

Defensa de Tesis de Doctorado en Física

LaNAIS de RMS

Dinámica coherente de excitaciones de carga y espín en sistemas unidimensionales.

Elena Rufeil Fiori

Dr. Horacio M. Pastawski, Dra. Patricia R. Levstein

El **control y diseño de la dinámica cuántica** constituye el núcleo del procesamiento de información cuántica. En sistemas de espines acoplados, esto se ve dificultado por

• la alta conectividad de las interacciones,

• la complejidad de los estados accesibles a temperatura ambiente.

En esta tesis mostramos alternativas para obtener una dinámica **coherente controlada** que puede obtenerse en sistemas de espines interactuantes en experimentos de RMN

Para obtener el grado de simplicidad deseado utilizaremos un adecuado diseño de las interacciones efectivas y una conveniente elección de la topología de los acoplamientos...

elección de interacciones efectivas...

muchos cuerpos ...

RMN en el estado sólido

$$\mathcal{H}_{DQ} = d_{i,i+1} \sum_{i=1}^{N} \left(S_i^+ S_{i+1}^+ + S_i^- S_{i+1}^- \right)$$

$$\langle S^z \rangle (t) = \sum_M J_M(t) \exp(-iM\phi)$$

RMN en el estado líquido

$$\mathcal{H}_{XY} = d_{i,i+1} \sum_{i=1}^{N} \left(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+ \right)$$

$$P_{i,i}(t) = \left\langle S_i^z(t) S_i^z(0) \right\rangle$$

Función correlacion de pares en una cadena de 5 espines est. líq. en RMN

Feld man et al.

Jordan-Wigner

Z.L. Mádi et al. / Chemical Physics Letters 268 (1997) 300-305

un cuerpo ...



fermiones no interactuantes

$$\mathcal{H}_{TB} = d_{i,i+1} \sum_{i=1}^{N} \left(c_i^+ c_{i+1} + c_{i+1}^+ c_i \right)$$



Organización

Primer parte:

• Estudiamos **cómo obtener una dinámica simple** aprovechando las interacciones (DQ) que mezclan subespacios de distinta proyección de espín total.

- Implementamos experimentos en RMN en el estado sólido utilizando un sistema unidimensional de espines.
- Utilizamos Coherencias Cuánticas Múltiples, una "observable" en RMN, como **testigo de dinámica efectiva de un cuerpo** subyacente en una dinámica de muchos cuerpos interactuantes.

Segunda parte:

• Estudiamos un **modelo** que describe el **decaimiento de la polarización** cuando un espín excitado interactúa débilmente con una cadena de espines que actúa como un ambiente.

• Estudiamos los **efectos coherentes que el ambiente produce sobre el sistema** de interés.

• Obtenemos una **descripción completa del decaimiento** de la polarización local, comportamiento **exponencial y no-exponencial**.

Primera parte... Panorama

---- d_{i-1,j-1} d_{i,j}

muchos cuerpos ...

RMN en el estado sólido

$$\mathcal{H}_{DQ} = d_{i,i+1} \sum_{i=1}^{N} \left(S_i^+ S_{i+1}^+ + S_i^- S_{i+1}^- \right)$$

no conmuta con el estado inicial de equilibrio térmico*

$$\rho(0) = \frac{1}{Z} \left(\mathbf{1} - \alpha \sum_{i} S_{i}^{z} \right)$$

mezcla subespacios de diferente proyección de espín (momento magnético total) creando estados de superposición de muchos cuerpos: Coherencias Cuánticas Múltiples

fermiones no interactuantes

$$\mathcal{H}_{TB} = d_{i,i+1} \sum_{i=1}^{N} \left(c_i^+ c_{i+1} + c_{i+1}^+ c_i \right)$$

dinámica cuántica efectiva de un cuerpo, manifestada en los órdenes de MQC



Espines nucleares en el estado sólido

Sistema de espines nucleares en el **estado sólido** en presencia de un campo magnético externo B₀

Interacciones principales:

1) interacción con el campo externo, Zeeman,

2) interacción dipolar,

 \mathcal{H}_{dip} perturbación de \mathcal{H}_{Zee} (5 órdenes menor), se desprecian los términos del \mathcal{H}_{dip} que producen transiciones entre los autoestados de \mathcal{H}_{Zee} . Descripción desde terna rotante \rightarrow dinámica queda descrita por Hamiltoniano dipolar truncado:

$$\mathcal{H}_{dip}^{(0)} = \sum_{i,j} \frac{d_{ij}}{2} \left(2S_i^{\ z} S_j^{\ z} - S_i^{\ x} S_j^{\ x} - S_i^{\ y} S_j^{\ y} \right) d_{ij} = \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2r_{ij}^3} \left(3\cos(\theta_{ij}) - 1 \right),$$

 γ razón giromagnética, S_i^z componente del op. de espín definido por la dirección de B_0 , r_{ij} vector posición que une a los núcleos i y j, S_i es el vector de momento angular, θ ij ángulo entre el vector internuclear r_{ij} y B_0 .



$$\mathcal{H}_{Zee} = -\sum_{i} \hbar \gamma B_0 S_i^z$$
$$\mathcal{H}_{dip} = \sum_{i,j} \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2} \left(\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right)$$

Coherencias Cuánticas Múltiples

 $[\mathcal{H}_{dip}^{(0)}, S^{z}] = 0 \Rightarrow \text{autoestados} | u > \text{de } \mathcal{H}_{dip}^{(0)} \text{ y del operador de espín total } S^{z}:$ $S^{z} = \sum S_{i}^{z} \qquad \qquad S^{z} | u \rangle = m_{u} | u \rangle$

el momento magnético total es un buen número cuántico

$$m_u = \sum_i m_{u,i}$$

Luego, los elementos no diagonales de la matriz densidad, i.e., las coherencias,

$$\rho_{uv} = \langle u | \rho(t) | v \rangle$$

pueden ser nominadas utilizando la diferencia de los momentos magnéticos. Un elemento ρ_{uv} es llamado

coherencia cuántica de orden M

si los dos estados |u> y |v> involucrados en la transición que conecta son tq

$$M = m_{\mu} - m_{\nu}$$

Coherencias Cuánticas Múltiples: 2 espines



Intensidad de coherencia de orden M (*):

 $J_{M}(t) = \sum_{u,v} \left| \rho_{uv}(t) \right|^{2}$

B₀

Coherencias Cuánticas Múltiples: cadena de 10 espines



y condición inicial de equilibrio térmico en la aprox. de altas $\rho(0) = \frac{1}{2^{10}} \left(1 + \frac{\hbar \gamma B_0}{kT} S^z \right)$ temperaturas:

Cómo se detectan las MQC

Pueden ser caracterizadas basándose en su respuesta a una rotación alrededor del eje de cuantificación z.

Un estado de coherencia de orden *M* luego de una rotación de ángulo ϕ alrededor del eje z adquiere una fase proporcional a M dada por:

$$\langle u | \exp(-i\phi S^z) \rho \exp(i\phi S^z) v \rangle = \exp(i\phi M) \langle u | \rho | v \rangle$$

esta rotación sobre el estado la incluimos en el Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{\phi} = \exp\left(-\mathrm{i}\,\phi S^{z}\right)\mathcal{H}\exp\left(\mathrm{i}\,\phi S^{z}\right)$$

Magnetización total \rightarrow transformada de Fourier con coeficientes J_M

$$\rho(0) \to \mathcal{H} \to \rho(t) \to -\mathcal{H}_{\phi} \to \rho(2t)$$

$$\langle S^z \rangle (t) = \sum_M \exp(i \phi M) J_M(t)$$

$$\phi \longleftrightarrow M$$

Esquema de secuencias de pulsos formado por 4 partes, detección por marcado de fase:



 Periodo de excitación: exc. de las MQC generando Hamilt. efectivo *H*.
(Periodo de evolución) evol. libre de las MQC.
Periodo de reconversión: "marcado" de las MQC con la fase φ, generando -*H*_φ.
Periodo de detección: pulso de lectura

Magnetización total \rightarrow transformada de Fourier con coeficientes J_M

$$\langle S^z \rangle (t) = \sum_M \exp(i \phi M) J_M(t)$$

$$\phi \longleftrightarrow M$$

Cuál es el sistema

Hidroxiapatita



Hidroxiapatita Hexagonal $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$



 $Ca_5(OH)(PO_4)_3$ Arreglo en columnas de lo núcleos de hidrógenos en la hidroxiapatita

Unidimensionalidad favorecida por el efecto Zenón

RMN en el estado sólido \rightarrow interacción dipolar $\rightarrow 1/r^3$ Razón entre la constante de interacción dentro de la cadena y la interacción entre cadeas:

$$\frac{d_{\rm in}}{d_{\rm x}} = f(\theta_{\rm max}) \, {\rm x} \left(\frac{r_{\rm x}}{r_{\rm in}}\right)^3 \approx 2 \, {\rm x} \, 20$$

Monocristal (orientación que maximiza el acoplamiento dentro de la cadena)

Razón entre los segundos momentos de un espín en una cadena y un espín central rodeado por 6 vecinos:

$$\sqrt{\left\langle \frac{M_{\rm in}}{M_{\rm x}} \right\rangle} = \left\langle f(\theta, \phi) \right\rangle x \left(\frac{r_{\rm x}}{r_{\rm in}} \right)^3 \approx 1.5 \text{ x } 20 \qquad Policristal (promedio sobre ángulo sólido)$$

Efecto dinámico -> Efecto Zenón Cuántico

Razón entre el tiempo característico dentro de la cadena y el tiempo característico entre cadenas (dinámica FGR):

$$\tau_{\rm in} \approx \frac{\hbar}{d_{\rm in}}, \quad \frac{1}{\tau_{\rm x}} \approx \frac{1}{\hbar} d_{\rm x}^{2} \frac{1}{d_{\rm in}},$$

$$\Rightarrow \frac{\tau_{\rm in}}{\tau_{\rm x}} \approx \left(\frac{d_{\rm x}}{d_{\rm in}}\right)^2 \approx \left(\frac{r_{\rm in}}{r_{\rm x}}\right)^6 \approx \frac{1}{400}$$



Transformación a fermiones no interactuantes

muchos cuerpos ...

 $\mathcal{H}_{DQ}, \rho_{eq}(0) \rightarrow J_0(t), J_2(t), J_4(t), J_6(t), \dots$

 $\mathcal{H}_{DQ} \propto S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-$

d

d

d

 $\mathcal{H}_{DQ}, \rho_{eq}(0), nn$:





Resultados numéricos: dinámica de MQC

cadena de 10 espines

$$\mathcal{H}_{DQ} \propto S_i^x S_j^x - S_i^y S_j^y, \qquad \mathcal{H}_{XX} \propto 3S_i^x S_j^x - S_i^y S_j^y - S_i^z S_j^z,$$



Hamiltoniano dipolar rotado: mezcla muchos subespacios de proyección de espín

NNN Interacción: primer vecino dij=d segundo vecino dij=d/8

Interacción 2do vecino (NNN): "rompe" la transformación a "un cuerpo"

Resultados Numéricos

cadena de 10 espines

NNN Interacción: 1er vecino dij=d 2do vecino dij=d/8

 \mathcal{H}_{XX} , \mathcal{H}_{DQ} , monocristal: una orientación de la cadena respecto al campo magnético externo

<H_{XX}>, <H_{DQ}>, policristal: promedio sobre ángulo sólido <>

Si bien, bajo \mathcal{H}_{OD} NNN

$$J_4(t) \neq 0$$



su intensidad es pequeña frente a interacciones que mezclan más fuertemente los subespacios. Así, \mathcal{H}_{DQ} mantiene la dinámica principal entre J_0 y J_2 .

Resultados Experimentales



Resultados experimentales: Eco de Loschmidt bajo \mathcal{H}_{DO}



Conclusiones (de la primer parte...)

• Utilizando RMN en el estado sólido en una red de espines 1d (favorecida por el QZE), construimos una dinámica cuántica efectiva de un cuerpo, \mathcal{H}_{DO} .

• Utilizamos como testigo de la dinámica efectiva de un cuerpo subyacente en una dinámica de muchos cuerpos interactuantes la intensidad de coherencia de orden 4, $J_4(t)$.

• Estos resultados fueron contrastados con la dinámica de muchos cuerpos inducida por la acción de un Hamiltoniano dipolar rotado, \mathcal{H}_{XX} .

• Evaluamos la decoherencia a través de un experimento de eco de Loschmidt basado en la dinámica de cuantos-dobles. La dinámica 1d conduce una monótona decoherencia exponencial, mientras que la dinámica de un espacio altamente conectado muestra un decaimiento abrupto de la coherencia.

• Estos resultados indican que, a pesar de la inevitable interacción a segundos vecinos, la HAp puede ser usada como un "simulador cuántico" para la dinámica de fermiones no-interactuantes.

Segunda parte...

muchos cuerpos ...

RMN en estado líquido

$$\mathcal{H}_{XY} = d_{i,i+1} \sum_{i=1}^{N} \left(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+ \right)$$

Jordan-Wigner

un cuerpo ...

fermiones no interactuantes

d_{i-1,j-1}

 $\mathsf{d}_{i,i}$

$$\mathcal{H}_{TB} = d_{i,i+1} \sum_{i=1}^{N} \left(c_i^+ c_{i+1}^- + c_{i+1}^+ c_i^- \right)$$

Polarización Local, función de autocorrelación

$$P_{i,i}(t) = \left\langle S_i^z(t) S_i^z(0) \right\rangle_{ent}$$

Probabilidad de Supervivencia

$$P_{i,i}(t) = \left| \left\langle i \right| \exp(-iHt) \left| i \right\rangle \right|^2$$



E.P. Danieli et al. / Chemical Physics Letters 402 (2005) 88-95

Sistema-ambiente; Probabilidad de Supervivencia





Probabilidad de Supervivencia; Decaimiento exponencial



Probabilidad de Supervivencia; tiempos cortos



Tiempo de transición y QZE



En el rango de decaimiento cuadrático, mediciones recursivas y proyectivas del estado |0> a intervalos de tiempo τφ podrían producir desasceleración del decaimiento:
efecto Zenón Cuántico. Luego, una cota superior para ésta escala de tiempo es τφ < tS.

Probabilidad de Supervivencia; tiempos largos



Tiempo de transición a ley de potencia y AZE



Γ₀

Conclusiones (de la segunda parte...)



 10^{-6}

0

del ambiente

15

 ${}^{20}_{t} [\hbar V]$

 $\overline{5}t_{R}$

10

Tiempos característicos:

- t_S: transición entre dec. cuadrático y exp
- t_R : transición entre dec. exp y ley de pot.

<u>Conclusiones generales</u>

Dentro del estudio de la dinámica multi-espín de las coherencias cuánticas múltiples,

- Construimos una dinámica cuántica efectiva de un cuerpo, \mathcal{H}_{DQ} , utilizando RMN en el estado sólido a temperatura ambiente, en una red de espines quasi 1d.
- Utilizamos como testigo de la dinámica efectiva de un cuerpo la intensidad de coherencia de orden 4, $J_4(t)$.
- Mostramos la posibilidad de utilizar la RMN a temperatura ambiente como un simulador de la dinámica de una partícula fermiónica.

Dentro del estudio del modelo de interacción coherente sistema-ambiente,

- Encontramos el comportamiento exacto de la probabilidad de supervivencia para todo tiempo, y con ella obtuvimos:
- el régimen SC-FGR;
- las cotas temporales que nos brindan en régimen de validez de la aproximación Markoviana;
- la explicación del efecto de colapso de la supervivencia;
- la utilización de espines nucleares con interacción XY, que es posible de construir efectivamente en RMN, para el estudio del decaimiento temporal.

... gracias por su atención!