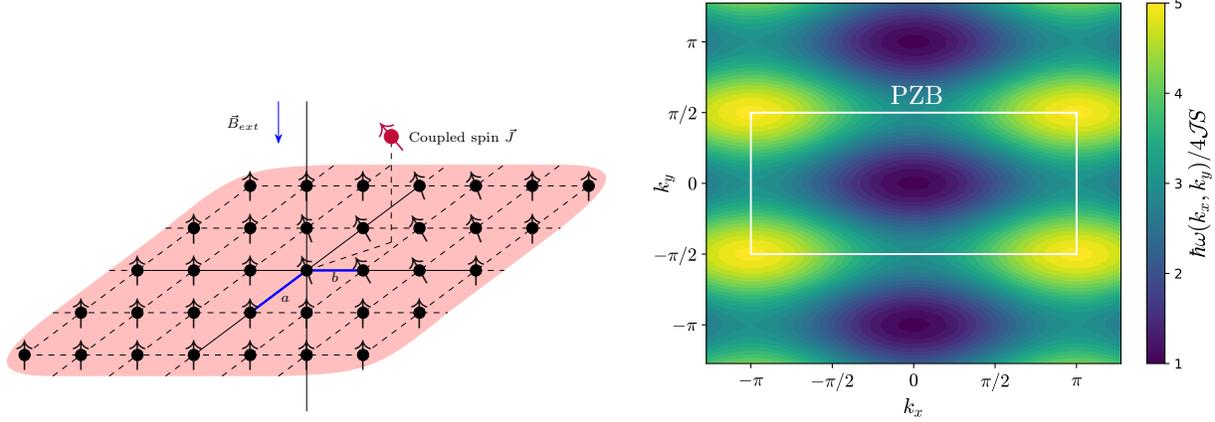


Figura 6: a la izquierda, esquema del modelo bidimensional visto en tres dimensiones. Se representa la disposición de los espines ferromagnéticos en el plano XY , la dirección y sentido del campo externo y la localización del espín acoplado denotado por \vec{J} .

A la derecha, representación adimensionalizada de la relación de dispersión $\hbar\omega(k_x, k_y)$ para el modelo bidimensional. Para construir esta gráfica, se ha tomado $a = 1$ y $b = 2$ (en unidades arbitrarias). Se observa que el mínimo de esta función no es nulo debido a la presencia de campo magnético externo, habiéndose tomado $g_e\mu_B B_{ext}/4JS = 1$. En blanco se remarca la primera zona de Brillouin.

Para particularizar el hamiltoniano a este caso bidimensional, bastará con tener en cuenta que ahora los índices que representan a cada uno de ellos actúan en realidad como los vectores $\vec{j} = (j_x, j_y)$. Además, es evidente que si asumimos que la superficie del plano tiende al infinito (con N^2 lo suficientemente grande), la simetría del sistema hará que el acoplo total entre \vec{J} y el plano ferromagnético sólo dependa de z , luego podremos tomar $\vec{r} = (0, 0, z)$. Así:

$$\vec{d}_j = \sqrt{(x - x_j)^2 + (y - y_j)^2 + z^2} = \sqrt{a^2 j_x^2 + b^2 j_y^2 + z^2} \quad (4.33)$$

Nos centramos en el hamiltoniano de interacción dipolar \mathcal{H}_{d-d} una vez se ha aplicado sobre él la RWA. De esta forma, queda:

$$\mathcal{H}_{d-d} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\Lambda_{+-}(\mathbf{k}) \cdot \Xi^- b_{\mathbf{k}}^\dagger + \text{h.c.} \right) \quad (4.34)$$

Escribimos también (4.4a) y (4.5a), particularizando a dos dimensiones:

$$\lambda_{+-}(\mathbf{j}) = -\frac{\mu_0 g_e g_J \mu_B^2 \sqrt{2S}}{16\pi} \cdot \left[\frac{1}{d_j^3} - \frac{3z^2}{d_j^5} \right] \quad (4.35)$$

$$\Lambda_{+-}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{j_x, j_y} \lambda_{+-}(\mathbf{j}) e^{ik_x a j_x} e^{ik_y b j_y} \quad (4.36)$$

En la siguiente figura 7 se representa $\Lambda_{+-}(k_x, k_y)$, función que puede verse que es real aplicando argumentos similares a los considerados en (4.21):

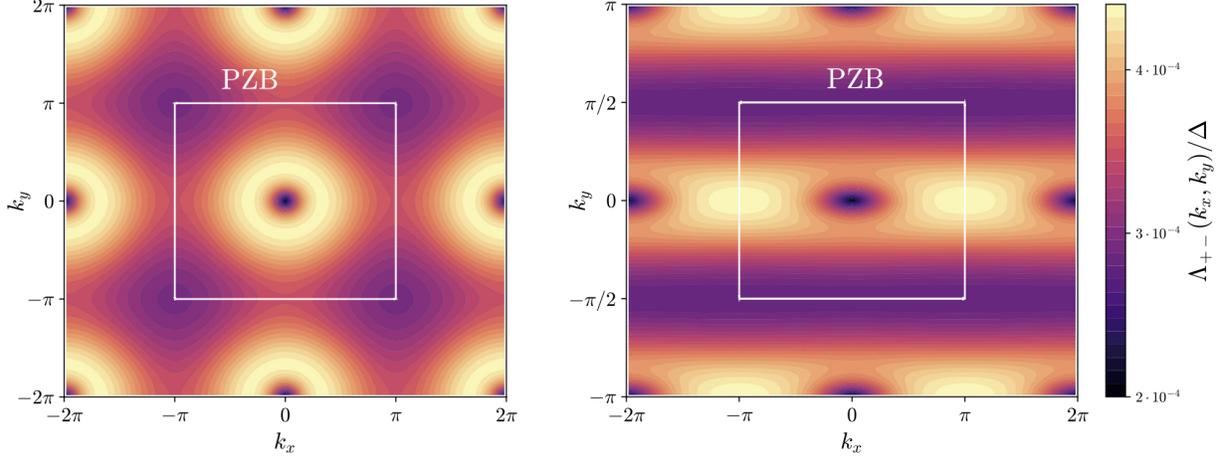


Figura 7: mapas de color que representan el acoplo dipolar entre el qubit en $\vec{r} = (0, 0, z = 1 \text{ nm})$ y el modo magnónico con vector de ondas $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ en unidades de los parámetros de red, obtenidos para $N^2 = 101^2$. La gráfica de la izquierda corresponde a una red cuadrada ($a = b = 1 \text{ nm}$) y la de la derecha a una red rectangular ($a = 1 \text{ nm}$, $b = 2 \text{ nm}$). Cabe destacar el desplazamiento del vector con máximo acoplo en la primera zona de Brillouin al tomar la red rectangular en lugar de la cuadrada.

5. Emisión espontánea

En esta sección se va a tratar de estimar el ritmo de cambio de la probabilidad de excitación y desexcitación entre los dos niveles de menor energía del qubit acoplado a la cadena lineal de espines. Se partirá del hamiltoniano simplificado, una vez se ha aplicado la RWA, que consta de la componente desacoplada y de otra que será la perturbación. Adaptamos (4.2) a la notación que aquí vamos a utilizar, con los operadores de estado del qubit definidos en la subsección 4.1. Salvo términos constantes, queda:

$$\mathcal{H} = \underbrace{\Delta \Xi^z + \sum_k \hbar \omega(k) \cdot b_k^\dagger b_k}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\sum_k \Lambda_{+-}(k) \left(\Xi^- b_k^\dagger + \Xi^+ b_k \right)}_{\delta \mathcal{H}} \quad (5.1)$$

Donde $\Delta = gJ\mu_B B_{ext}$ es el espaciado energético de los dos primeros niveles del qubit. Considerando el operador $\tilde{\Omega}$, tal y como se definió en (4.8), puede verse (consúltase apéndice C.1) que $[\mathcal{H}, \tilde{\Omega}] = [\mathcal{H}_0, \tilde{\Omega}] + [\delta \mathcal{H}, \tilde{\Omega}] = 0$. Es decir, que el observable $\tilde{\Omega}$, que determina el número de excitaciones (el número de magnones excitados sumado al nivel energético del qubit), es una constante del movimiento. Con esto en mente, se parte de un estado inicial genérico perteneciente al subespacio

de funciones de onda con número de interacciones total igual a 1.

$$|\Psi(t)\rangle = c(t) |\uparrow\rangle \otimes |\mathbf{0}\rangle + \sum_k \varphi_k(t) |\downarrow\rangle \otimes b_k^\dagger |\mathbf{0}\rangle \quad (5.2)$$

- $c(t)$ es la amplitud de probabilidad de tener la cadena en el estado fundamental y el qubit en el primer nivel excitado ($\xi = 1$), es decir, en el estado denotado por $|\uparrow\rangle$.
- $\varphi_k(t)$ es la amplitud de probabilidad de excitación del modo de momento k de la cadena, y el qubit en el estado fundamental, denotado como $|\downarrow\rangle$.
- $|\mathbf{0}\rangle$ es el estado fundamental de la cadena, en el que no hay excitaciones magnónicas. Los estados correspondientes a la presencia de un único magnón de momento k se escriben como $b_k^\dagger |\mathbf{0}\rangle$.
- Suponemos condiciones iniciales:

$$c(0) = 1; \quad \varphi_k(0) = 0 \quad \forall k \quad (5.3)$$

En general, la herramienta fundamental para llevar a cabo el cometido de esta sección es la regla de oro de Fermi (FGR por sus siglas en inglés). Esta regla permite estimar la probabilidad de desexcitación $P_{des}(t) = |c(t)|^2$ del sistema a primer orden de perturbaciones. No obstante, el hamiltoniano en (5.1) guarda cierta relación con el del modelo de Jaynes-Cummings [10], salvo que en este se tiene un único modo de excitación ω , mientras que el modelo aquí presentado tiene tantos como espines hay en la cadena, y esta cantidad se hace tender a infinito. Por este motivo, en la subsección 5.2 se irá más allá de la FGR estudiando la dinámica de las funciones de onda del subespacio de una única excitación ($\Omega = 1$) y aplicando la teoría de Wigner-Weisskopf para la emisión espontánea y así obtener una mejor estimación de $P_{des}(t)$. No obstante, también se verá que esta teoría solo es aplicable cuando Δ cumple ciertas condiciones con respecto a la banda de energías magnónicas (la llamada aproximación markoviana). Por ello, en el apartado 5.2.2 se pasará a resolver numéricamente el valor de $|c(t)|^2$ a partir de la propia ecuación de Schrödinger para completar la descripción de la dinámica.

5.1. Regla de oro de Fermi

La regla de oro de Fermi es uno de los resultados de la mecánica cuántica más usados para realizar esta clase de estimaciones. Esta procede del uso de teoría de perturbaciones a primer orden de aproximación. Para aplicar tal teoría, hemos de considerar el estado inicial del sistema $|\Psi_i\rangle = |\Psi(0)\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\mathbf{0}\rangle$, con $E_i = \langle \Psi_i | \mathcal{H}_0 | \Psi_i \rangle = \Delta$. Se desea estimar la probabilidad de transición $P_{des}(t)$ entre este y otro estado $|\Psi_f\rangle$ para todo instante de tiempo t . Ahora bien, ¿qué estados finales son los que interesan? La respuesta a esta pregunta la da el conmutador $[\mathcal{H}, \Omega]$, el cual sabemos que es nulo (ver apéndice C.1). Por consiguiente, el número de excitaciones se conserva y sólo han de considerarse las funciones de onda que componen la base del subespacio $\{\Omega = 1\} = \{|\Psi\rangle; \langle \Psi | \Omega | \Psi \rangle = 1\}$. Siendo $|\mathbf{0}\rangle$ la función de onda que representa el estado fundamental de la cadena ferromagnética,

escribimos todos los autoestados de este subespacio diferentes de $|\Psi_i\rangle$ como:

$$|\Psi_k\rangle = |\downarrow\rangle \otimes b_k^\dagger |\mathbf{0}\rangle; \quad \langle \Psi_k | b_k^\dagger b_k | \Psi_k \rangle = 1 \implies E_k = 0 + 4\mathcal{J}S(1 - \cos(ka)) + \omega_0 = \hbar\omega(k) \quad (5.4)$$

Siendo $\omega_0 := g_e\mu_B B_{ext}$. Además, se cumple que:

$$\langle \Psi_k | \delta\mathcal{H} | \Psi(0) \rangle = \Lambda_{+-}(k) \quad (5.5)$$

En estas condiciones, la regla de oro de Fermi queda enunciada como [5, capítulo XII]:

$$P_{des}(t) \simeq 1 - W \cdot t; \quad W = \frac{2\pi}{\hbar} \left(|\langle \Psi_k | \delta\mathcal{H} | \Psi(0) \rangle|^2 \rho(E_k) \right) \Big|_{E_k=E_i} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(|\Lambda_{+-}(k)|^2 \rho(\omega(E_k)) \right) \Big|_{E_k=E_i} \quad (5.6)$$

Donde $P_{des}(t)$ es la probabilidad de desexcitación del qubit. Para poder obtener este resultado en su versión final, hemos de encontrar el momento $k_f \in PZB$ tal que $E_k = E_i = \Delta$. Esto si cumplirá si y sólo si $\Delta = \hbar\omega(k_f)$, es decir, si se da la condición de resonancia estudiada en la subsección 4.3. En otro caso, se tendrá $W = 0$.

$$\Delta = \hbar\omega(k_f) = 4\mathcal{J}S(1 - \cos(k_f a)) + \omega_0 \iff k_f = \frac{1}{a} \arccos \left(1 - \frac{\Delta - \omega_0}{4\mathcal{J}S} \right) \quad (5.7)$$

Además, la densidad de estados magnónicos en función de la energía de estos es (ver apéndice C.2):

$$\rho(\omega) = \frac{dn}{d\omega} = \frac{dn}{dk} \cdot \frac{dk}{d\omega} = 2 \frac{Na}{2\pi} \left| \frac{d\omega}{dk} \right|^{-1} = \frac{N}{4\pi\mathcal{J}S \sqrt{1 - \left(1 - \frac{\omega - \omega_0}{4\mathcal{J}S}\right)^2}} \quad (5.8)$$

El factor 2, que parece que viene de la nada, procede de la separación de la relación de dispersión en dos ramas ($k > 0$ y $k < 0$), pues esta no es inyectiva. Para más información, se recomienda de nuevo consultar el apéndice C.2. Por otro lado, queda claro que la energía del magnón que verifica $E_k = E_i$ es de nuevo $\hbar\omega(k_f) = \Delta$. Con todo esto, (5.6) queda:

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |\Lambda_{+-}(k(\Delta))|^2 \rho(\Delta) = \frac{N |\Lambda_{+-}(k(\Delta))|^2}{2\hbar\mathcal{J}S \sqrt{1 - \left(1 - \frac{\Delta - \omega_0}{4\mathcal{J}S}\right)^2}} \quad (5.9)$$

5.2. Estudio de la dinámica de las funciones de onda

La regla de oro de Fermi es un resultado muy útil, pero tiene sus limitaciones. Para obtener información de $P_{des}(t)$ aplicable para tiempos mayores, en esta subsección se va a emplear la ecuación de Schrödinger para estimar en última instancia la dependencia temporal de la amplitud $c(t)$:

$$i\hbar\partial_t |\Psi(t)\rangle = \mathcal{H} |\Psi(t)\rangle \quad (5.10)$$

Aplicamos en (5.10) el hamiltoniano (5.1):

$$\mathcal{H}|\Psi(t)\rangle = \left(\Delta \cdot c(t) + \sum_k \Lambda_{+-}(k) \varphi_k(t) \right) |\uparrow\rangle \otimes |\mathbf{0}\rangle + \sum_k (\Lambda_{+-}(k) \cdot c(t) + \hbar\omega(k) \cdot \varphi_k(t)) |\downarrow\rangle \otimes b_k^\dagger |\mathbf{0}\rangle \quad (5.11)$$

De (5.11) obtenemos las ecuaciones de la dinámica para las amplitudes de probabilidad:

$$\begin{cases} i\hbar\dot{c}(t) = \Delta \cdot c(t) + \sum_k \Lambda_{+-}(k) \varphi_k(t) \\ i\hbar\dot{\varphi}_k(t) = \Lambda_{+-}(k) \cdot c(t) + \hbar\omega(k) \cdot \varphi_k(t) \end{cases} \quad (5.12)$$

Este sistema de ecuaciones puede simplificarse mediante el siguiente cambio de variables a la imagen rotante (rotating frame):

$$\tilde{c}(t) = c(t)e^{i\Delta t/\hbar}; \quad \tilde{\varphi}_k(t) = \varphi_k(t)e^{i\omega(k)t} \quad (5.13)$$

Aplicándolo a (5.12):

$$\begin{cases} i\hbar\dot{\tilde{c}}(t) = \sum_k \Lambda_{+-}(k) \tilde{\varphi}_k(t) e^{-i(\hbar\omega(k)-\Delta)t/\hbar} \\ i\hbar\dot{\tilde{\varphi}}_k(t) = \Lambda_{+-}(k) \tilde{c}(t) e^{i(\hbar\omega(k)-\Delta)t/\hbar} \end{cases} \quad (5.14)$$

5.2.1. Aproximación markovina. Teoría de Wigner-Weisskopf.

Más adelante se tratará de resolver numéricamente este sistema lineal de ecuaciones diferenciales, pero por ahora se procede a convertirlo en una ecuación integro-diferencial a partir de (5.14). Podemos expresar $\tilde{\varphi}_k(t)$ en función de $\tilde{c}(t)$, teniendo en cuenta las condiciones iniciales en (5.3) y tomando por el momento $\hbar = 1$ para simplificar la notación, como:

$$\tilde{\varphi}_k(t) = -i\Lambda_{+-}(k) \int_0^t c(\tau) e^{i(\omega(k)-\Delta)\tau} d\tau \quad (5.15)$$

Incluyendo (5.15) en (5.14), obtenemos la ecuación integrodiferencial para $\tilde{c}(t)$:

$$\dot{\tilde{c}}(t) = -\sum_k |\Lambda_{+-}(k)|^2 \int_0^t \tilde{c}(\tau) e^{i(\Delta-\omega(k))(t-\tau)} d\tau \quad (5.16)$$

Llegados a este punto, resulta útil definir la función espectral $G(\omega)$, que se suele usar en óptica cuántica. En términos discretos, se define como:

$$G(\omega) = 2\pi \sum_k |\Lambda_{+-}(k)|^2 \delta(\omega - \omega_k) \quad (5.17)$$

Insertando (5.17) en (5.16):⁴

$$\dot{\tilde{c}}(t) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_0^t G(\omega) \tilde{c}(\tau) e^{i(\Delta-\omega)(t-\tau)} d\tau d\omega = -\int_0^t \tilde{c}(\tau) \mathcal{K}(t-\tau) d\tau \quad (5.18)$$

Vemos al instante que la ecuación (5.18) es global, el valor de \tilde{c} en un instante de tiempo t depende de su valor en tiempos anteriores. La importancia de la situación a tiempos pasados va pesada por la función núcleo (o kernel) $\mathcal{K}(u)$. Esta es, por así decirlo, la memoria del sistema:

$$\mathcal{K}(u) := \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty G(\omega) e^{i(\Delta-\omega)u} d\omega \quad (5.19)$$

Vamos a aplicar la aproximación markoviana sobre (5.18). Esta asume que el ritmo de variación de $\tilde{c}(t)$ es mucho menor que la frecuencia característica del qubit Δ , tal que el sistema carece de memoria efectiva y las ecuaciones de la dinámica pueden suponerse locales tomando $\tilde{c}(\tau) \cong \tilde{c}(t)$ y sacándolo fuera de la integral [4]. Además, también se puede ampliar el dominio de integración sobre la variable τ al límite para $t \rightarrow \infty$. La validez de esta aproximación se trata más a fondo en el apéndice C.3 a partir del estudio de la función $\mathcal{K}(u)$. El resultado puede evaluarse según la siguiente fórmula [4]:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{i(\Delta-\omega)\tau} d\tau = \pi \delta(\omega - \Delta) + i\mathcal{P} \frac{1}{\Delta - \omega} \quad (5.20)$$

Donde \mathcal{P} representa el valor principal de Cauchy. Con esto, (5.18) se convierte en:

$$\dot{\tilde{c}}(t) = -\frac{1}{2\pi} \tilde{c}(t) \int_0^\infty G(\omega) \left(\pi \delta(\omega - \Delta) + i\mathcal{P} \frac{1}{\Delta - \omega} \right) d\omega = -\left(\frac{G(\Delta)}{2} + i\delta \right) \tilde{c}(t) \quad (5.21)$$

Siendo:

$$\delta := \frac{\mathcal{P}}{2\pi} \int_0^\infty G(\omega) \frac{1}{\Delta - \omega} d\omega \quad (5.22)$$

De esta forma:

$$\tilde{c}(t) = e^{i\delta t} e^{-G(\Delta)t/2} \implies P_{des}(t) = |c(t)|^2 = |\tilde{c}(t)|^2 = e^{-G(\Delta)t} \quad (5.23)$$

La definición (5.17) no es adecuada para el cálculo de $G(\Delta)$. Necesitaremos estudiar el límite cuando $N \rightarrow \infty$ para $G(\omega)$, lo cual se explica en detalle en el apéndice C.2. El resultado, considerando de nuevo la constante de Plank reducida \hbar para escribir $G(\omega)$ en s^{-1} , es:

$$G(\omega) = 2aN |\Lambda_{+-}(k(\omega))|^2 \left| \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|^{-1} = \frac{N |\Lambda_{+-}(k(\omega))|^2}{2\hbar \mathcal{J} S |\sin(k(\omega)a)|} \quad (5.24)$$

Es necesario obtener la inversa de la relación de dispersión $k(\omega)$. Aunque esta relación no es inyectiva, podemos hacerlo para el caso $k > 0$, lo cual es suficiente, como también se aclara en el apéndice C.2.

$$k(\omega) = \frac{1}{a} \arccos \left(1 - \frac{\omega - \omega_0}{4\mathcal{J}S} \right) \quad (5.25)$$

⁴ $-\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty G(\omega) d\omega = -\int_0^\infty \sum_k |\Lambda_{+-}(k)|^2 \delta(\omega - \omega_k) d\omega = -\sum_k |\Lambda_{+-}(k)|^2$

Donde se ha definido $\omega_0 = g_e \mu_B B_{ext}$. Esta expresión informa de que $G(\omega)$ sólo está definida para las frecuencias de la banda magnónica BW . En cualquier otro caso, la relación $k(\omega)$ no estará definida, pero deberá ser $G(\omega) = 0$ dada la definición (5.17). Con esto, (5.24) queda explícitamente como:

$$G(\omega) = \begin{cases} 2aN |\Lambda_{+-}(k(\omega))|^2 \left| \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|^{-1} = \frac{N |\Lambda_{+-}(\frac{1}{a} \arccos(1 - \frac{\omega - \omega_0}{4JS}))|^2}{2\hbar JS \sqrt{1 - (1 - \frac{\omega - \omega_0}{4JS})^2}}; & \omega \in BW \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (5.26)$$

La ecuación (5.26) nos proporciona la conexión con la regla de oro de Fermi, pues $G(\Delta)$ coincide con lo obtenido en (5.9): $W = G(\Delta)$. No obstante, en esta subsección hemos mejorado en la estimación de $P(t)$. A primer orden de perturbaciones habíamos obtenido su aproximación lineal, adecuada para tiempos bajos. Ahora sabemos que para tiempos mayores su decaimiento se puede aproximar a una exponencial bajo la aproximación markoviana:

$$P_{des}(t) = e^{-G(\Delta)t} \simeq 1 - G(\Delta)t = 1 - Wt \quad (5.27)$$

A continuación representamos gráficamente la dependencia de (5.26):

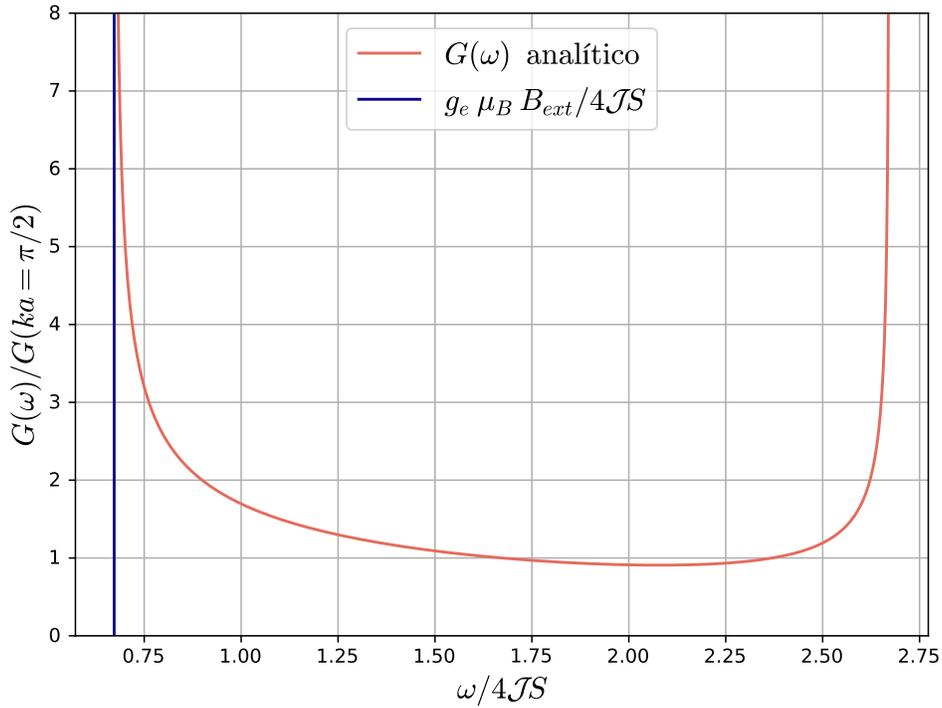


Figura 8: representación gráfica de la función espectral $G(\omega)$ adimensionalizada y calculada para $\vec{r} = (0, 0, a)$, junto con el desplazamiento de la menor frecuencia de divergencia resultante de la aplicación de un campo magnético externo. Se observa una dependencia suave con ω en la región central, la cual se rompe al acercarse a los extremos de la banda de energías, en los que $\sin(ka) \rightarrow 0$ y $G(\omega)$ diverge.

Para dar una idea de la magnitud de la función espectral, se calcula para los parámetros de la tabla 1 su valor para $\Delta = 4\mathcal{J}S + \omega_0$ (en el centro de la banda magnónica). El resultado es $G(\Delta) \simeq 480$ kHz, mientras que $\Delta \cong 440$ GHz en este caso.

Por otro lado, puede demostrarse (ver apéndice C.3) que la aproximación markoviana es aplicable cuando se da la condición de resonancia y además la función espectral verifica que $G(\omega) \simeq G(\Delta) = \text{cte}$ en un entorno de Δ . Atendiendo a la figura 8 se observa que esto sucede cuando Δ toma valores intermedios dentro de la banda de energías magnónicas. A este régimen nos referiremos como régimen markoviano. No obstante, esto no ocurre si se sitúa Δ cerca de los límites de banda, en los que la función espectral diverge. Este será, por consiguiente, el régimen no markoviano.

5.2.2. Régimen no markoviano. Resolución numérica de las ecuaciones.

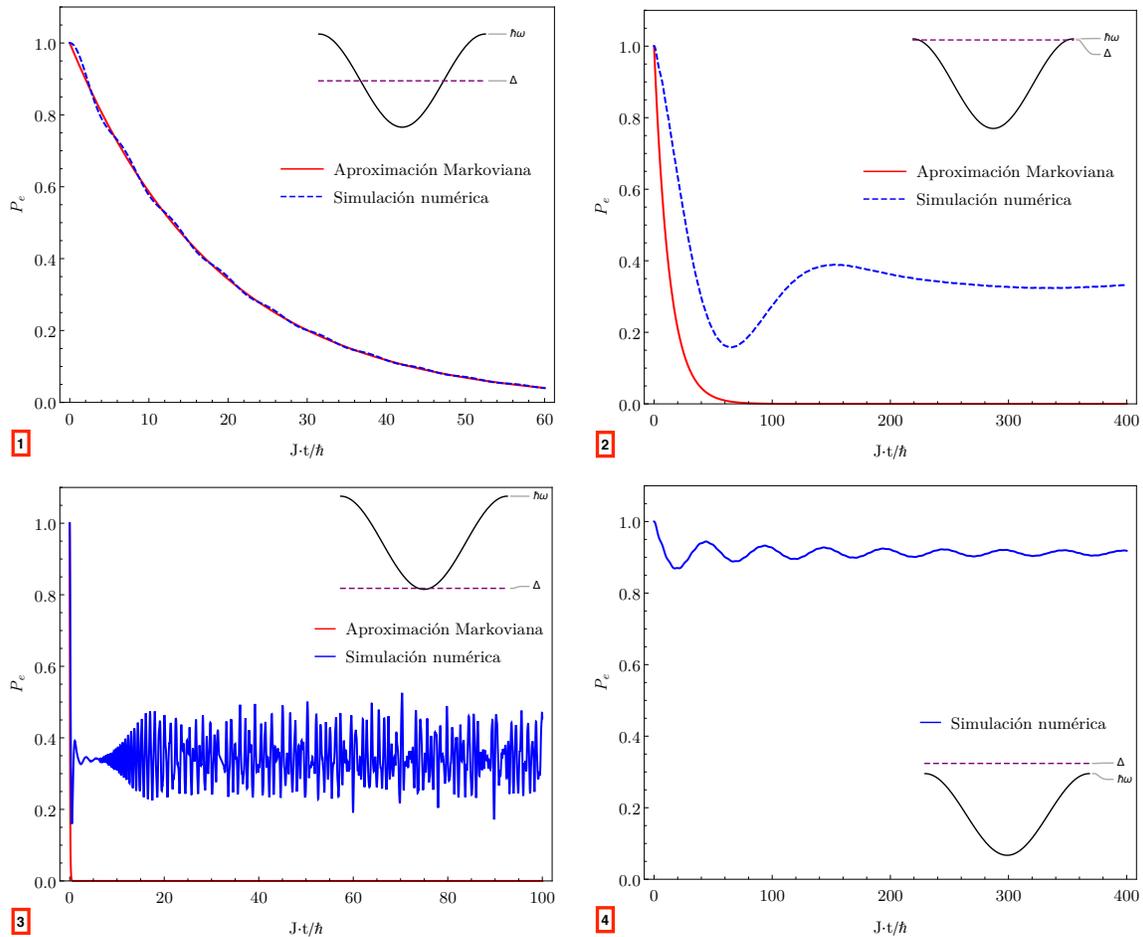


Figura 9: resultados de la resolución numérica del sistema de ecuaciones diferenciales en (5.12) para diferentes posiciones de Δ respecto de la relación de dispersión, representado en violeta. Esta resolución se ha llevado a cabo adimensionalizando tal sistema y tomando $N = 301$ espines en la cadena.

En última instancia, para obtener información del comportamiento del sistema en el régimen no markoviano nos veremos obligados a resolver el sistema lineal de ecuaciones diferenciales de coeficientes

constantes en (5.12). El objetivo es verificar la aproximación markoviana cuando $G(\omega) \simeq \text{cte}$ en torno a $\omega = \Delta$ y también analizar el comportamiento del sistema fuera del rango de aplicabilidad de esta aproximación, es decir, cuando Δ se sitúa cerca del límite de la relación de dispersión (régimen no markoviano). El resultado, obtenido ejecutando un código escrito en *Mathematica* para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales para diferentes valores de Δ , se representa en la figura 9.

Se verifica la corrección de (5.23) para el régimen markoviano en la primera subfigura. Por otro lado, también se observa que tal aproximación pierde su validez en los extremos de la relación de dispersión, en los que el sistema tiende a un estado ligado del subespacio $\Omega = 1$, es decir, $\exists \lim_{t \rightarrow \infty} |c(t)|^2 \in (0, 1)$. Esto se ve en las subfiguras 2 y 3, teniendo para esta última un mayor acercamiento de Δ al límite de banda. Por último, la subfigura 4 describe la evolución de $|c(t)|^2$ cuando directamente no se cumple la condición de resonancia.

6. Conclusiones

El objetivo de esta última sección es resumir los resultados obtenidos del estudio del modelo original presentado en este trabajo de fin de grado. En primer lugar, se ha comprobado el carácter perturbativo de la interacción dipolar entre espines tomando valores típicos de los parámetros en la tabla 1, lo cual facilita el tratamiento teórico de su correspondiente hamiltoniano con la aplicación (justificada) de la RWA. Pese a esto, se ha verificado la influencia de esta interacción a la dinámica de los autoestados del hamiltoniano sin perturbar al calcular la emisión espontánea. En este cálculo, que corresponde a la sección 5, se han distinguido dos regímenes: el markoviano, en el que $P_{des}(t)$ se aproxima adecuadamente a una exponencial; y el no markoviano. En este último, correspondiente a los casos en los que Δ se sitúa en los extremos de la banda de energías magnónicas, las consideraciones tenidas en cuenta en 5.2.1 no tienen validez, se requiere de la resolución numérica del sistema de ecuaciones diferenciales para estudiar su comportamiento. Y resulta que este es considerablemente diferente al del régimen markoviano: la función de onda inicial tiende a un estado ligado dentro del subespacio $\Omega = 1$, es decir:

$$\exists \lim_{t \rightarrow \infty} |c(t)|^2 \in (0, 1) \quad (6.1)$$

Así mismo, es pertinente mencionar posibles continuaciones del trabajo aquí escrito, las cuales contemplan la incorporación de nuevos ingredientes al modelo. En primer lugar sería útil estudiar la emisión espontánea en subespacios con número de excitaciones mayor que uno. Por otro lado, también sería pertinente analizar otro tipo de comportamientos magnéticos, como pueda ser el antiferromagnético; y el efecto en las propiedades del modelo en presencia de impurezas en el medio, siguiendo la línea del desarrollo presentado en [9].

Un tercer problema, que está motivado a partir de la sección 5 y es a mi parecer la continuación natural a este trabajo de fin de grado, sería el estudio del acoplo indirecto entre dos qubits diferentes. Estos se colocarían a una distancia suficiente para desprestigiar la interacción directa entre sus espines, pero junto a un reservorio magnónico con las características expuestas en este trabajo. Esto permitiría explorar la posibilidad de utilizar estos reservorios para la comunicación entre sistemas cuánticos discretos, al igual que se hace con las guías de onda en electrodinámica cuántica, como se expuso en la introducción.

Referencias

- [1] C. Kittel, P. McEuen, and P. McEuen, *Introduction to solid state physics*. Wiley New York, 1996, vol. 8.
- [2] U. Rössler, *Solid state theory: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2009.
- [3] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin *et al.*, *Solid state physics*. Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976.
- [4] H.-P. Breuer, F. Petruccione *et al.*, *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press on Demand, 2002.
- [5] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, *Quantum mechanics; 1st ed.* Wiley, New York, 1977.
- [6] S. J. Bartolome, F. Luis, and J. F. Fernández, *Molecular magnets*. Springer, 2016.
- [7] W. P. Schleich, *Quantum optics in phase space*. John Wiley & Sons, 2011.
- [8] R. M. White, R. M. White, and B. Bayne, *Quantum theory of magnetism*. Springer, 1983, vol. 1.
- [9] B. V. Balagurov and V. Yaks, “Theory of antiferromagnetic impurities in magnets,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, vol. 66, pp. 1135–1149, 1974.
- [10] E. T. Jaynes and F. W. Cummings, “Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser,” *Proceedings of the IEEE*, vol. 51, no. 1, pp. 89–109, 1963.

Apéndices

A. Desarrollo del hamiltoniano de interacción dipolar

En este primer apéndice se tratará de aclarar la modificación del hamiltoniano en (4.1) para escribirlo en función de los operadores deseados. Conviene recordarlo:

$$\mathcal{H}_{\text{d-d}} = \frac{\mu_0 g_e g_J \mu_B^2}{4\pi} \sum_j \frac{d_j^2 \vec{J} \vec{S}_j - 3 \cdot (\vec{J} \cdot \vec{d}_j) (\vec{S}_j \cdot \vec{d}_j)}{d_j^5} \quad (\text{A.1})$$

Para llevar esta tarea a cabo, se descompondrá tal hamiltoniano en diferentes sumandos, para terminar agrupándolos todos según convenga. Con esto en mente, se parte del numerador en el sumatorio de (A.1) y se reescriben sus dos sumandos, recalando que se denotarán los átomos del medio ferromagnético de forma genérica en las tres dimensiones, con $\vec{d}_j = (x - x_j, y - y_j, z - z_j)$, y que:

$$J^x = \frac{1}{2} (J^+ + J^-); \quad J^y = \frac{1}{2i} (J^+ - J^-) \quad (\text{A.2})$$

$$S_j^x \stackrel{(3.10)}{\cong} \frac{\sqrt{2S}}{2} (a_j + a_j^\dagger); \quad S_j^y \stackrel{(3.10)}{\cong} \frac{\sqrt{2S}}{2i} (a_j - a_j^\dagger) \quad (\text{A.3})$$

Así pues:

$$d_j^2 \vec{J} \vec{S}_j = d_j^2 (J^x S_j^x + J^y S_j^y + J^z S_j^z) = d_j^2 \left(\frac{\sqrt{2S}}{2} (J^+ a_j^\dagger + J^- a_j) + J^z S_j^z \right) \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} & -3 \cdot (\vec{J} \cdot \vec{d}_j) (\vec{S}_j \cdot \vec{d}_j) = \\ & = -3 \left(\underbrace{J^x (x - x_j)}_1 + \underbrace{J^y (y - y_j)}_2 + \underbrace{J^z (z - z_j)}_3 \right) \left(\underbrace{S_j^x (x - x_j)}_{(a)} + \underbrace{S_j^y (y - y_j)}_{(b)} + \underbrace{S_j^z (z - z_j)}_{(c)} \right) \quad (\text{A.5}) \end{aligned}$$

Se procede al desarrollo de los términos de la ecuación (A.5) siguiendo la clasificación que en ella se presenta:

$$1.(a) \quad -3J^x S_j^x (x - x_j)^2 = -\frac{3\sqrt{2S}}{4} (x - x_j)^2 (J^+ a_j + J^+ a_j^\dagger + J^- a_j + J^- a_j^\dagger)$$

$$1.(b) \quad -3J^x S_j^y (x - x_j)(y - y_j) = -\frac{3\sqrt{2S}}{4i} (x - x_j)(y - y_j) (J^+ a_j - J^+ a_j^\dagger + J^- a_j - J^- a_j^\dagger)$$

$$1.(c) \quad -3J^x S_j^z (x - x_j)(z - z_j) = -\frac{3}{2} (x - x_j)(z - z_j) (J^+ S_j^z + J^- S_j^z)$$

$$2.(a) \quad -3J^y S_j^x (y - y_j)(x - x_j) = -\frac{3\sqrt{2S}}{4i} (y - y_j)(x - x_j) (J^+ a_j + J^+ a_j^\dagger - J^- a_j - J^- a_j^\dagger)$$

$$2.(b) \quad -3J^y S_j^y (y - y_j)^2 = -\frac{3\sqrt{2S}}{4} (y - y_j)^2 (-J^+ a_j + J^+ a_j^\dagger + J^- a_j - J^- a_j^\dagger)$$

$$2.(c) \quad -3J^y S_j^z (z - z_j) (y - y_j) = -\frac{3}{2i} (z - z_j) (y - y_j) (J^+ S_j^z - J^- S_j^z)$$

$$3.(a) \quad -3J^z S_j^x (z - z_j) (x - x_j) = -\frac{3\sqrt{2S}}{2} (z - z_j) (x - x_j) (J^z a_j + J^z a_j^\dagger)$$

$$3.(b) \quad -3J^z S_j^y (z - z_j) (y - y_j) = -\frac{3\sqrt{2S}}{2i} (z - z_j) (y - y_j) (J^z a_j - J^z a_j^\dagger)$$

$$3.(c) \quad -3(z - z_j)^2 J^z S_j^z$$

Con estas nueve ecuaciones, se vuelven a reorganizar los términos:

$$\begin{aligned} J^+ a_j &\rightarrow -\frac{3\sqrt{2S}}{4} J^+ a_j \left((x - x_j)^2 - 2i(x - x_j)(y - y_j) - (y - y_j)^2 \right) = \\ &= -\frac{3\sqrt{2S}}{4} J^+ a_j \left((x - x_j) - i(y - y_j) \right)^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J^+ a_j^\dagger &\rightarrow -\frac{3\sqrt{2S}}{4} J^+ a_j^\dagger \left((x - x_j)^2 - (x - x_j)(y - y_j) + (x - x_j)(y - y_j) + (y - y_j)^2 \right) = \\ &= -\frac{3\sqrt{2S}}{4} J^+ a_j^\dagger \left((x - x_j)^2 + (y - y_j)^2 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J^- a_j &\rightarrow -\frac{3\sqrt{2S}}{4} J^- a_j \left((x - x_j)^2 - (x - x_j)(y - y_j) + (x - x_j)(y - y_j) + (y - y_j)^2 \right) = \\ &= -\frac{3\sqrt{2S}}{4} J^- a_j \left((x - x_j)^2 + (y - y_j)^2 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J^- a_j^\dagger &\rightarrow -\frac{3\sqrt{2S}}{4} J^- a_j^\dagger \left((x - x_j)^2 + 2i(x - x_j)(y - y_j) - (y - y_j)^2 \right) = \\ &= -\frac{3\sqrt{2S}}{4} J^- a_j^\dagger \left((x - x_j) + i(y - y_j) \right)^2 \end{aligned}$$

$$J^+ S_j^z \rightarrow -\frac{3}{2} J^+ S_j^z (z - z_j) \left((x - x_j) - i(y - y_j) \right)$$

$$J^- S_j^z \rightarrow -\frac{3}{2} J^- S_j^z (z - z_j) \left((x - x_j) + i(y - y_j) \right)$$

$$J^z a_j \rightarrow -\frac{3\sqrt{2S}}{2} J^z a_j (z - z_j) \left((x - x_j) - i(y - y_j) \right)$$

$$J^z a_j^\dagger \rightarrow -\frac{3\sqrt{2S}}{2} J^z a_j^\dagger (z - z_j) \left((x - x_j) + i(y - y_j) \right)$$

$$J^z S_j^z \rightarrow -3(z - z_j)^2 J^z S_j^z$$

Con estos resultados ya se pueden escribir los diferentes términos en los que queda descompuesto el hamiltoniano en (A.1):

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{d-d}} \cdot \left(\frac{\mu_0 g_e g_J \mu_B^2}{4\pi} \right)^{-1} &= \sum_j \frac{-3\sqrt{2S}}{4d_j^5} ((x-x_j) - i(y-y_j))^2 J^+ a_j + \\
&+ \sum_j \frac{\sqrt{2S}}{2d_j^5} \left(d_j^2 - \frac{3}{2} ((x-x_j)^2 + (y-y_j)^2) \right) J^+ a_j^\dagger + \\
&+ \sum_j \frac{\sqrt{2S}}{2d_j^5} \left(d_j^2 - \frac{3}{2} ((x-x_j)^2 + (y-y_j)^2) \right) J^- a_j + \\
&+ \sum_j \frac{-3\sqrt{2S}}{4d_j^5} ((x-x_j) + i(y-y_j))^2 J^- a_j^\dagger + \sum_j \frac{-3(z-z_j)\sqrt{2S}}{2d_j^5} ((x-x_j) - i(y-y_j)) J^z a_j + \\
&+ \sum_j \frac{-3(z-z_j)\sqrt{2S}}{2d_j^5} ((x-x_j) + i(y-y_j)) J^z a_j^\dagger + \sum_j \frac{-3(z-z_j)\sqrt{2S}}{2d_j^5} ((x-x_j) - i(y-y_j)) J^+ S_j^z + \\
&+ \sum_j \frac{-3(z-z_j)\sqrt{2S}}{2d_j^5} ((x-x_j) + i(y-y_j)) J^- S_j^z + \sum_j \frac{1}{d_j^5} \left(d_j^2 - 3(z-z_j)^2 \right) J^z S_j^z \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

Se puede simplificar notablemente esta expresión definiendo:

$$\lambda_{+-}(j) = -\frac{\mu_0 g_e g_J \mu_B^2 \sqrt{2S}}{16\pi} \cdot \left[\frac{1}{d_j^3} - \frac{3(z-z_j)^2}{d_j^5} \right] \in \mathbb{R} \longrightarrow J^+ a_j^\dagger \quad (\text{A.7})$$

$$\lambda_{++}(j) = -\frac{3\mu_0 g_e g_J \mu_B^2 \sqrt{2S}}{16\pi} \cdot \frac{((x-x_j) + i(y-y_j))^2}{d_j^5} \in \mathbb{C} \longrightarrow J^- a_j^\dagger \quad (\text{A.8})$$

$$\lambda_+(j) = -\frac{3\mu_0 g_e g_J \mu_B^2}{8\pi} \cdot \frac{(z-z_j)((x-x_j) + i(y-y_j))}{d_j^5} \in \mathbb{C} \longrightarrow J^- S_j^z, J^z a_j^\dagger \quad (\text{A.9})$$

$$\lambda_0(j) = \frac{\mu_0 g_e g_J \mu_B^2}{4\pi} \left(\frac{1}{d_j^3} - \frac{3(z-z_j)^2}{d_j^5} \right) \in \mathbb{R} \longrightarrow J^z S_j^z \quad (\text{A.10})$$

Así, (A.6) queda reducido a:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{d-d}} &= \sum_j \left(\lambda_{+-}(j) J^+ a_j^\dagger + \text{h.c.} \right) + \sum_j \left[\lambda_{++}(j) J^- a_j^\dagger + \text{h.c.} \right] + \\
&+ \sum_j \left(\lambda_+(j) \left[J^- S_j^z + \sqrt{2S} J^z a_j^\dagger \right] + \text{h.c.} \right) + J^z \sum_j \lambda_0(j) S_j^z \quad (\text{A.11})
\end{aligned}$$

Finalmente, se tienen en cuenta (3.8) y (3.12) para expresar a_j , a_j^\dagger , S_j^z en función de los operadores de creación y destrucción magnónicos. Cada uno de los sumandos anteriores sufrirá una modificación

de la forma:

$$\sum_j \lambda_{+-}(j) J^+ a_j^\dagger = J^+ \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \lambda_{+-}(j) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \right) b_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (\text{A.12})$$

$$\sum_j \lambda_{++}(j) J^- a_j^\dagger = J^- \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \lambda_{++}(j) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \right) b_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (\text{A.13})$$

$$\sqrt{2S} \sum_j \lambda_+(j) J^z a_j^\dagger = \sqrt{2S} J^z \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \lambda_+(j) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \right) b_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (\text{A.14})$$

$$\begin{aligned} \sum_j \lambda_+(j) J^- S_j^z &= \sum_j \lambda_+(j) J^- \left(S - a_j^\dagger a_j \right) = \\ &= \sum_j \lambda_+(j) J^- \left(S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_j} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} \right) = \\ &= J^- S \sum_j \lambda_+(j) - J^- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\frac{1}{N} \sum_j \lambda_+(j) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_j} \right) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} \quad (\text{A.15}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J^z \sum_j \lambda_0(j) S_j^z &= J^z \sum_j \lambda_0(j) \left(S - a_j^\dagger a_j \right) = \\ &= J^z \sum_j \lambda_0(j) \left(S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_j} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} \right) = \\ &= J^z S \sum_j \lambda_0(j) - J^z \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\frac{1}{N} \sum_j \lambda_0(j) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_j} \right) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} \quad (\text{A.16}) \end{aligned}$$

De esta forma, (A.11) queda finalmente como:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{d-d}} &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\Lambda_{+-}(\mathbf{k}) J^+ b_{\mathbf{k}}^\dagger + \text{h.c.} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \left(\Lambda_{++}(\mathbf{k}) J^- b_{\mathbf{k}}^\dagger + \text{h.c.} \right) + \\ &+ \sqrt{2S} J^z \left(\sum_{\mathbf{k}} \Lambda_+(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^\dagger + \text{h.c.} \right) - \left(J^- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{\lambda}_+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \text{h.c.} \right) - J^z \left(\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{\lambda}_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \text{h.c.} \right) \\ &\quad + \left(J^+ S \sum_j \lambda_+(j) + \text{h.c.} \right) + J^z S \sum_j \lambda_0(j) \quad (\text{A.17}) \end{aligned}$$

Donde:

$$\Lambda_{+-}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \lambda_{+-}(j) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \quad (\text{A.18a})$$

$$\Lambda_{++}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \lambda_{+-}(j) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \quad (\text{A.18b})$$

$$\Lambda_+(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \lambda_+(j) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \quad (\text{A.18c})$$

$$\tilde{\lambda}_+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{N} \sum_j \lambda_+(j) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_j} \quad (\text{A.18d})$$

$$\tilde{\lambda}_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{N} \sum_j \lambda_0(j) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_j} \quad (\text{A.18e})$$

Con esto queda concluido este primer apéndice, habiéndose obtenido el hamiltoniano en la forma deseada.

B. Hamiltoniano de espín con término de anisotropía

El modelo del qubit descrito por el hamiltoniano de Zeeman, como se vió en la subsección 4.3, presenta una serie de inconvenientes:

1. Requiere de la aplicación de campo magnético para desdoblar los niveles energéticos.
2. El modelo más simple, el de dos niveles (con $J = 1/2$), no satisface la condición de resonancia según la ecuación (4.28).
3. Para $J > 1/2$, s y l tomando valores que sí verifiquen estas condiciones, tenemos que los niveles de energía están equiespaciados, con diferencia de energía entre ellos $\Delta = g_J \mu_B B_{ext}$ constante.

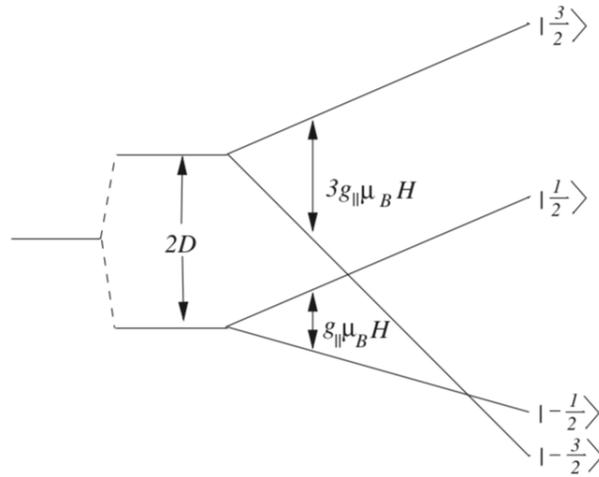


Figura 10: esquema de los niveles de energía para el hamiltoniano en (B.1). Se muestra su alteración (en la dirección horizontal de la imagen), así como la variación del autoestado correspondiente al nivel fundamental, con la aplicación del campo magnético. Figura tomada de [8].

Teniendo esto en cuenta, se tratará aquí de sofisticar algo más el modelo considerando una molécula paramagnética aislada compuesta por iones de metales de transición [6, 8]. La contribución de la anisotropía de dicha molécula influye en el hamiltoniano efectivo que describe sus niveles de energía a través del tensor anisotrópico. Aquí se va a tomar una aproximación de la intervención de dicho tensor, la cual queda descrita por el parámetro D . Pongamos como ejemplo un espín con simetría axial sobre el cual actúa un campo dirigido en tal eje de simetría, denotado como Z . El hamiltoniano correspondiente puede ser escrito, salvando valores constantes, como [8, sección 4.1.1.]:⁵

$$\mathcal{H}_{eff} = g_{\parallel} \mu_B B_{ext} S^z + D(S^z)^2 \quad (\text{B.1})$$

La dependencia de sus niveles de energía con el campo magnético externo se traza en la figura 10. De ella, destaca en primer lugar que el término de anisotropía desdobra los niveles con distinto $|m_S|$ a campo nulo. En tal situación, suponiendo $D > 0$, el estado fundamental está doblemente degenerado y corresponde a $|S, \pm \text{mín } |m_S|\rangle$. No obstante, la aplicación del campo magnético cambia el nivel fundamental, que pasará a corresponder a otro autoestado de \mathcal{H}_{eff} , y elimina su degeneración. Además, los niveles no están equiespaciados: la separación entre dos niveles de energía contiguos depende de m_S . De esta forma, para estudiar la condición de resonancia para la transición entre el nivel fundamental y el primer excitado habrá que tener en cuenta a qué autoestados corresponden estos dos.

C. Detalles sobre la aproximación markoviana

C.1. Conservación del número de excitaciones

El objetivo de este apéndice es aclarar la propiedad vista al comienzo de la sección 5, en la que se afirmó que el hamiltoniano propuesto para modelizar el acoplo entre el reservorio unidimensional y el qubit conservaba el número de excitaciones Ω , es decir, que $[\mathcal{H}, \tilde{\Omega}] = 0$. Para demostrar esto, las relaciones (4.6) y (4.7) deben considerarse. Con ellas, se obtienen los siguientes conmutadores:

$$[J^z, J^+] = J^+ \implies [\Xi^-, \Xi^z] = [J^+, J \cdot \mathbb{I} - J^z] = [J^z, J^+] = J^+ = \Xi^- \quad (\text{C.1})$$

$$[J^z, J^-] = -J^- \implies [\Xi^+, \Xi^z] = [J^-, J \cdot \mathbb{I} - J^z] = [J^z, J^-] = -J^- = -\Xi^+ \quad (\text{C.2})$$

Visto esto, y teniendo en cuenta la definición de los operadores \mathcal{H} y $\tilde{\Omega}$ en (5.1) y (4.8), se puede escribir:

$$[\mathcal{H}, \tilde{\Omega}] = [\mathcal{H}_0, \tilde{\Omega}] + [\delta\mathcal{H}, \tilde{\Omega}]$$

Calculamos estas dos contribuciones por separado, aplicando (C.1) y (C.2) y recordando (3.13):

⁵Tal asimetría afecta al factor de Landé, que pasará a ser diferente según sea la dirección del campo aplicado. De ahí que denotemos g_{\parallel} en lugar de g_e .

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_0, \tilde{\Omega}] &= [\Delta \Xi^z, \Sigma_k b_k^\dagger b_k] + [\Delta \Xi^z, \Xi^z] + [\Sigma_k \hbar \omega(k) \cdot b_k^\dagger b_k, \Sigma_k b_k^\dagger b_k] + [\Sigma_k \hbar \omega(k) \cdot b_k^\dagger b_k, \Xi^z] = \\
&= \sum_{k, k'} \hbar \omega(k) [b_{k'}^\dagger b_{k'}, b_k^\dagger b_k] = 0 \quad (\text{C.3})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\delta \mathcal{H}, \tilde{\Omega}] &= \sum_k \Lambda_{+-}(k) \left([\Xi^- b_k^\dagger, \Sigma_{k'} b_{k'}^\dagger b_{k'}] + [\Xi^- b_k^\dagger, \Xi^z] + [\Xi^+ b_k, \Sigma_{k'} b_{k'}^\dagger b_{k'}] + [\Xi^+ b_k, \Xi^z] \right) = \\
&= \sum_k \Lambda_{+-}(k) \left(\Xi^- [b_k^\dagger, \Sigma_{k'} b_{k'}^\dagger b_{k'}] + b_k^\dagger [\Xi^-, \Xi^z] + \Xi^+ [b_k, \Sigma_{k'} b_{k'}^\dagger b_{k'}] + b_k [\Xi^+, \Xi^z] \right) = \\
&= \sum_{k'} \Lambda_{+-}(k') \left(\Xi^- b_{k'}^\dagger [b_{k'}^\dagger, b_{k'}] + \Xi^- b_{k'}^\dagger + \Xi^+ [b_{k'}, b_{k'}^\dagger] b_{k'} - \Xi^+ b_{k'} \right) = \\
&= \sum_{k'} \Lambda_{+-}(k') \left(-\Xi^- b_{k'}^\dagger + \Xi^- b_{k'}^\dagger + \Xi^+ b_{k'} - \Xi^+ b_{k'} \right) = 0 \quad (\text{C.4})
\end{aligned}$$

Con esto queda demostrado el resultado.

C.2. Extensión al continuo de la función espectral $G(\omega)$

Partiremos de la definición de $G(\omega)$ en (5.17) y consideremos una función cualquiera $f(\omega)$. Tratemos de ver qué ocurre en el límite al continuo para la integral:

$$I = \int f(\omega) G(\omega) d\omega = 2\pi \sum_k f(\omega(k)) |\Lambda_{+-}(k)|^2 \quad (\text{C.5})$$

Si se hace tender $N \rightarrow \infty$, se ha pasar del sumatorio \sum_k a la integral $\int \rho(k) dk$, donde $\rho(k) = dn/dk$ es la densidad de estados en función del número de ondas. Las condiciones de contorno de Born - Von Kármán proporcionan esta densidad de estados para la cadena unidimensional, la cual corresponde a una distribución uniforme de la forma:

$$\rho(k) = \frac{1}{\Delta k} = \frac{Na}{2\pi} \quad (\text{C.6})$$

Donde $\Delta k = 2\pi/Na$ es la separación entre dos momentos sucesivos para la cadena finita. Se reexpresa la integral I :

$$\begin{aligned}
I &= 2\pi \int_{PZB} \frac{Na}{2\pi} f(\omega(k)) |\Lambda_{+-}(k)|^2 dk = \\
&= Na \left[\int_{PZB^+} f(\omega(k)) |\Lambda_{+-}(k)|^2 dk + \int_{PZB^-} f(\omega(k)) |\Lambda_{+-}(k)|^2 dk \right] = \\
&= Na \left[\int_{\omega_0}^{\omega_1} f(\omega) |\Lambda_{+-}(k(\omega))|^2 \left(\frac{d\omega}{dk} \right)^{-1} (\omega) d\omega - \int_{\omega_0}^{\omega_1} f(\omega) |\Lambda_{+-}(k(\omega))|^2 \left(\frac{d\omega}{dk} \right)^{-1} (\omega) d\omega \right] = \\
&= 2Na \int_{\omega_0}^{\omega_1} f(\omega) |\Lambda_{+-}(k(\omega))|^2 \left| \frac{d\omega}{dk} \right|^{-1} d\omega \quad (C.7)
\end{aligned}$$

Siendo $\omega_0 < \omega_1 = \omega_0 + 8\mathcal{J}S$ los límites de la banda de energías de los magnones. Para hacer el cambio de variable de k a ω se ha tenido en cuenta que la relación de dispersión no es inyectiva en la primera zona de Brillouin, por lo que se ha dividido el dominio de integración en dos:

$$PZB^+ = \{k \in (0, \pi/a)\}; \quad PZB^- = \{k \in (-\pi/a, 0)\} \quad (C.8)$$

También se ha tenido en cuenta en la integral que la velocidad de grupo $d\omega/dk$ es una función impar (basta con ver la figura 4 a la derecha para comprobarlo):

$$\frac{d\omega}{dk} = 4\mathcal{J}Sa \sin ka = \begin{cases} +4\mathcal{J}Sa \sqrt{1 - \cos^2 ka} = +4\mathcal{J}Sa \sqrt{1 - \left(1 - \frac{\omega - \omega_0}{4\mathcal{J}S}\right)^2}; & \text{para } k \in (0, \pi/a) \\ -4\mathcal{J}Sa \sqrt{1 - \cos^2 ka} = -4\mathcal{J}Sa \sqrt{1 - \left(1 - \frac{\omega - \omega_0}{4\mathcal{J}S}\right)^2}; & \text{para } k \in (-\pi/a, 0) \end{cases} \quad (C.9)$$

Comparando (C.5) y (C.7) podemos identificar $G(\omega)$ en el límite al continuo. El resultado es:

$$G(\omega) = 2aN |\Lambda_{+-}(\omega)|^2 \left| \frac{\partial\omega}{\partial k} \right|^{-1} = \frac{N |\Lambda_{+-}(k(\omega))|^2}{2\mathcal{J}S \sqrt{1 - \left(1 - \frac{\omega - \omega_0}{4\mathcal{J}S}\right)^2}} \quad (C.10)$$

Basta recordar que $\Lambda_{+-}(k) \propto 1/\sqrt{N}$ para concluir que esta expresión no depende de N .

C.3. Sobre la función kernel $\mathcal{K}(u)$

Podemos identificar una situación cuyas consecuencias son similares de la aproximación markoviana, la cual se apoya en que la memoria del campo bosónico decae mucho más rápido que el tiempo propio de la dinámica del qubit. Es decir, el estado del sistema en un instante t solo dependerá de la situación justo anterior. En los términos en los que hemos hecho el desarrollo, esto supone que el kernel $\mathcal{K}(u)$ solo toma valores relevantes para $u \simeq 0$. Veamos si este comportamiento se obtiene cuando la función espectral es aproximadamente constante en un entorno de Δ , $G(\omega) \simeq G(\Delta) = cte \forall \omega \in D(\Delta, \varepsilon)$ para $\varepsilon > 0$. Se toma de esta manera la definición de $\mathcal{K}(u)$ en (5.19), recordando que $G(\omega) = 0$ fuera

de la banda de energías magnónicas. Así: ⁶

$$\mathcal{K}(u) := \frac{1}{2\pi} \int_{\omega_c - \delta}^{\omega_c + \delta} G(\omega) e^{i(\Delta - \omega)u} d\omega \quad (\text{C.11})$$

Hemos reexpresado $\omega_0 = \omega_c - \delta$ y $\omega_1 = \omega_c + \delta$ en función de la semianchura δ y la energía central ω_c de la banda. Si se da la condición de resonancia y se tiene que la función espectral es aproximadamente constante en torno a Δ , se puede realizar la siguiente aproximación en la integral anterior, pues la contribución predominante a esta se dará para $\omega \simeq \Delta$:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(u) &:= \frac{1}{2\pi} \int_{\omega_c - \delta}^{\omega_c + \delta} G(\omega) e^{i(\Delta - \omega)u} d\omega \simeq \frac{G(\Delta)}{2\pi} \int_{\omega_c - \delta}^{\omega_c + \delta} e^{i(\Delta - \omega)u} d\omega = \\ &= \frac{G(\Delta)}{2\pi} e^{i\Delta u} \frac{e^{-i(\omega_c + \delta)u} - e^{-i(\omega_c - \delta)u}}{-iu} = \frac{G(\Delta)}{\pi} e^{i(\Delta - \omega_c)u} \frac{\sin(\delta u)}{u} = \\ &= \frac{G(\Delta)\delta}{\pi} e^{i(\Delta - \omega_c)u} \cdot \text{sinc}(\delta u) \quad (\text{C.12}) \end{aligned}$$

Insertando (C.12) en (5.18):

$$\dot{\tilde{c}}(t) = - \int_0^t \tilde{c}(t-u) \frac{G(\Delta)\delta}{\pi} e^{i(\Delta - \omega_c)u} \cdot \text{sinc}(\delta u) du \quad (\text{C.13})$$

La forma funcional de $\text{sinc}\delta u$ puede aproximarse al de una delta de Dirac en torno a $u = 0$. Aquí encontramos la referencia a la aproximación markoviana: el valor del núcleo $\mathcal{K}(u)$ es despreciable excepto en torno al cero. Apoyándonos en este hecho, aproximamos (C.13) a:

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{c}}(t) &\simeq - \int_0^t \tilde{c}(t-u) \frac{G(\Delta)\delta}{\pi} \cdot \text{sinc}(\delta u) e^{i(\Delta - \omega_c)u} du = -\tilde{c}(t) \frac{G(\Delta)}{\pi} \int_0^{\delta t} e^{i(\Delta - \omega_c)x/\delta} \text{sinc}(x) dx \simeq \\ &\simeq -\tilde{c}(t) \frac{G(\Delta)}{\pi} \int_0^\infty \text{sinc}(x) dx = -\frac{G(\Delta)}{2} \tilde{c}(t) \implies \tilde{c}(t) \simeq e^{-G(\Delta)t/2} \quad (\text{C.14}) \end{aligned}$$

En la última aproximación se ha supuesto que trabajamos con tiempos suficientemente grandes, tal que $\delta t \gg 1$. En estas circunstancias, el error cometido al extender la integral a ∞ es casi imperceptible.

Las hipótesis cualitativas que motivan esta aproximación en la ecuación diferencial pueden verificarse al calcular numéricamente y representar la función espectral $\mathcal{K}(u)$ para $\Delta = \hbar\omega_{1/2}$, es decir, en el centro de la banda. El resultado es una función de u en el plano complejo que tiene una forma semejante al resultado obtenido en (C.12):

⁶ $\text{sinc}x = \frac{\sin x}{x}$

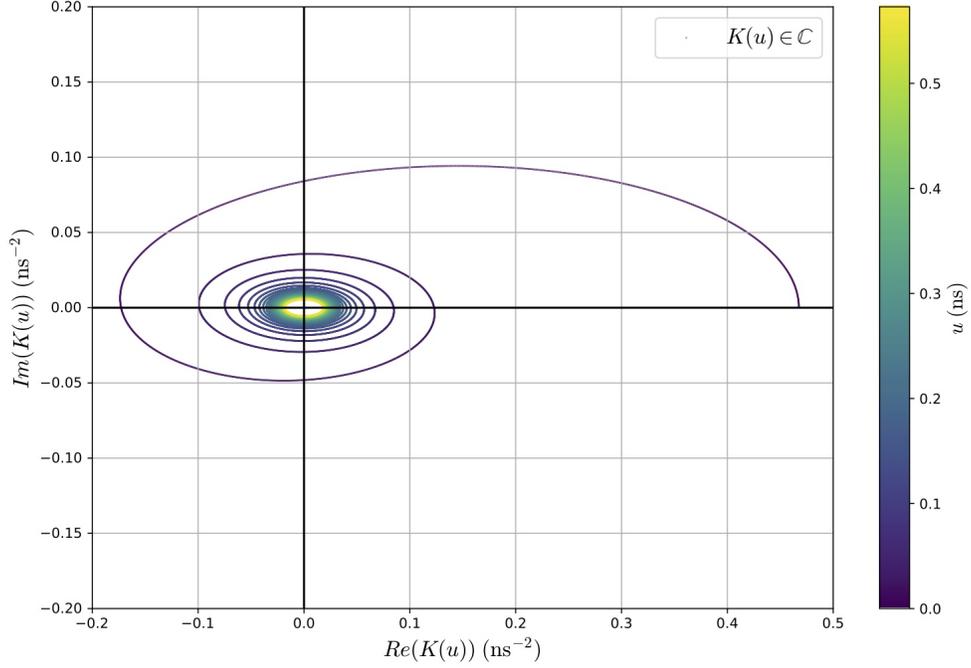


Figura 11: Representación de $\mathcal{K}(u)$ en el plano complejo dentro del régimen markoviano y expresado en ns^{-2} , para $\Delta = \hbar\omega_{1/2}$ y $N = 401$. El hecho de que esta función tienda a 0 al aumentar u nos informa de la progresiva pérdida de memoria del sistema, dada la interpretación del significado de la función núcleo dada en la subsección 5.2.1.

De lo que se observa en esta figura cabe destacar que la escala temporal de la aproximación de $\mathcal{K}(u)$ a 0 es del orden de 1 ns según muestra la barra de color, mientras que el tiempo característico del decaimiento de $|c(t)|^2$ en el régimen markoviano en este caso es $1/G(\hbar\omega_{1/2}) \simeq 2000$ ns, un valor mucho mayor que da validez a dicha aproximación. En consecuencia, podrá tomarse $\tilde{c}(\tau) \simeq c(t) = \text{cte}$ en la integral (5.18).