



Universidad de San Carlos de Guatemala
Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas
Departamento de Física

**MÉTODOS COMPUTACIONALES BASADOS EN
ENTRELAZAMIENTO CUÁNTICO PARA EL ANÁLISIS
DE TRANSICIONES DE FASE EN CADENAS
CUÁNTICAS DE ESPÍN $1/2$**

Paola Andrea Delcompare Rodríguez

Asesorado por Dr. Ángel Giovanni Ramírez García

Guatemala, agosto de 2017

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



ESCUELA DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS

**MÉTODOS COMPUTACIONALES BASADOS EN
ENTRELAZAMIENTO CUÁNTICO PARA EL
ANÁLISIS DE TRANSICIONES DE FASE EN
CADENAS CUÁNTICAS DE ESPÍN 1/2**

TRABAJO DE GRADUACIÓN
PRESENTADO A LA JEFATURA DEL
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
POR

PAOLA ANDREA DELCOMPARE RODRÍGUEZ
ASESORADO POR DR. ÁNGEL GIOVANNI RAMÍREZ GARCÍA

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE
LICENCIADA EN FÍSICA APLICADA

GUATEMALA, 28 AGOSTO DE 2017

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
ESCUELA DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS



CONSEJO DIRECTIVO

DIRECTOR M.Sc. Edgar Anibal Cifuentes Anléu
SECRETARIO ACADÉMICO Ing. José Rodolfo Samayoa Dardón

TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO

EXAMINADOR MSc. Osmar Obdulio Hernández Aguilar
EXAMINADOR Dr. Juan Adolfo Ponciano Castellanos
EXAMINADOR Ing. Walter Giovanni Álvarez Marroquín



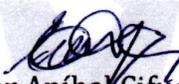
Universidad de San Carlos de Guatemala
Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas



Ref. D.DTG. 005-2017
Guatemala 22 de agosto de 2017

El Director de la Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Coordinador de la Licenciatura en Física Aplicada, al trabajo de graduación Titulado: **MÉTODOS COMPUTACIONALES BASADOS EN ENTRELAZAMIENTO CUÁNTICO PARA EL ANÁLISIS DE TRANSICIONES DE FASE EN CADENAS CUÁNTICAS DE ESPÍN 1/2** presentado por la estudiante universitaria **Paola Andrea Delcompare Rodríguez**, autoriza la impresión del mismo.

IMPRIMASE.


MsC. Edgar Anibal Cifuentes
Director
Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas



201213252
EC/pec

AGRADECIMIENTOS

A mi familia, por creer en mí y apoyarme durante toda mi vida. Así como por alentarme a seguir mis sueños. Quiero agradecer en especial a mi mamá, por haberme estimulado desde pequeña a seguir el camino de la ciencia: Por apoyarme en mi participación en olimpiadas de matemática, animarme en mi decisión de estudiar física y tantas otras cosas que no cabrían en esta página.

A mi asesor, por el tiempo que dedicó a guiar este trabajo, por su paciencia y por todo el conocimiento que compartió conmigo. Al trabajar él, no solo gané experiencia y conocimiento, también gané un amigo. Sería un honor poder colaborar con él en futuras investigaciones.

A mis profesores, por el conocimiento que compartieron conmigo a lo largo de mi carrera.

A mis amigos, por todos los momentos que compartimos, ya sea en Fisired, clases o en los pasillos. Fue un placer encontrar personas tan interesantes como ellos, cada uno con personalidades distintas y peculiares.

DEDICATORIA

A mi familia y amigos.

ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE FIGURAS	VII
ÍNDICE DE TABLAS	X
LISTA DE SÍMBOLOS	XI
OBJETIVOS	XIII
1. TRANSICIONES DE FASE	1
1.1. Longitud de correlación	1
1.2. Clasificación de transiciones de fase	2
1.3. Universalidad, exponentes críticos y propiedades de escala	4
1.4. Parámetro de orden	5
1.5. Ejemplos de transiciones de fase	6
1.5.1. Ferromagnetos uniaxiales	7
1.5.2. Fluidos simples	10
1.6. Transiciones de fase cuánticas	13
1.6.1. Diagrama de fase a temperatura cero	14
1.6.2. Transiciones de fase cuánticas vrs transiciones de fase clásicas	14
2. EL MODELO DE HEISENBERG EN SISTEMAS CUÁNTICOS DE ESPIN EN 1D	17
2.1. Interacción de intercambio	18
2.2. Momentum Angular	19
2.3. Interacción de próximos vecinos	24
2.4. Condiciones de frontera	24
2.5. Modelo de Heisenberg	25
2.5.1. Variantes del modelo de Heisenberg	26
2.5.1.1. Modelo de Heisenberg XX	26
2.5.1.2. Modelo de Heisenberg XXX	27

2.5.1.3.	Modelo de Heisenberg XXZ	27
2.5.2.	Parámetro de orden para el modelo de Heisenberg	28
2.5.3.	Cadenas de Heisenberg de espín 1/2 con interacciones de próximos vecinos	29
2.5.3.1.	Dos sitios	29
2.5.3.2.	N sitios	32
3.	Métodos de análisis	37
3.1.	Diagonalización exacta	37
3.1.1.	Diagonalización por bloques	37
3.2.	Teoría de campo medio	38
3.2.1.	El modelo de Ising	39
3.2.2.	Teoría de campo medio de Weiss	40
3.2.3.	Correlaciones espaciales	44
3.2.4.	¿Qué tan buena es la Teoría de campo medio?	46
3.3.	Grupo de Renormalización	47
3.3.1.	Transformaciones de bloques de espín	48
3.3.2.	Ideas básicas del grupo de renormalización	54
3.3.2.1.	Propiedades de las transformaciones del grupo de renor- malización	55
3.3.2.2.	El origen del comportamiento singular	58
3.3.3.	Puntos fijos	59
3.3.3.1.	Significado físico de los puntos fijos	60
3.3.3.2.	Comportamiento local de flujos RG cerca de un punto fijo	61
3.3.4.	Propiedades globales de los flujos RG	64
3.4.	Grupo de renormalización de la matriz densidad	66
3.4.1.	Matriz densidad	67
3.4.2.	Diagonalización truncada	72
3.4.2.1.	La idea de la decimación de bloques	76
3.4.3.	Truncamiento de la matriz densidad	78
3.4.3.1.	La matriz densidad reducida	79
3.4.3.2.	Descomposición en valores singulares	80
3.4.3.3.	La descomposición de Schmidt	81
3.4.3.4.	Optimización de la función de onda truncada	82
3.4.4.	DMRG de tamaño infinito	82
3.4.4.1.	Adición de un sitio a un bloque	84

3.4.4.2.	La construcción del super hamiltoniano	85
3.4.4.3.	Truncación de la matriz densidad y la rotación a la nueva base	85
3.4.5.	DMRG de tamaño finito	87
3.4.5.1.	Predicción de la función de onda	89
3.5.	Entrelazamiento cuántico	90
3.5.1.	Entrelazamiento y la descomposición de Schmidt	91
3.5.2.	Entropía de entrelazamiento	92
4.	RESULTADOS	95
4.1.	Diagonalización exacta	95
4.1.1.	Resultados analíticos	95
4.1.1.1.	Heisenberg XX	95
4.1.1.2.	Heisenberg XXX	98
4.1.1.3.	Heisenberg XXZ	100
4.1.2.	Resultados numéricos	103
4.1.2.1.	Heisenberg XX	103
4.1.3.	Costos computacionales	105
4.1.3.1.	Heisenberg XXX	107
4.1.4.	Costos computacionales	107
4.1.4.1.	Heisenberg XXZ	110
4.1.5.	Costos computacionales	111
4.2.	DMRG	113
4.2.1.	Energía por sito del estado fundamental	114
4.2.2.	Entropía de entrelazamiento	119
	CONCLUSIONES	123
	RECOMENDACIONES	125
	BIBLIOGRAFÍA	127
A.	APÉNDICE	129
A.1.	Archivo de encabezado: ‘heisenberg.h’	129
A.2.	Implementación del método DMRG	130
A.2.1.	Modelo de Heisenberg XX	130
A.2.2.	Modelo de Heisenberg XXX	133
A.2.3.	Modelo de Heisenberg XXZ	136

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1. Diagrama de fase de un ferromagneto uniaxial	8
1.2. Magnetización vrs campo aplicado para varias temperaturas	8
1.3. Diagrama de fase de una sustancia típica	11
1.4. Diagrama de fase de un fluido a presión fija	11
1.5. Isotermas cerca del punto crítico líquido-gas	12
1.6. Transición de fase a temperatura cero por cruce de niveles	15
1.7. Posibles diagramas de fase de un sistema cercano a una transición de fase cuántica	15
2.1. Ordenamiento ferromagnético y antiferromagnético	19
2.2. Red cúbica simple	34
2.3. Red cuadrada	34
2.4. Red 1D o cadena	34
2.5. Topología de una cadena cerrada o periódica	35
2.6. Topología de una red cuadrada con condiciones periódicas de contorno	35
2.7. Sistema cuántico 1D: cadena de espín 1/2	35
3.1. Magnetización por sitio $M_I(H, T)/N$ del modelo de Ising unidimensional como función del campo externo H	40
3.2. Solución gráfica de la ecuación de campo medio para la magnetización espontánea	42
3.3. Un potencial $V(x)$ de una partícula moviéndose en una dimensión	59
3.4. Flujos de grupo de renormalización que fluyen cerca de un punto fijo crítico	66
3.5. Representación gráfica de la recursión de la construcción del Hamiltoniano	75
3.6. Imagen esquemática del truncamiento de base ideal	76
3.7. Sistema bipartito, compuesto por el subsistema A y el subsistema B	79

3.8.	Ilustración del paso a paso del esquema del crecimiento de bloques en el algoritmo del DMRG de tamaño infinito	84
3.9.	Ilustración esquemática del algoritmo del DMRG de tamaño finito	88
4.1.	Diagrama de fases de la solución analítica del modelo XX para una cadena de dos sitios	96
4.2.	Diagrama de fases de la solución analítica del modelo XX para cuatro sitios	97
4.3.	Diagrama de fases de la solución analítica del modelo XXX para dos sitios	98
4.4.	Diagrama de fase de la solución analítica para el modelo XXX para cuatro sitios	100
4.5.	Diagrama de fases de la solución analítica del modelo XXZ para dos sitios	101
4.6.	Diagrama de fase de la solución analítica del modelo XXZ para cuatro sitios	102
4.7.	Diagrama de fase para una cadena de Heisenberg XX para catorce sitios	104
4.8.	Diagramas de fase para una cadena de Heisenberg XX de 4, 6, 8, 10, 12 and 14 sitios	104
4.9.	Detalle de la figura 4.8	105
4.10.	Tiempo de ejecución y memoria utilizada por el modelo de Heisenberg XX como función del número de sitios	106
4.11.	Tiempo de ejecución y memoria consumida por el modelo de Heisenberg XX en escala logarítmica	106
4.12.	Diagrama de fases para una cadena de Heisenberg XXX de catorce sitios	108
4.13.	Diagramas de fase de una cadena de Heisenberg XXX de 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios	108
4.14.	Detalle de la figura 4.13	109
4.15.	Tiempo de ejecución y memoria consumida por la simulación del modelo de Heisenberg XXX	109
4.16.	Tiempo de ejecución y memoria consumida por el modelo de Heisenberg XXX en escala logarítmica	110
4.17.	Diagrama de fase para una cadena de XXZ con catorce sitios	111

4.18. Diagramas de fase de una cadena de Heisenberg XXZ de 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios	112
4.19. Detalle de la figura 4.18	112
4.20. Tiempo de ejecución y memoria consumida por la simulación del modelo de Heisenberg XXZ	113
4.21. Tiempo de ejecución y memoria consumida por el modelo de Heisenberg XXZ en escala logarítmica	113
4.22. Diagramas de fase de cadenas de Heisenberg XX de 4, 8, 16, 32 y 64 sitios	115
4.23. Detalle de la figura 4.22	116
4.24. Diagramas de fase de cadenas de Heisenberg XXX de 4, 8, 16, 32, 64 y 128 sitios	116
4.25. Detalle de la figura 4.24	117
4.26. Diagramas de fase para cadenas de Heisenberg XXZ de 4, 8, 16, 32 y 64 sitios	118
4.27. Detalle de la figura 4.22	118
4.28. Entropía de entrelazamiento para un bloque de tamaño mitad de cadena para los modelos XX y XXX	121
4.29. Entropía de entrelazamiento para un bloque de tamaño mitad de cadena para el modelo XXZ	122
4.30. Entropía de entrelazamiento para un bloque de tamaño mitad de cadena para el modelo XXZ	122

ÍNDICE DE TABLAS

1.1. Transiciones de fase (puntos críticos), parámetros de orden y sustancias	7
2.1. Eigenvectores y eigenvalores de una cadena isotrópica de Heisenberg de dos sitios	32
3.1. Exponentes críticos para la Clase de universalidad de Ising	47
3.2. Clasificación de los puntos fijos	94
4.1. Estado fundamental del modelo XX para dos sitios	96
4.2. Estado fundamental del modelo XXX para dos sitios	99
4.3. Estado fundamental del modelo XXZ para dos sitios	101
4.4. Energía por sitio del estado fundamental para la cadena de Heisenberg para 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios	103
4.5. Ajustes lineales aplicados al tiempo de ejecución y a la memoria consumida	105
4.6. Energía por sitio del estado fundamental de la cadena de Heisenberg XXX con 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios	107
4.7. Ajustes lineales aplicados al tiempo de ejecución y a la memoria consumida por el modelo de Heisenberg XXX en escala logarítmica	109
4.8. Energía por sitio del estado fundamental para las cadenas de Heisenberg XXZ con 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios para $\Delta < 1$	110
4.9. Ajustes lineales aplicados al tiempo de ejecución y a la memoria consumida por el modelo de Heisenberg XXZ en escala logarítmica	114
4.10. Energía por sitio del estado fundamental para la cadena de Heisenberg XX de 4, 8, 16, 32 y 64 sitios	115
4.11. Energía por sitio del estado fundamental de la cadena de Heisenberg XXX con 4, 8, 16, 32 y 64 sitios	115
4.12. Energía por sitio del estado fundamental de cadenas de Heisenberg XXZ de 4, 8, 16, 32 and 64 sitios para $\Delta < 1$	117

4.13. Resultados de los ajustes de la entropía de entrelazamiento de un
bloque del tamaño mitad de la cadena como función del número de
sitios para el modelo de Heisenberg XX, XXX y XXZ 121

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Significado
ξ	Longitud de correlación
T	Temperatura
T_c	Temperatura crítica
t	Temperatura reducida
k_B	Constante de Boltzmann
\hbar	Constante de Plank reducida
\mathcal{H}	Hamiltonian
H	Campo magnético externo
M	Magnetización
J	Constante de intercambio
N	Número de sitios
ρ	Matriz densidad
\otimes	Producto de kronecker
\equiv	Equivalente a
\approx	Aproximadamente
$\tilde{\chi}^2$	Chi cuadrado reducido
$ \psi\rangle$	Vector <i>ket</i>
$\langle\psi $	Funcional <i>bra</i>
$\langle\varphi \psi\rangle$	<i>bracket</i>

OBJETIVOS

General

Analizar el espectro de baja energía de cadenas cuánticas de espín $1/2$ cuya dinámica se encuentra descrita por las variantes XX, XXX y XXZ del modelo de Heisenberg para estudiar las transiciones de fase que ocurren en estos sistemas y aplicar la relación entre el entrelazamiento cuántico y los fenómenos de criticalidad.

Específicos

1. Introducir las fases cuánticas de la materia y las transiciones de fase que ocurren entre ellas a través de la descripción de los conceptos principales de la teoría de las transiciones de fase.
2. Aplicar el método de cruce de niveles para identificar transiciones de fase cuánticas.
3. Describir las propiedades y la naturaleza de las interacciones en cadenas cuánticas de espín $1/2$, y presentar una revisión del modelo de Heisenberg y sus variantes.
4. Describir los diferentes métodos que se pueden utilizar para analizar los espectros de baja energía de cadenas cuánticas de espín $1/2$ y para estudiar las transiciones de fase cuánticas.
5. Implementar los módulos de la biblioteca DMRG usando C++ y enfocándose en las cadenas de Heisenberg XX, XX y XXZ de espín $1/2$ de diferentes tamaños.
6. Validar la implementación del DMRG comparando el espectro de baja energía obtenido de los valores exactos que se calcularon a través del método de diagonalización exacta aplicado a sistemas pequeños.

7. Caracterizar fases cuánticas y transiciones de fase cuánticas que aparecen en las cadenas XX, XXXX y XXZ de Heisenberg con espín $1/2$.
8. Calcular la entropía de entrelazamiento en cadenas de Heisenberg XX, XXX y XXZ con espín $1/2$, con el fin de explorar el comportamiento del entrelazamiento cuántico en la vecindad de los puntos críticos.

1. TRANSICIONES DE FASE

Las leyes fundamentales de la naturaleza que gobiernan las propiedades de la materia exhiben una serie de distintas propiedades de simetría. Estas leyes son invariantes con respecto a las traslaciones espaciales y temporales, y también con respecto a las rotaciones y las inversiones. Los estados que existen en la naturaleza no muestran, en general, la simetría completa de sus principios naturales subyacentes [21].

La materia puede existir en diferentes estados de agregación o fases, que difieren en su simetría y son resultado de sus propiedades térmicas, mecánicas o electromagnéticas. Las condiciones externas tales como la presión P , el campo magnético H o la temperatura T determinan en cuál de las fases posibles se presentará una sustancia con interacciones internas particulares. Si se cambian las condiciones externas a valores particulares de estas cantidades, el sistema puede experimentar una transición de una fase a otra. Es decir, se produce una transición de fase.

La comprensión de qué fases serán adoptadas por un material particular bajo condiciones particulares ciertamente pertenece a los temas más interesantes de la física de la materia condensada. Debido a las diferentes propiedades de las diferentes fases, esta situación es también importante para las aplicaciones de materiales. Además, el comportamiento de la materia en la vecindad de las transiciones de fase es también de interés fundamental.

1.1. Longitud de correlación

Para tener una noción del concepto de longitud de correlación, Cardy [3] propuso el siguiente *Gedankenexperiment*¹: Tomar una pieza grande de material y medir algunas de sus propiedades macroscópicas intensivas, como densidad, compresibilidad o magnetización. Y luego dividirlo en dos mitades casi iguales, manteniendo las variables externas como temperatura igual. Las propiedades intensivas de cada

¹Significa experimento de pensamiento en alemán.

pieza serán entonces las mismas que las del conjunto. Lo mismo ocurre si se repite el proceso. Pero eventualmente, después de muchas iteraciones, algo diferente debe suceder. Y esto es porque sabemos que la materia está compuesta de átomos y moléculas cuyas propiedades son muy distintas a las de la materia original que constituyen.

La escala de longitud a la que las propiedades generales de las piezas comienzan a diferir marcadamente de las del material original da una medida de lo que se denomina la *longitud de correlación*, ξ . Esta es la distancia sobre la cual las fluctuaciones de los grados de libertad microscópicos, como las posiciones de los átomos, están significativamente correlacionadas entre sí. Las fluctuaciones en dos partes del material a una distancia mayor que la longitud de correlación se desconectan efectivamente entre sí. Por lo tanto, no hace ninguna diferencia apreciable de las propiedades macroscópicas si la conexión está completamente cortada.

Usualmente la longitud de correlación es del orden de unos pocos espacios interatómicos. Idealmente, esto significa que podemos considerar colecciones realmente muy pequeñas de átomos para obtener una idea muy buena del comportamiento macroscópico del material. En realidad, pequeños grupos de átomos exhibirán efectos superficiales muy fuertes que dominarán el comportamiento a grandes rasgos. Sin embargo, ya que esto es sólo un experimento mental, podemos imaginar el uso de condiciones de frontera periódicas con el fin de eliminar algunos efectos complejos, como los efectos de superficie.

1.2. Clasificación de transiciones de fase

El valor real de la longitud de correlación depende de las condiciones externas que determinan el estado del sistema. Es bien sabido que los sistemas pueden cambiar abruptamente su comportamiento macroscópico a medida que estas cantidades se varían suavemente. Los puntos en los que esto sucede se llaman *puntos críticos*, y normalmente marcan una transición de fase de un estado a otro. Cardy [3] menciona que hay básicamente dos posibles maneras en que tal transición puede ocurrir.

En el primer caso, dos o más estados a ambos lados del punto crítico coexisten exactamente en el punto crítico. Sin embargo, incluso en este punto son distintos entre sí, es decir, tienen diferentes propiedades macroscópicas. Si nos alejamos un poco del punto crítico, hay una fase única cuyas propiedades están continuamente conectadas a una de las fases coexistentes en este punto. En ese caso, debemos esperar encontrar el comportamiento discontinuo en varias cantidades termodinámicas a

medida que pasamos por el punto crítico. Tales transiciones se llaman *transiciones de fase discontinuas o de primer orden*. Ejemplos comunes son la fusión del hielo, o la vaporización del líquido. La longitud de correlación en tal transición de primer orden es generalmente finita.

Sin embargo, la situación es diferente cuando hablamos de *transiciones de fase continuas*, donde la longitud de correlación se vuelve efectivamente infinita. Las fluctuaciones se correlacionan entonces sobre todas las escalas de distancia, lo que obliga a todo el sistema a estar en una fase única, una fase crítica. Por lo tanto, en una transición continua, las dos (o más) fases a cada lado del punto crítico deben ser idénticas a medida que se aproximan. Las diferencias en las diversas magnitudes termodinámicas entre las fases que compiten van a cero suavemente en el punto crítico. Ejemplos simples de transiciones de fase continuas, que se describirán con más detalle con posterioridad, se producen a la temperatura de Curie en un ferromagneto y en el punto crítico de gas-líquido en un fluido. El hecho de que un gran número de grados de libertad estén fuertemente correlacionados entre sí hace que el estudio de las transiciones de fase continuas sea intrínsecamente difícil. Por su naturaleza, estos fenómenos no son susceptibles a los métodos perturbativos normales. Sólo en los últimos cincuenta años se han desarrollado métodos analíticos para abordar tales problemas. Estos métodos constituyen una manera totalmente nueva de pensar sobre tales fenómenos, estos reciben el nombre de grupo de renormalización (RG por sus siglas en inglés).

Hay otra clasificación de las transiciones de fase, llamada *Clasificación de Ehrenfest*. Ehrenfest [21] propuso que las transiciones de fase podrían clasificarse como de orden n , si cualquier derivada n de la energía libre con respecto a cualquiera de sus argumentos produce una discontinuidad. Cuando la primera derivada muestra una discontinuidad, está ocurriendo una transición de fase de primer orden. Cuando la segunda derivada exhibe discontinuidades o singularidades, tiene lugar una transición de fase de segundo orden. Sin embargo, el término "transición de fase de segundo orden" es inapropiado, porque la clasificación de Ehrenfest no es correcta. Es preferible usar el término *transición de fase continua* [8]. La clasificación de Ehrenfest fracasa, porque en el momento en el que fue formulada, no se sabía que las cantidades termodinámicas tales como el calor específico divergen en las transiciones continuas, en lugar de exhibir una discontinuidad simple, como implica la clasificación de Ehrenfest. Este problema está relacionado con el fracaso de la aplicabilidad de la teoría de campo medio, que se discutirá más adelante.

1.3. Universalidad, exponentes críticos y propiedades de escala

Aunque los sistemas con grandes longitudes de correlación pueden parecer muy complejos, también muestran algunas hermosas simplificaciones. Uno de ellas es el fenómeno de la universalidad. Cardy [3] menciona que muchas propiedades de un sistema cercano a una transición de fase continua resultan ser, en gran parte, independientes de los detalles microscópicos de las interacciones entre los átomos o moléculas individuales. Esto significa que estas propiedades suelen ser independientes del sistema considerado. En su lugar, caen en uno de un número relativamente pequeño de clases de universalidad. Estas clases se caracterizan solamente por características globales tales como las simetrías del hamiltoniano subyacente, el número de dimensiones espaciales del sistema, y así sucesivamente. El fenómeno de la universalidad encuentra una explicación simple y natural dentro del marco del grupo de renormalización [3].

Según Cardy [3], cerca de un punto crítico la longitud de correlación y las otras magnitudes termodinámicas muestran una dependencia que sigue una ley de potencia en los parámetros que especifican la distancia del punto crítico. Estas potencias, o *exponentes críticos*, son números puros que dependen solamente de la clase de universalidad. Por lo tanto, Cardy [3] señala que dos o más sistemas físicos aparentemente diferentes que comparten exactamente el mismo conjunto de exponentes críticos son parte de la misma clase de universalidad. Uno de los desafíos teóricos básicos es explicar por qué tales potencias no triviales deben ocurrir, y predecir sus valores reales.

De acuerdo con Schwabl [21], la definición general del valor de un exponente crítico de una función $f(T - T_c)$ que no es una ley de potencia pura previa está dada por

$$\text{exponent} = \lim_{T \rightarrow T_c} \frac{d \log f(T - T_c)}{d \log(T - T_c)}. \quad (1.1)$$

La aparición del comportamiento en forma de potencias en las leyes que describen un sistema es un síntoma del comportamiento de escala. En su forma más simple, esto significa que dos cantidades medibles dependen unas de otras en una ley de potencia. En muchas leyes de escalamiento, la ley de potencia, o el exponente es una fracción racional [8]. Un ejemplo familiar es la ley de Kepler, que relaciona el radio R de la órbita circular de un planeta con el período t de la órbita

$$t \propto R^{3/2}. \tag{1.2}$$

A menudo, las leyes de escala pueden deducirse fácilmente del análisis dimensional. Esto explica en parte el hecho de que los fenómenos descritos son tan bien comprendidos, y se enseñan en cursos de física elemental. Sin embargo, existe una clase más amplia de fenómenos en los que se produce el comportamiento de ley exponencial, pero el exponente no es una fracción simple. Goldenfeld [8] enfatiza que esta clase de fenómenos incluye, pero no está restringida a, transiciones de fase donde hay un punto crítico.

Goldenfeld [8] señala que la mayoría de los problemas físicos nos presentan más de una escala de longitud y que el análisis dimensional simple ya no es adecuado. Las cantidades físicas pueden entonces depender de una manera arbitrariamente complicada de las relaciones adimensionales de estas escalas. Sin embargo, las simplificaciones pueden ocurrir si hay una gran separación de escalas en el problema. En ese caso, puede ser permitido descuidar las escalas de longitud más cortas cuando se habla de la física a gran escala. Esto ya ocurre en el problema del movimiento planetario. Donde se puede demostrar que el radio finito de los cuerpos no tiene efecto significativo. Resultados similares se dan en los denominados enfoques *clásicos* al problema de las transiciones de fase continuas [3].

1.4. Parámetro de orden

Como Huang mencionó [11], en el caso de un sistema ferromagnético las dos fases a cada lado de la temperatura crítica tienen simetrías espaciales diferentes. Por encima de la temperatura crítica, donde no hay magnetización, el sistema es invariante bajo rotación. Por debajo de la temperatura crítica, cuando se produce la magnetización espontánea, el vector de magnetización define una dirección preferida en el espacio. Provoca la destrucción de la invariancia bajo rotación. Dado que una simetría está presente o ausente, las dos fases deben ser descritas por diferentes funciones de las variables termodinámicas que no pueden continuar analíticamente a través del punto crítico.

Debido a una reducción de la simetría, se necesita un parámetro adicional para describir la termodinámica de la fase de baja temperatura. El parámetro extra se llama *parámetro de orden* [11]. En el caso de un ferromagneto el parámetro de orden es la magnetización, M . El parámetro de orden suele ser una variable termodiná-

mica extensiva accesible a las mediciones. Por ejemplo, para el caso gas-líquido, el parámetro de orden es la densidad [21].

En general, se entiende que el parámetro de orden es una cantidad que es cero por encima del punto crítico y finito por debajo de él y que caracteriza la estructura o los cambios que se producen en una transición de fase, tal como el valor esperado de los desplazamientos en la red cristalina [21].

La idea básica es que cerca del punto crítico, el parámetro de orden es la única cantidad termodinámica importante. En la mayoría de los ejemplos de comportamiento crítico, es posible identificar uno o más de tales parámetros de orden, y el comportamiento de sus fluctuaciones locales a menudo proporciona una manera útil de caracterizar la naturaleza de una transición [3].

1.5. Ejemplos de transiciones de fase

Queremos enumerar sólo algunos ejemplos entre la multitud de transiciones de fase que se conocen. En el área de sustancias magnéticas, se encuentran anti-ferromagnetos, por ejemplo con dos subredes que tienen direcciones opuestas de magnetización M_1 y M_2 , ferrimagnetos y fases helicoidales. En un antiferromagneto con dos subredes, el parámetro de orden es $N = M_1 - M_2$, la llamada magnetización escalonada. En mezclas líquidas binarias, existen transiciones de separación donde el parámetro de orden caracteriza la concentración. En el caso de transiciones de fase estructurales, la estructura reticular cambia en la transición y el parámetro de orden es dado por el campo de desplazamiento o el tensor de deformación. Ejemplos de ellos son los ferroeléctricos y transiciones distorsionantes, donde el parámetro de orden está dado por la polarización eléctrica P o el ángulo de rotación φ de un grupo molecular. Finalmente, hay transiciones en estados cuánticos macroscópicos, por ejemplo la superfluidez y la superconductividad. Aquí, el parámetro de orden es un campo complejo ψ , la función de onda macroscópica, y la simetría rota es la invariancia de medida con respecto a la fase de ψ . En la transición líquido-sólido, la simetría bajo traslación se rompe y el parámetro de orden es una componente de la transformada de Fourier de la densidad [21].

La tabla 1.1 enumera el parámetro orden y un ejemplo de una sustancia típica para algunas de estas transiciones de fase.

En las siguientes subsecciones describiremos las transiciones de fase en ferromagnetos uniaxiales y fluidos simples con el fin de mostrar rasgos comunes entre ellos. Y, por lo tanto, ilustrar el fenómeno de la universalidad.

Tabla 1.1. Transiciones de fase (puntos críticos), parámetros de orden y sustancias. Fuente: Schwabl, Statistical mechanics, p.337.

Transición de fase (punto crítico)	Parámetro de orden	Sustancia
Paramagneto-ferromagneto (Temperatura de Curie)	Magnetización M	Fe
Paramagneto-antiferromagneto (Temperatura de Néel)	Magnetización escalonada $N = M_1 - M_2$	RbMnF ₃
Gas-líquido (Punto crítico)	Densidad $\rho - \rho_c$	CO ₁
Separación de mezclas binarias de líquidos	Concentración $c - c_c$	Metanol- n-Hexano
Transiciones de orden-desorden	Ocupación de la subred $N_A - N_B$	Cu-Zn
Paraeléctrico-ferroeléctrico	Polarización P	BaTiO ₃
Transiciones estructurales distorsionantes	Ángulo de rotación φ	SrTiO ₃
Transiciones de fase elásticas	Esfuerzo ϵ	KCN
He I-He II (punto Lambda)	Condensado de Bose Ψ	⁴ He
Conductor-superconductor	Amplitud de par de Cooper Δ	Nb ₃ Sn

1.5.1. Ferromagnetos uniaxiales

En un material ferromagnético hay dos parámetros externos interesantes que pueden variar: la temperatura T y el campo magnético aplicado H . En el caso más directo, la magnetización local está limitada a estar paralela o antiparalela a un eje particular. El diagrama de fases es simple, ver figura 1.1. Todas las magnitudes termodinámicas son funciones analíticas continuas de T y H excepto en la línea $H = 0, T \leq T_c$. A través de la línea $T < T_c$, la magnetización M como función de H es discontinua, teniendo la forma ilustrada en la figura 1.2. Esta discontinuidad es característica de una transición de fase discontinua, con una longitud de correlación finita. A medida que T se aproxima al punto Curie T_c desde abajo, la discontinuidad se aproxima a cero y la longitud de correlación diverge. El punto $(H = 0, T = T_c)$ es ejemplo de un *punto crítico final*, en el que la transición de primer orden se vuelve continua.

Cuando $T < T_c$, los dos límites $H \rightarrow 0^+$ y $H \rightarrow 0^-$ dan diferentes valores posibles $\pm M_0$ para la magnetización. El límite que el sistema elija depende de su historia anterior. Este es un ejemplo de *ruptura de simetría espontánea*. El inicio de tal ruptura de simetría es una característica común, pero no universal, de puntos críticos continuos. La magnetización M , cuyos valores miden la cantidad de orden

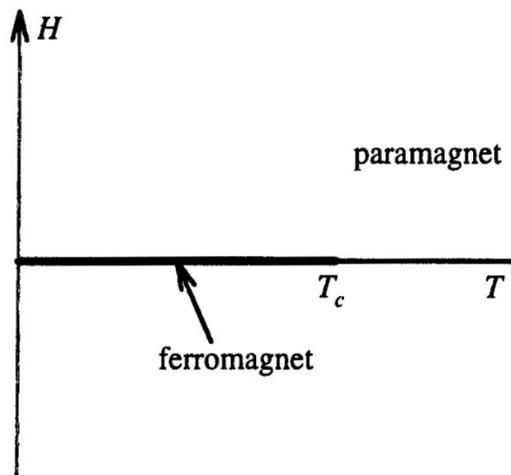


Figura 1.1. Diagrama de fase de un ferromagneto uniaxial. Fuente: J. Cardy, Scaling and renormalization in statistical physics, p.6.

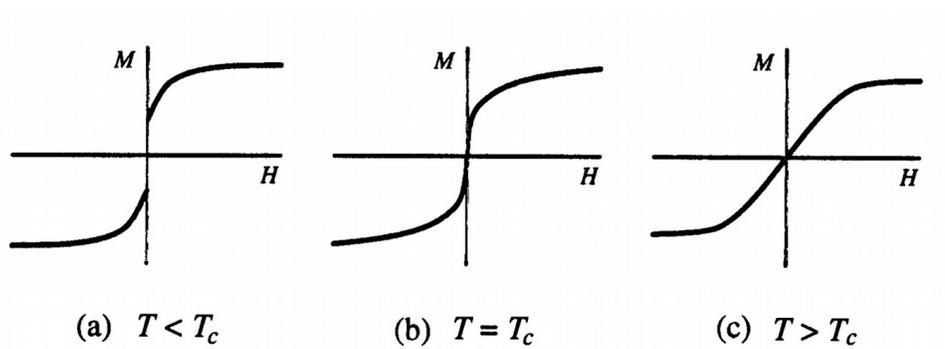


Figura 1.2. Magnetización versus campo aplicado, para varias temperaturas. Fuente: J. Cardy, Scaling and renormalization in statistical physics, p.6.

magnético en el material, es el parámetro de orden para esta transición.

Como se mencionó anteriormente, la mayoría de las cantidades de interés exhiben el comportamiento de una ley de potencia lo suficientemente próximo al punto crítico. Cardy [3] da las definiciones de los principales exponentes críticos que caracterizan estas leyes de potencia para el caso de un ferromagneto. Es útil definir dos medidas adimensionales de la desviación del punto crítico: la temperatura reducida y el campo magnético externo reducido $h = H/k_B T$. Los exponentes son

α : El calor específico en ausencia de un campo magnético tiene la forma

$$C \sim A|t|^{-\alpha}, \quad (1.3)$$

aparte de los términos que son regulares en t . Hay que tener en cuenta que debemos considerar la posibilidad de diferentes exponentes α y α' para $t > 0$ y $t < 0$ respectivamente. Sin embargo, es una consecuencia inmediata del grupo de renormalización que $\alpha = \alpha'$, y en adelante dejaremos de hacer una distinción. α puede ser positivo o negativo, lo que corresponde a un punto de divergencia o discontinuidad en el calor específico cuando se representa en función de T . Aunque el exponente α es universal, la amplitud A no lo es. Y en general $A \neq A'$. Sin embargo, la relación A'/A es universal.

β : La magnetización espontánea es $\lim_{H \rightarrow 0^+} M \propto (-t)^\beta$.

γ : La susceptibilidad en ausencia de un campo magnético es

$$\chi \equiv \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right) \Big|_{H=0} \propto |t|^{-\gamma}, \quad (1.4)$$

Una vez más, en principio se deben definir diferentes exponentes para diferentes signos de t , pero de hecho las teorías indican que deben ser iguales.

δ : Cuando $T = T_c$, la magnetización varía con h de acuerdo a

$$M \propto |h|^{1/\delta}. \quad (1.5)$$

ν : Una medida más cuantitativa de la longitud de correlación ξ que la dada anteriormente es a través del comportamiento asintótico

$$G(r) \propto \frac{e^{-r/\xi}}{r^{(d-1)/2}}, \quad r \gg \xi \quad (1.6)$$

de la función de correlación de las fluctuaciones en la magnetización local. Alternativamente, puede definirse a través del segundo momento de esta cantidad,

$$\xi^2 = \frac{\sum_r r^2 G(r)}{\sum_r G(r)}, \quad (1.7)$$

en cualquier caso, diverge como $t \rightarrow 0$, con $h = 0$, de acuerdo con $\xi \propto |t|^{-\nu}$. Una vez más, esto tiene un significado a cada lado del punto crítico.

Estos son los exponentes comúnmente observados para estos exponentes críticos. Esta nomenclatura ha llegado a ser aceptada por razones históricas. Muchas de las definiciones dadas anteriormente pueden ser tomadas sin modificación al punto de Curie en ferromagnetos más generales. Por ejemplo los imanes de Heisenberg, donde los momentos locales son libres para girar en tres dimensiones [3].

1.5.2. Fluidos simples

El diagrama de fases de una sustancia genérica en el plano temperatura-presión usualmente tiene la forma que se muestra en la figura 1.3. Centrémonos en la parte del diagrama de fases cercana al punto crítico de gas-líquido en (T_c, p_c) . Parece bastante similar a la del ferromagneto en el plano (T, H) . A través del límite de la fase líquido-gas, la densidad ρ es discontinua. El salto en la densidad $\rho_{\text{liquid}} - \rho_{\text{gas}}$ se aproxima a cero en el punto crítico (T_c, p_c) [3].

En la figura 1.4 se esboza una parte del diagrama de fases de un fluido. Los ejes son la temperatura T y la densidad del fluido ρ . La curva se muestra en el plano de presión fija P . Por debajo de la temperatura crítica o de transición T_c se encuentra la curva de coexistencia. Esto tiene la siguiente interpretación. Por debajo de T_c , a medida que aumenta la densidad a una temperatura fija, no es posible pasar de una fase gaseosa a una fase líquida sin pasar por un régimen en el que el recipiente del fluido contenga una mezcla de gas y líquido. Por encima del punto crítico, es posible pasar continuamente de un gas a un líquido a medida que aumenta la densidad a temperatura constante. En este caso, no existe densidad en la que pueda coexistir una mezcla de líquido y gas en el recipiente. Observe que incluso comenzando debajo de T_c siempre es posible pasar de un líquido a un gas sin pasar por ninguna región de dos fases. Sólo tenemos que elevar la temperatura por encima de T_c , reducir la densidad y luego bajar la temperatura por debajo de T_c . Esto sugiere que no existe una manera real de distinguir entre un líquido y un gas.

Las isothermas, es decir, las curvas de p versus ρ a T constante, se ilustran en la

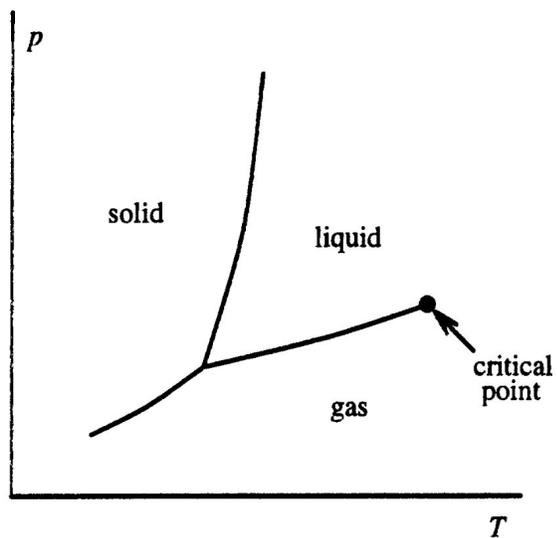


Figura 1.3. Diagrama de fase de una sustancia típica. Fuente: J. Cardy, Scaling and renormalization in statistical mechanics, p.9.

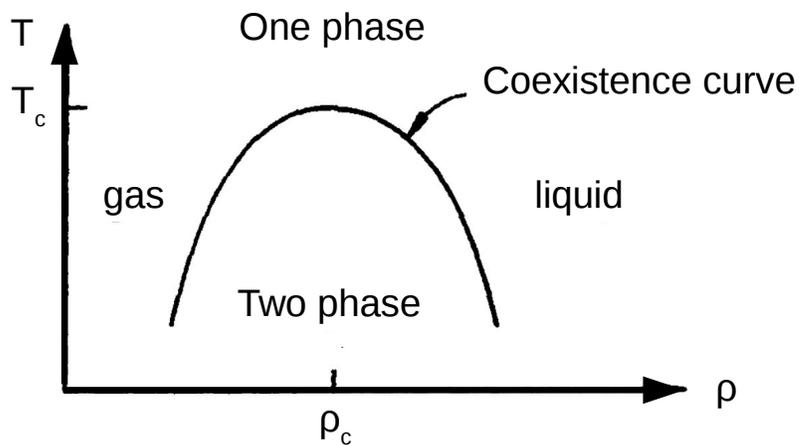


Figura 1.4. Diagrama de fase de un fluido a presión fija. Fuente: Goldenfeld, Lectures on phase transitions, p.8.

figura 1.5. Comparando esto con los gráficos de la magnetización en un ferromagneto mostrado en la figura 1.2, vemos que $p - p_c$ es análoga a la H aplicada. Además, también observamos que $\rho - \rho_c$ juega el papel de la magnetización M . La principal diferencia física entre los sistemas es que en un fluido la densidad promedio general suele ser fija. Esto significa que debajo de la curva de coexistencia mostrada en la figura 1.5, el sistema se separa en dos fases coexistentes. El volumen relativo de cada fase está determinado por sus densidades y sus masas totales. Sin embargo, para un imán la magnetización total no suele ser fijada por las condiciones del experimento [3].

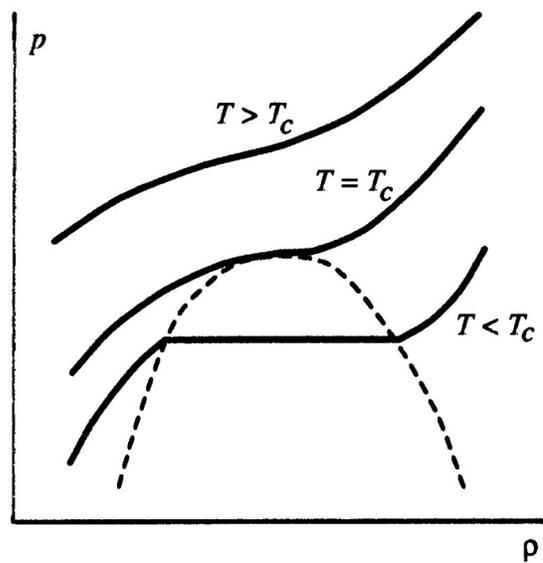


Figura 1.5. Isothermas cerca del punto crítico líquido-gas. La línea segmentada es la curva de coexistencia. Fuente: J. Cardy, *Scaling and renormalization in statistical mechanics*, p.9.

Por lo tanto, los exponentes críticos en el punto crítico de gas líquido se definen por analogía con los del imán:

- $C_V \propto |t|^{-\alpha}$ a $\rho = \rho_c$.
- $\rho_{liquid} - \rho_{gas} \propto (-t)^\beta$ da la forma de la curva de coexistencia cerca del punto crítico.
- La compresibilidad isotérmica está dada por $\xi_T \propto |t|^\gamma$.
- $p - p_c \propto |\rho_L - \rho_G|^\delta$ da la forma de la isoterma crítica cerca del punto crítico.

Uno de los resultados más notables de la universalidad es que los exponentes críticos de un fluido simple son idénticos a los de los ferromagnetos uniaxiales. En la vecindad de los puntos críticos, la topología de los diagramas de fase de tales sistemas son asombrosamente similares.

La razón de este notable resultado radica en la divergencia de la longitud de correlación

$$\xi = \xi_0 \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)^\nu. \quad (1.8)$$

Al aproximarse a T_c , la longitud de correlación se convierte en la única escala de longitud relevante del sistema, que a grandes distancias domina todas las escalas microscópicas. Aunque la transición de fase es causada por regla general por las interacciones de corto alcance de los constituyentes microscópicos, debido a las fluctuaciones de largo alcance, la dependencia de los detalles microscópicos es secundaria. En la región crítica, el sistema se comporta colectivamente y solo las características globales como su simetría juegan un papel. Esto hace que el comportamiento universal sea comprensible.

1.6. Transiciones de fase cuánticas

Considere un hamiltoniano, \mathcal{H} que varía en función de una constante de acoplamiento J (que se define a continuación). Sigamos la evolución del estado fundamental de \mathcal{H} en función de J . Si la energía del estado fundamental presenta algún punto donde no sea analítica podemos identificar una transición de fase cuántica. La transición de fase suele ir acompañada de un cambio cualitativo en la naturaleza de las correlaciones en el estado fundamental. En otras palabras, las transiciones de fase cuántica son transiciones de fase que son impulsadas por fluctuaciones cuánticas [19]. Describir el cambio en las correlaciones es uno de los principales intereses de la física de la materia condensada [17].

Como en las transiciones de fase clásicas, podemos encontrar transiciones de fase discontinuas y continuas. La primera se produce cuando la primera derivada de un parámetro como la energía del estado fundamental presenta una discontinuidad. En el caso de una transición de fase continua o de segundo orden, la escala de energía característica de las fluctuaciones por encima de los estados fundamentales desaparece cuando J se aproxima a J_c . Además, las transiciones de fase de segundo orden tienen invariablemente una longitud de correlación divergente, ξ .

Es importante notar que la discusión anterior se refiere a singularidades en el *estado fundamental* del sistema. Estrictamente hablando, las transiciones de la fase cuántica ocurren solamente a la temperatura cero, es decir $T = 0K$. Todos los experimentos están necesariamente en una temperatura no cero, aunque posiblemente muy pequeña. Por lo tanto, una tarea central de la teoría de las transiciones de fases cuánticas es describir las consecuencias de esta singularidad a $T = 0K$ sobre las propiedades físicas en $T > 0K$. Resulta que trabajar fuera del punto crítico cuántico en $J = J_c$ y $T = 0$, es una poderosa manera de entender y describir las propiedades termodinámicas y dinámicas de muchos sistemas. Estos sistemas pueden tener una amplia gama de valores de $J - J_c$ y T .

1.6.1. Diagrama de fase a temperatura cero

Para ciertos sistemas, es posible obtener el espectro completo de energía del hamiltoniano. Es decir, conocemos la configuración que minimiza la energía, la configuración que corresponde al primer estado excitado del sistema, etc. En el caso del modelo de Heisenberg a $T = 0K$, cuando se modifica la constante de intercambio, J por una pequeña cantidad, en general todos los niveles de energía también cambian. Por lo tanto, los niveles de energía pueden expresarse como una función de la constante de intercambio, como se muestra en la figura 1.6. Puede ocurrir que a medida que J pasa a través de un conjunto de valores, el primer estado excitado y el estado fundamental se cruzan: la energía del sistema está ahora minimizada por una configuración que correspondía previamente a un estado excitado del sistema [8]. Esto normalmente generará una transición de fase cuántica discontinua o de primer orden, porque habrá una discontinuidad o punto donde la curva no es analítica en $\partial E/\partial J_i$, como se muestra en la figura 1.6.

Este mecanismo para una transición de fase a temperatura cero se conoce como *cruce de niveles* [8]. Se debe tener en cuenta que no es necesario tomar el límite termodinámico para lograr una transición de fase a temperatura cero mediante este mecanismo. El comportamiento no analítico ocurre en este caso no es porque $N \rightarrow \infty$, sino porque $\beta \rightarrow \infty$.

1.6.2. Transiciones de fase cuánticas vrs transiciones de fase clásicas

Hay dos posibilidades importantes para el diagrama de fases $T > 0$ de un sistema cerca de un punto crítico cuántico. Estas se muestran en la figura 1.7. En la

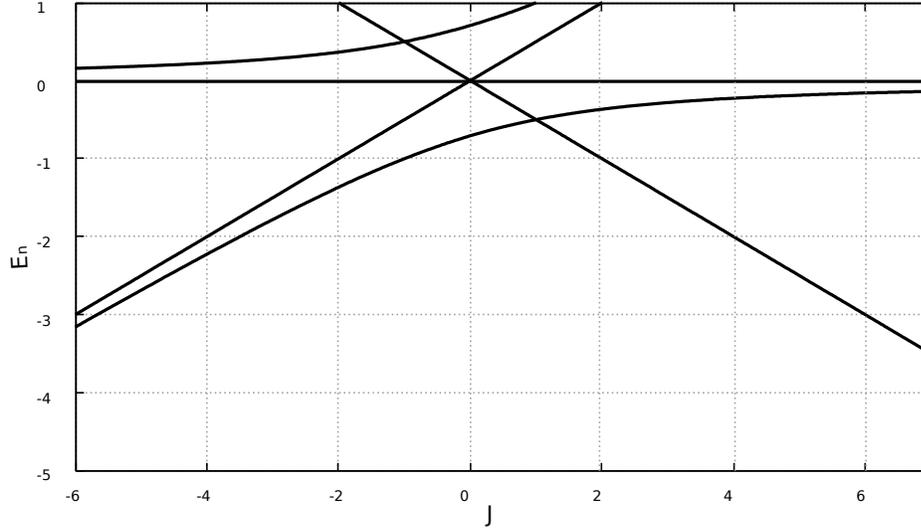


Figura 1.6. Trancisión de fase a temperatura cero por cruce de niveles. El n -ésimo nivel de energía como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia.

primera, representada en la figura 1.7 a, la singularidad termodinámica está presente solamente en $T = 0$, y todas las propiedades $T > 0$ son analíticas en función de J cerca de $J = J_c$. En el segundo, ilustrado en la figura 1.7 b, hay una línea de transiciones de fase continua $T > 0$ que termina en el punto crítico cuántico $T = 0$ a $J = J_c$. Esta es una línea en la que la energía termodinámica libre no es analítica. En la vecindad de tal línea, encontraremos que la frecuencia típica a la cual fluctúan los grados importantes de la libertad de la distancia, ω_{typ} . Esta frecuencia satisface

$$\hbar\omega_{\text{typ}} \ll k_B T. \quad (1.9)$$

Figura 1.7. Dos posibles diagramas de fase de un sistema cercano a una transición de fase cuántica. En ambos casos hay un un punto crítico cuántico a $J = J_c$ y $T = 0K$. Fuente: S. Sachdev, Quantum phase transitions, p.6.

Bajo estas condiciones, se verá que una descripción puramente clásica puede aplicarse a estos importantes grados de libertad. Esta descripción clásica funciona en la región sombreada de la figura 1.7 b. En consecuencia, la singularidad crítica a lo largo de la línea de transiciones de fase a $T > 0$ es descrita por la teoría de transiciones de fase continuas o de segundo orden en sistemas clásicos. Observe que la región sombreada del comportamiento clásico en la figura 1.7 b está dentro de la ventana más ancha del diagrama de fases. Cuando esta región tiene valores moderados de $|g - g_c|$ y T , puede describirse como una expansión alrededor del punto crítico cuántico en $g = g_c$ y $T = 0$. Así, el estudio de las transiciones de fase cuántica también se aplicará a la región sombreada de la figura 1.7 b, donde proporcionará información que es complementaria a la disponible pensando directamente en la transición de fase $T > 0$ en términos puramente de modelos clásicos.

Observamos que las transiciones de fase en modelos clásicos son impulsadas sólo por fluctuaciones térmicas, ya que los sistemas clásicos suelen congelarse en un estado fundamental sin fluctuación a $T = 0$. Por el contrario, los sistemas cuánticos tienen fluctuaciones impulsadas por el principio de incertidumbre de Heisenberg incluso en el estado fundamental. Estas fluctuaciones pueden impulsar interesantes transiciones de fase a $T = 0$. La región $T > 0$ en la vecindad de un punto crítico cuántico, por lo tanto, ofrece una fascinante interacción de efectos impulsados por las fluctuaciones cuánticas y térmicas. A veces, como en la región sombreada de la figura 1.7 b, podemos encontrar algunos grados de libertad dominantes y efectivos cuyas fluctuaciones son puramente clásicas y térmicas. Por lo tanto, la teoría clásica se aplicará en regiones como esta.

2. EL MODELO DE HEISENBERG EN SISTEMAS CUÁNTICOS DE ESPIN EN 1D

Dado que el momentum magnético de un solo átomo está estrechamente asociado con su momentum angular o espín, necesitamos estudiar espines para poder entender el magnetismo de forma macroscópica. A nivel atómico, las propiedades de los átomos se describen en términos de la mecánica cuántica. Por lo tanto, tenemos que estudiar los espines cuánticos y sus interacciones [15].

Los sistemas de espín cuántico normalmente se aparecen por primera vez cuando estudiamos magnetismo. Un imán muestra propiedades como la atracción de objetos metálicos, porque está formado por átomos que son, o algunos de ellos son, imanes diminutos. Se producen los efectos observados cuando la totalidad o la mayoría de estos imanes atómicos se alinean en la misma dirección, de modo que el efecto neto es la suma de todos los imanes individuales y es, por tanto, de escala macroscópica [15]. Para que estos imanes atómicos se alineen debe haber una fuerza entre ellos. Una posibilidad para esta fuerza es la interacción de dipolo magnético normal que puede producir una tendencia para que dos dipolos magnéticos se alineen ya sea de forma paralela o antiparalela. Además, los espines pueden alinearse en un ángulo arbitrario, dependiendo de sus posiciones relativas. Esta es una interacción de largo alcance que se extiende a lo largo de muchos espacios atómicos. Sin embargo, resulta que la interacción del dipolo magnético es demasiado débil para explicar el fenómeno del magnetismo a temperatura ambiente. Si esta fuera la única interacción posible, el magnetismo a escala macroscópica sólo se produciría a temperaturas muy bajas. En esta situación, las temperaturas estarían cerca del cero absoluto, donde las fluctuaciones térmicas son muy débiles y no lo suficientemente fuertes como para interrumpir el ordenamiento. [15].

2.1. Interacción de intercambio

Todos los materiales magnéticos tienen sus imanes atómicos alineados por medio de la interacción de intercambio. Esto es una consecuencia directa del principio de exclusión de Pauli y se debe básicamente a las fuerzas eléctricas entre los electrones en los átomos en lugar de las fuerzas magnéticas. Dado que las fuerzas de origen eléctrico son mucho más fuertes que las de origen magnético a escala atómica esto explica por qué la interacción de intercambio es lo suficientemente potente como para permitir el magnetismo a una escala macroscópica incluso a temperatura ambiente. La interacción de intercambio tiene una forma mucho más simple que la interacción dipolo magnético. Además, tiene un alcance muy corto, dependiendo de la superposición de las funciones de onda atómica. Estos dos hechos lo hacen más fácil de manejar que una interacción dipolo magnético.

En el caso más simple de la interacción de intercambio entre dos partículas con espines S_1 y S_2 , la interacción tiene la forma [15]

$$\varepsilon = \alpha S_1 \cdot S_2 + \beta S_1^z S_2^z, \quad (2.1)$$

donde ε es la energía de interacción entre las dos partículas. Parkinson y Farnell [15] mencionaron que el caso especial $\alpha = J$, $\beta = 0$ se llama interacción isotrópica de Heisenberg. Y también, que el caso especial $\alpha = 0$, $\beta = J$ se llama interacción de Ising. Según Parkinson y Farnell [15], tanto los casos especiales como el caso más general han sido ampliamente estudiados. En particular, el modelo de Ising ha sido resuelto analíticamente en 1D y 2D bajo ciertas condiciones. Más detalles sobre estas soluciones se pueden encontrar en [4]. Sin embargo, en este trabajo nos centraremos en el modelo de Heisenberg.

El ferromagnetismo y el antiferromagnetismo son fenómenos basados en variaciones de la interacción de intercambio [21]. En cualquier caso, si la constante de intercambio es negativa, se obtiene la energía más baja cuando los vectores de espín son paralelos. Esto en un sólido lleva al ferromagnetismo. Por debajo de la temperatura de Curie T_c , se produce una magnetización espontánea dentro del sólido, ver figura 2.1 a. Por otra parte, cuando la constante es positiva, se prefiere una orientación de espín antiparalela, como se muestra en la figura 2.1 b. La alineación antiparalela da lugar a antiferromagnetos, que no tienen un momento magnético macroscópico neto. Debajo de la temperatura de Néel T_N , ocurre un orden magnético alternado (escalonado) [21]. Para el caso de Heisenberg no hay ningún eje de alineación favorecido, pero para el caso de Ising la alineación favorecida está a lo

largo del eje z .

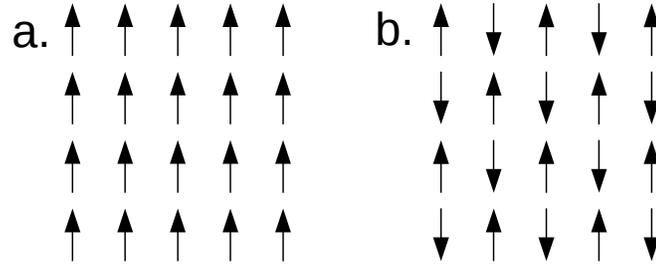


Figura 2.1. Arreglos de espines ilustrando posibles ordenamientos (a) ferromagnéticos y (b) antiferromagnéticos. Fuente: elaboración propia

2.2. Momentum Angular

En esta sección damos el resumen de algunos resultados importantes sobre el momentum angular que son necesarios para un estudio de sistemas de spin cuántico. Vamos a presentar el enfoque seguido por Parkinson y Farnell en [15].

Hay dos tipos de momentum angular que ocurren en la naturaleza. La primera de ellas, en su forma clásica, es familiar desde los primeros días del magnetismo y surge del movimiento relativo a algún eje. Esto se llama *momento angular orbital*.

En la mecánica cuántica usualmente nos topamos con el momento angular orbital cuando estudiamos los estados propios de la ecuación de Schrödinger (ES) para el átomo de hidrógeno. Las partes angulares de estos, usando coordenadas polares esféricas, tienen la forma

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = C_{l,m} P_l^m(\theta) e^{im\phi}, \quad (2.2)$$

donde P_l^m son los polinomios de Legendre, y $C_{l,m}$ es una constante de normalización.

Estas partes angulares de los estados propios de la ES independiente del tiempo tienen otro significado. También son estados propios de los operadores de momentum angular. En la mecánica cuántica el operador del momentum angular tiene la misma forma que en la mecánica clásica, está escrito como

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (2.3)$$

Estos operadores tienen los conmutadores

$$[L^a, L^b] = i\hbar\epsilon_{abc}L^c, \quad (2.4)$$

conocidas como *relaciones de conmutación fundamentales del momentum angular* [18]. Dos de los operadores más útiles son L^z y $L^2 = (L^x)^2 + (L^y)^2 + (L^z)^2$. Esto se debe a que los $Y_{l,m}$ son eigenestados de ambos simultáneamente. Es posible encontrar estados que son eigenestados simultáneos de los operadores siempre que los operadores conmuten.

$$[L^z, L^2] = 0. \quad (2.5)$$

Los valores propios o eigenestados están dados por

$$\begin{aligned} L^z Y_{l,m} &= m\hbar Y_{l,m}, \\ L^2 Y_{l,m} &= l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Hay dos operadores que tienen propiedades útiles, estos están definidos como

$$\begin{aligned} L^+ &= L^x + iL^y, \\ L^- &= L^x - iL^y. \end{aligned} \quad (2.7)$$

De estas definiciones se tiene que

$$[L^-, L^+] = 2\hbar L^z \quad (2.8)$$

y puede ser demostrado que

$$L^+ Y_{l,m} = 0, \quad \text{if } m = l. \quad (2.9)$$

Sin embargo, si $m < l$, entonces

$$\begin{aligned} L^z(L^+ Y_{l,m}) &= (m+1)\hbar(L^+ Y_{l,m}), \\ L^2(L^+ Y_{l,m}) &= l(l+1)\hbar^2(L^+ Y_{l,m}). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Esto significa que $L^+ Y_{l,m}$ es también un eigenestado de L^z y L^2 . Claramente L^+ convierte $Y_{l,m}$ en $Y_{l,m+1}$, multiplicado por una constante y recibe el nombre de *operador creador*. De forma similar, L^- convierte $Y_{l,m}$ en $Y_{l,m-1}$, multiplicado por

una constante y se conoce como *operador aniquilador*. Esto puede escribirse

$$\begin{aligned} L^+ Y_{l,m} &= A Y_{l,m+1}, \\ L^- Y_{l,m} &= B Y_{l,m-1}. \end{aligned} \tag{2.11}$$

El segundo tipo de momentum angular que ocurre en la naturaleza es el espín intrínseco de las partículas elementales. Esta es una propiedad fundamental de una partícula. A menudo se piensa que es debido al espín interno de una partícula, de ahí el nombre. Sin embargo, esto no es correcto ya que se cree que una partícula elemental es una partícula puntual sin estructura interna.

El momentum angular de espín tiene la mayoría de las propiedades del momentum angular orbital, pero también algunas propiedades especiales. Para el presente trabajo usaremos S para el momentum angular de espín en lugar de L . Nuevamente podemos usar los estados propios de S^z y S^2 con los mismos números cuánticos l y m tal que

$$\begin{aligned} S^z |l, m\rangle &= m\hbar |l, m\rangle, \\ S^2 |l, m\rangle &= l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle. \end{aligned} \tag{2.12}$$

Claramente el eigenestado de espín $|l, m\rangle$ se comporta aquí justo como el eigenestado orbital $Y_{l,m}$, pero hay dos diferencias fundamentales:

1. $|l, m\rangle$ no tiene una forma explícita en términos de θ y ϕ como $Y_{l,m}$.
2. l puede ser un entero, como antes, o un múltiplo de $+\frac{1}{2}$, a veces llamado *medio entero*.

Los valores de m siguen siendo diferentes por unidad y siguen tomando todos los valores entre $-l$ y $+l$, pero si l es un entero $+\frac{1}{2}$ entonces también son los valores de m . Por ejemplo, si $l = \frac{3}{2}$ entonces los valores posibles de m son

$$\left\{ -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right\},$$

y si tenemos $l = \frac{1}{2}$ entonces los valores de m pueden ser

$$\left\{ -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}.$$

También tenemos los operadores S^+ y S^- correspondientes a L^+ y L^- y con las mismas propiedades que antes, estos son

$$S^+|l, m\rangle = 0, \quad \text{if } m = l, \quad (2.13)$$

mientras que para

$$\begin{aligned} S^z(S^+|l, m\rangle) &= (m + 1)\hbar(S^+|l, m\rangle), \\ S^2(S^+|l, m\rangle) &= l(l + 1)\hbar^2|l, m\rangle, \end{aligned} \quad (2.14)$$

hay resultados similares para $S^-|l, m\rangle$.

Para el momento angular orbital de un electrón en un átomo de hidrógeno, son posibles estados aquellos con l diferentes, cada uno de los cuales tiene varios valores posibles de m . Para el momento angular del espín, el valor de l es fijo (es una propiedad fundamental de la partícula), por ejemplo $l = 1/2$ para un electrón y un entero para un bosón. La única diferencia entre eigenstates es el valor de m .

En los materiales magnéticos, el momento magnético de un átomo puede deberse a una combinación de espín y momentum angular orbital. El momento magnético real es una función simple pero no trivial de dos tipos. Parkinson y Farnell [15] mencionan que, por lo general, se describe en términos del factor geométrico del átomo o ión que varía entre 1 y 2. Para el momentum angular orbital puro, este factor es 1 y para momentum angular de espín es 2. Sin embargo, siempre tomaremos el momento angular para tener un valor fijo de l , es decir, *la magnitud*, pero permitimos que m , es decir, *la orientación* varíe. Por esta razón usualmente nos referimos al momento angular de un átomo magnético como un espín y usamos el símbolo S , incluso cuando es una combinación de ambos tipos [15].

Ahora presentamos el caso de un *espín 1/2 sencillo*. Para un solo espín 1/2 el valor de l es $\frac{1}{2}$. El valor de m puede ser $\frac{1}{2}$ o $-\frac{1}{2}$, por lo que hay dos estados propios de S^z

$$|l, m\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \quad \text{or} \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle. \quad (2.15)$$

Algunas notaciones alternativas abreviadas son

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &\equiv |\uparrow\rangle, \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &\equiv |\downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{2.16}$$

Estos dos eigenestados forman un conjunto completo de un solo espín 1/2, por lo que un estado arbitrario puede ser escrito

$$|\psi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle. \tag{2.17}$$

Los eigenestados están normalizados y son ortogonales:

$$\begin{aligned} \langle \uparrow | \uparrow \rangle &= \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1 \\ \langle \uparrow | \downarrow \rangle &= 0. \end{aligned} \tag{2.18}$$

A partir de ahora trabajaremos en unidades en las que \hbar tenga el valor 1. Por lo tanto

$$\begin{aligned} S^z |\uparrow\rangle &= \frac{1}{2} \hbar |\uparrow\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, \\ S^z |\downarrow\rangle &= -\frac{1}{2} \hbar |\downarrow\rangle = -\frac{1}{2} |\downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{2.19}$$

También tenemos

$$\begin{aligned} S^+ |\uparrow\rangle &= 0, \\ S^- |\downarrow\rangle &= 0, \end{aligned} \tag{2.20}$$

y

$$\begin{aligned} S^+ |\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle, \\ S^- |\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{2.21}$$

2.3. Interacción de próximos vecinos

Un cristal magnético consta de una gran matriz con un gran número de átomos N . Sin embargo, la interacción de intercambio es normalmente de un rango muy corto. Una aproximación simple, pero que es exacta para muchos cristales, es asumir que los sólo vecinos más próximos en el arreglo interactúan.

Según Parkinson y Farnell [15], los tipos más simples de arreglo son:

- **3D cubo simple.** En este caso el espín localizado en A interactúa con el que está en B , C y D . Pero no con el que está en E o F . Ver figura 2.2.
- **2D cuadrado.** El espín situado en A interactúa con el espín en B y D , pero no con ese en C . ver figura 2.3.
- **1D cadena** El espín en A interactúa con el espín en B , pero no con el espín en C . Ver figura 2.4.

Las diferencias entre la mecánica cuántica y el comportamiento clásico son más marcadas para valores de espín bajos y para dimensiones bajas [15]. Por estas razones, y también porque es el más manejable matemáticamente, vamos a estudiar la cadena de espín de Heisenberg con interacciones de intercambio entre vecinos más cercanos.

2.4. Condiciones de frontera

Existen dos topologías posibles para una cadena 1D: abierta o cerrada. Si tomamos en cuenta de las interacciones vecino-vecino, el hamiltoniano espín que describe una cadena abierta consta de N sitios es dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^{N-1} \mathcal{H}_{n,n+1}. \quad (2.22)$$

El hamiltoniano que describe una cadena cíclica cerrada de N sitios puede escribirse como

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^{N-1} \mathcal{H}_{n,n+1} + \mathcal{H}_{N,1}. \quad (2.23)$$

En este trabajo emplearemos la ecuación (2.23) porque estamos interesados en sistemas con condiciones de contorno periódicas. La ecuación (2.23) se puede

interpretar de la siguiente manera: Los extremos de la cadena se unen de manera que el átomo en la posición N sea el vecino más cercano del primero así como del que está ubicado en $(N - 1)$. Por lo tanto, la topología de una cadena cerrada es la de un círculo, ver figura 2.5. Por supuesto, la cadena no está realmente curvada para lograr esto. Es un dispositivo puramente matemático que asegura que no hay *bordes* de los que preocuparse. En cualquier caso, en el límite $N \rightarrow \infty$ la curvatura tendería a cero [15].

Otro ejemplo de la topología que se pueden obtener tomando condiciones de contorno periódicas es el de un retículo cuadrado, ver figura 2.6. En este caso, la topología de la configuración toma la forma de un toro.

2.5. Modelo de Heisenberg

El modelo de Heisenberg es un modelo de mecánica estadística utilizado en el estudio de puntos críticos y transiciones de fase de sistemas magnéticos, en el cual los espines de los constituyentes magnéticos son tratados bajo argumentos de la mecánica cuántica. El modelo de Heisenberg describe un sistema que consiste en un conjunto de espines cuánticos S que se localizan en N sitios de una red y que experimentan una interacción de intercambio entre sí.

Nosotros consideramos que las partículas se encuentran bajo una interacción de intercambio de Heisenberg. Esta es eléctrica y normalmente es más fuerte que una interacción magnética.

Bajo este supuesto el hamiltoniano puede ser escrito en la forma [21]

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{j,j'}^N J_{j,j'} S_j \cdot S_{j'}, \quad (2.24)$$

donde la interacción de intercambio entre los espines en los sitios de red j y j' ha sido denotada por $J_{j,j'}$. La suma corre sobre todos los j y j' , por lo que el factor $1/2$ garantiza que cada par de espines se cuenta sólo una vez en (2.24). Dado que sólo se tienen productos escalares de vectores de espín, se tiene la siguiente propiedad importante: \mathcal{H} es invariante con respecto a una rotación común de todos los vectores de espín. No se distingue especialmente ninguna dirección y por lo tanto el orden ferromagnético que puede ocurrir puede apuntar en cualquier dirección arbitraria. La dirección preferida por el sistema está determinada por energías de anisotropía pequeñas o por un campo magnético externo [21]. Es importante mencionar que cuando el sistema es 1D, el orden ferromagnético o antiferromagnético sólo ocurre

a temperatura cero.

Si sólo se toman en cuenta las interacciones entre vecinos más cercanos, el hamiltoniano (2.24) puede ser reescrito como

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N J^x S_j^x S_{j+1}^x + J^y S_j^y S_{j+1}^y + J^z S_j^z S_{j+1}^z. \quad (2.25)$$

2.5.1. Variantes del modelo de Heisenberg

Dependiendo de los valores que toma la constante de interacción de intercambio, es posible obtener diferentes variantes del modelo de Heisenberg, algunas de ellas son

- Modelo XX: $J_x = J_y$ y $J_z = 0$.
- Modelo XXX: $J_x = J_y = J_z$.
- Modelo XXZ: $J_x = J_y \neq J_z$.

Por simplicidad es conveniente expresar a los últimos hamiltonianos en términos de los operadores escalera

$$S^\pm = S^x \pm iS^y. \quad (2.26)$$

2.5.1.1. Modelo de Heisenberg XX

El hamiltoniano que describe la dinámica de una cadena de Heisenberg XX está dado por

$$\mathcal{H}_{XX} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N J(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y), \quad (2.27)$$

usando (2.26), el modelo XX se puede reescribir como

$$\mathcal{H}_{XX} = -\frac{1}{4} \sum_{j=1}^N J(S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+). \quad (2.28)$$

Es importante mencionar que en una dimensión a $T = 0K$, este modelo no presenta ninguna transición de fase cuántica, como se demostró en [4].

2.5.1.2. Modelo de Heisenberg XXX

Este modelo es también conocido como el *modelo de Heisenberg isotrópico*, es la cadena magnética integrable más simple [14]. En este caso el hamiltoniano que describe la dinámica del sistema está dado por

$$\mathcal{H}_{XXX} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N J(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + S_j^z S_{j+1}^z). \quad (2.29)$$

En términos de los operadores escalera estos se pueden expresar como

$$\mathcal{H}_{XXX} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N J \left[S_j^z S_{j+1}^z + \frac{1}{2} (S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+) \right]. \quad (2.30)$$

En un trabajo anterior [4], se encontró que un sistema descrito por este Hamiltoniano presenta una transición cuántica de fase en el punto crítico $J = 0$. Para $J < 0$ el sistema se encuentra en una fase antiferromagnética. Para $J > 0$ se encontró que existe una coexistencia de las fases antiferromagnética y ferromagnética.

2.5.1.3. Modelo de Heisenberg XXZ

Este modelo también se llama el modelo de Heisenberg *anisotrópico*. En este caso $J = J_x = J_y \neq J_z$. El hamiltoniano que describe la dinámica de una cadena de spin Heisenberg XXZ está dado por

$$\mathcal{H}_{XXZ} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z), \quad (2.31)$$

donde $\Delta \in \mathbb{R}$ es una constante numérica dada por J_z/J . En términos de (2.26), este último hamiltoniano puede expresarse como

$$\mathcal{H}_{XXZ} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left[\Delta S_j^z S_{j+1}^z + \frac{1}{2} (S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+) \right]. \quad (2.32)$$

El significado de (2.31) en la teoría del ferromagnetismo y del antiferromagnetismo es muy bien conocida. De acuerdo con Yang y Yang [23], es el problema a considerar para un gas de retículo cuántico. En particular, la energía del estado fundamental y las propiedades termodinámicas del sistema descrito por (2.31) pueden transformarse para dar la energía de estado fundamental y las propiedades termodinámicas de un gas de retículo cuántico. Este gas de retículo cuántico es un gas Bose que se mueve sobre una red con:

1. Una energía cinética cuántica, no en forma de un operador $(-\hbar^2/2m)\nabla^2$, sino en forma de una doble diferencia.
2. Un modelo de núcleo duro que evita que dos átomos ocupen el mismo sitio.
3. Una energía de interacción igual a -2Δ para los vecinos más cercanos.

Además, también se sabe un sistema unidimensional descrito por este modelo, presenta una transición de fase cuántica cuando $T = 0K$ y $\Delta = 1$, desde una fase antiferromagnética hasta la fase ferromagnética [4].

Se puede encontrar más información sobre las propiedades del hamiltoniano (2.31) para una cadena cíclica unidimensional en una serie de documentos de Yang y Yang [23] [24] [25].

2.5.2. Parámetro de orden para el modelo de Heisenberg

En el caso del modelo de Heisenberg con el hamiltoniano dado por la ecuación (2.24), cada sitio en una red tiene un vector de espín de magnitud constante pero de dirección variable. Cuando un sistema de dos o más dimensiones se ordena por debajo de T_c , la magnetización no es cero y apunta en una dirección arbitraria \hat{n} .

$$M = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle = \begin{cases} 0 & T > T_c, \\ M\hat{n} & T < T_c. \end{cases} \quad (2.33)$$

Dado que M es un vector en tres dimensiones, el parámetro de orden tiene 3 componentes. El Hamiltoniano en un campo externo cero tiene simetría $O(3)$, lo que significa que

$$\mathcal{H}\{S_i\} = \mathcal{H}\{RS_i\}, \text{ for } H=0, \quad (2.34)$$

donde R es una *matriz de rotación* arbitraria en tres dimensiones, actuando sobre todos los $\{S_i\}$. El hamiltoniano en ausencia de un campo magnético es invariante bajo esta *rotación global arbitraria en el espacio de spin* porque sólo depende del producto escalar de S_j y S_{j+1} , es decir, el ángulo entre ellos. Hay que tener en cuenta que R rota todos los espines en la misma cantidad. No hace girar la red en la que están los espines. En el campo cero, la simetría $O(3)$ del modelo de Heisenberg se rompe espontáneamente por $T < T_c$ [8].

Cuando $H \neq 0$, el hamiltoniano todavía es invariante ante rotaciones de los espines en el plano perpendicular a H .

Nuestro trabajo se centra en cadenas de espín $1/2$ a $T = 0K$, donde el único orden que se produce es ferromagnético o antiferromagnético. Por lo tanto, tenemos que definir un parámetro de orden que nos ayude a distinguir entre las dos fases posibles. Si el sistema se encuentra en una fase antiferromagnética, la magnetización total de la cadena resulta ser cero. Si el sistema está en una fase ferromagnética, todos los espines y por lo tanto la magnetización tiene un valor finito. En este caso, la magnetización se define como:

$$M = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle. \quad (2.35)$$

2.5.3. Cadenas de Heisenberg de espín $1/2$ con interacciones de próximos vecinos

La cadena de espines de Heisenberg es un modelo importante en física. Simplemente formula y describe sistemas reales que son experimentalmente accesibles. Además, tiene una estructura matemática rica y elegante. Es también el prototipo de todos los modelos integrables y tiene una estrecha conexión con la teoría de campos integrables y conformes [14].

Una cadena de espín $1/2$ cuántica es un sistema cuántico 1D que consta de dos o más partículas, cada una de las cuales tiene un espín $1/2$, ver figura 2.7. La dinámica de tales sistemas bajo condiciones dadas se puede estudiar con diferentes modelos, como el modelo de Heisenberg (2.24).

En nuestro trabajo nos centraremos en cadenas de Heisenberg con espín $1/2$, con interacciones de próximos vecinos y con condiciones de frontera periódicas; ya que la matemática se simplifica con estas consideraciones. A modo de ilustración, formularemos la cadena XXX de Heisenberg con espín $1/2$, primero consideraremos dos sitios y finalmente una cadena de N sitios, siguiendo las ideas de Nepomechie [14].

2.5.3.1. Dos sitios

La noción de producto tensorial entre matrices o *producto kronecker* (\otimes) es fundamental en la construcción del hamiltoniano.

Una base para los observables consiste en la matriz identidad \mathbb{I} y los operadores S^z , S^+ y S^- [14]. Tomando $\hbar = 1$, los tres últimos operadores se pueden escribir como

$$S^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

$$S^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

$$S^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

Para el problema de dos sitios, los observables son los operadores de espín en cada sitio

Sitio 1

$$\begin{aligned} S_1^z &= S^z \otimes \mathbb{I}, \\ S_1^+ &= S^+ \otimes \mathbb{I}, \\ S_1^- &= S^- \otimes \mathbb{I}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Sitio 2

$$\begin{aligned} S_2^z &= \mathbb{I} \otimes S^z, \\ S_2^+ &= \mathbb{I} \otimes S^+, \\ S_2^- &= \mathbb{I} \otimes S^-. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Una vez definidos los operadores en cada sitio, y utilizando las ecuaciones (2.30) y (2.23), se obtiene el siguiente Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{XXZ} = -\frac{J}{2} \left[S_1^z S_2^z + S_2^z S_1^z + \frac{1}{2} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+ + S_2^+ S_1^- + S_2^- S_1^+) \right], \quad (2.41)$$

el cual se representa en notación matricial de la siguiente manera

$$\mathcal{H}_{XX2} = \begin{pmatrix} -J/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J/4 & -J/2 & 0 \\ 0 & -J/2 & J/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J/4 \end{pmatrix}. \quad (2.42)$$

Ahora consideramos el problema de diagonalizar el Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{XX2}|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (2.43)$$

Los eigenvectores están dados por:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right], \\ |\psi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right], \\ |\psi_4\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.44)$$

los tres primeros estados tienen la misma energía $E = -J/4$ y el último estado tiene energía $E = 3J/4$. Podemos escribir los resultados obtenidos anteriormente en la notación utilizada en la sección 2.2

$$|\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

$$|\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

Tabla 2.1. Eigenvectores y eigenvalores de una cadena isotrópica de Heisenberg de dos sitios. Fuente: Elaboración propia.

Estado	Forma explícita	E	M	fase
ψ_1	$ \uparrow\uparrow\rangle$	$-J/4$	$1/2$	Ferromagnética
ψ_2	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	$-J/4$	0	Antiferromagnética
ψ_3	$ \downarrow\downarrow\rangle$	$-J/4$	$-1/2$	Ferromagnética
ψ_4	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$	$3J/4$	0	Antiferromagnética

Una simple imagen física de esta situación es la siguiente. Como mencionamos anteriormente, ya que se trata de un sistema 1D a $T = 0K$, el sistema sólo puede estar en dos fases posibles: ferromagnética o antiferromagnética. Para determinar qué fase representa cada estado, se calculó la magnetización (parámetro de orden). Los resultados obtenidos se resumen en la tabla 2.1.

2.5.3.2. N sitios

Para el problema de N sitios, los observables S_n , $n = 1, 2, \dots, N$ en cada sitio son definidos por [14]

$$S_n = \overset{\downarrow 1}{\mathbb{I}} \otimes \dots \otimes \mathbb{I} \otimes \overset{\downarrow n}{S} \otimes \mathbb{I} \otimes \dots \otimes \overset{\downarrow N}{\mathbb{I}}. \quad (2.47)$$

Estos son operadores en

$$\overset{\downarrow 1}{V} \otimes \dots \otimes \overset{\downarrow n}{V} \otimes \dots \otimes \overset{\downarrow N}{V}, \quad (2.48)$$

donde V denota un espacio vectorial. Estos operadores actúan de forma no trivial en el espacio n y trivialmente en el resto.

¿Cómo podemos diagonalizar el hamiltoniano? En un trabajo anterior [4] usamos una diagonalización exacta para encontrar el espectro de energía del hamiltoniano. Realizamos la diagonalización exacta sólo para un pequeño número de sitios (un máximo de 4 utilizando un sistema de álgebra computacional). Con el fin de estudiar cadenas más grandes, se procedió a calcular el espectro de energía mediante una simulación numérica que se basa en la diagonalización por bloques. Sin embargo, como se trataba de matrices $2^N \times 2^N$, la diagonalización por bloques se hizo inviable cuando el número de sitios N era mayor que 14. Si queremos estudiar qué sucede en estos sistemas en el límite termodinámico, tenemos que conocer las propiedades de las cadenas más grandes. Y puesto que estamos analizando las cadenas de Heisen-

berg a $T = 0K$, necesitamos determinar el estado fundamental y sus propiedades. En el siguiente capítulo presentaremos el concepto de *Grupo de renormalización de la matriz densidad* (DMRG), este es un método numérico variacional que permite obtener el espectro de baja energía de un sistema de gran dimensión en lugar del espectro total.

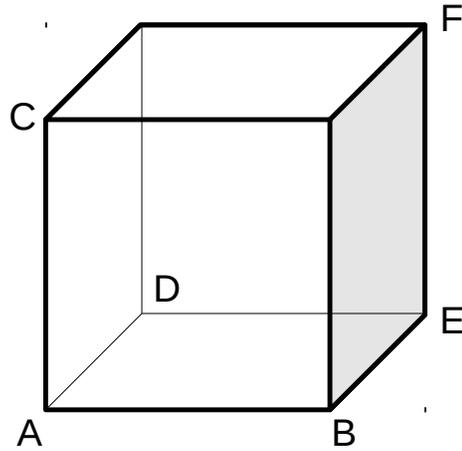


Figura 2.2. Red cúbica simple. A interactúa con B, C an D pero no con E o F. Fuente: elaboración propia.

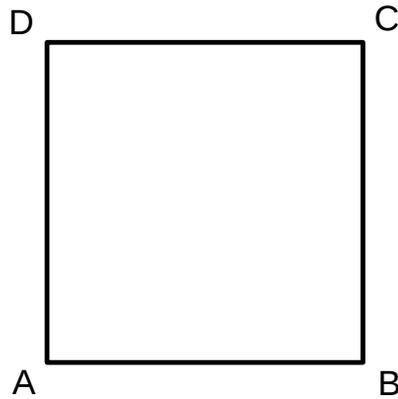


Figura 2.3. Red cuadrada. Una interacción de A con B t D pero no con C. Fuente: elaboración propia.

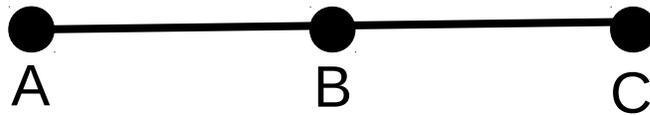


Figura 2.4. Red 1D o cadena. A interactúa con B pero no con C. Fuente: elaboración propia.

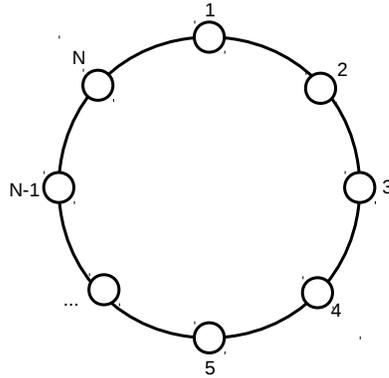


Figura 2.5. Topología de una cadena cerrada o periódica. Fuente: elaboración propia.

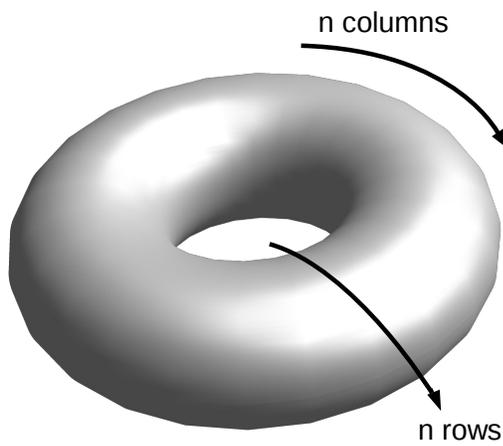


Figura 2.6. Topología de una red cuadrada con condiciones periódicas de contorno. Fuente: elaboración propia.

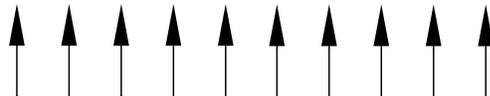


Figura 2.7. Cadena de espín $1/2$. La punta de la flecha es usada para apuntar la dirección asociada al espín de la partícula. Fuente: elaboración propia

3. Métodos de análisis

En este capítulo vamos a discutir cuatro métodos diferentes que pueden emplearse para el análisis y estudio del espectro de baja energía de sistemas cuánticos. Vamos a presentar los temas de Diagonalización Exacta, Teoría de Campo Medio y Grupo de Renormalización como una motivación para el uso del método de Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad (DMRG).

3.1. Diagonalización exacta

Las características completas de un sistema cuántico de espín pueden obtenerse mediante la diagonalización exacta de su hamiltoniano. Si los eigenvalores están disponibles, cualquier cantidad estática o dinámica puede calcularse. En principio, todos los eigenestados pueden calcularse exactamente para un sistema cuántico finito, mediante la construcción de la matriz del hamiltoniano y la diagonalización de la misma. En la práctica, esos estudios de diagonalización exacta están limitados a redes o sistemas muy pequeños. Esto sucede por el crecimiento exponencial del tamaño de la base con el número de espines, 2^N en el caso de $S=1/2$. Debe tenerse mucho cuidado al intentar sacar conclusiones sobre el límite termodinámico, el cuál no es posible alcanzar. Resultados exactos para redes pequeñas son indispensables para pruebas de la exactitud de simulaciones numéricas. Además, los métodos de diagonalización exacta proveen un camino concreto para el aprendizaje de aspectos importantes de la mecánica cuántica, en particular las propiedades de simetrías de estados de muchos cuerpos [19].

3.1.1. Diagonalización por bloques

Dado un hamiltoniano \mathcal{H} , el primer paso para un cálculo de diagonalización exacta es elegir una base en la cual este y otros operadores de interés serán expresados. La base de trabajo para un sistema de espín 1/2 normalmente consiste en estados de espín \uparrow_i y \downarrow_i , $i = 1, \dots, N$, normalmente tomando la dirección de

\hat{z} . Sin embargo, dado que el espacio de Hilbert crece como 2^N con el número de espines en el sistema, algunas simetrías deben usarse cuando es posible, para reducir el hamiltoniano a una forma de bloques. En ese esquema los estados de espín se combinan y ordenan con la ayuda de operaciones de simetría. Los bloques corresponden a estados con diferentes números cuánticos conservados relacionados a las simetrías, por ejemplo la conservación de momento en un cristal que viene de una simetría traslacional de la red, la componente z conservada del espín total. Los bloques pueden diagonalizarse independientemente unos de otros a un menor costo computacional. Además de la reducción del esfuerzo computacional, el acceso inmediato a los números cuánticos es muy útil para la clasificación de las excitaciones [19].

Algunas simetrías son relativamente fáciles de aprovechar, por ejemplo la conservación de la magnetización. Mientras que otras requieren algún trabajo y conllevan al uso de bases de estados más complicadas, por ejemplo los estados en la base de momentos. Algunas simetrías que podrían ser usadas en principio normalmente no se usan debido a las complicaciones prácticas del cálculo comparado con el beneficio que se obtendría. Un ejemplo de esto es la conservación del espín total

3.2. Teoría de campo medio

Antes de iniciar una exploración a teorías modernas para el estudio del comportamiento crítico, Cardy [3] considera que es mejor tomar en cuenta otras aproximaciones más tradicionales, generalmente agrupadas bajo el título de *teorías de campo medio* (MFT). A pesar de que estos métodos generalmente fallan cerca del punto crítico, hay muchas buenas razones para su estudio. La teoría de campo medio es relativamente simple de aplicar en muchos casos y a menudo permite obtener las características cualitativas correctas de un diagrama de fases para un modelo dado.

Según Cardy [3], en algunos casos donde los efectos de fluctuaciones son eliminados por algunas razones físicas, sus predicciones también son cuantitativamente correctas. En casos de muchas dimensiones espaciales, también da valores exactos para varios de los exponentes críticos. Además, a menudo sirve como un anexo importante al grupo de renormalización. Puesto que este último por sí mismo puede dar información directa sobre la existencia y localización de las transiciones de fase, pero no sobre la naturaleza de las fases que son separadas. Para esta caracterización se necesita más información y es, generalmente, obtenida mediante la aplicación de teorías de campo medio aplicadas a una región del diagrama de fase lejos del punto

crítico, donde es aplicable.

Para propósitos ilustrativos consideremos el modelo de Ising. Vamos a usar la aproximación presentada por Goldenfeld [8], el cual expone las aproximaciones esenciales envueltas en MFT.

3.2.1. El modelo de Ising

El modelo de Ising fue propuesto por el físico Wilhelm Lenz en 1920. El modelo fue resuelto por su estudiante Erns Ising en 1925 como su trabajo de tesis. El modelo de Ising es un intento de simular la estructura de una sustancia ferromagnética. Con más precisión, el modelo de Ising simula los dominios magnéticos. Su mayor virtud recae en el hecho de que el modelo de Ising en 2D tiene un análisis exacto en mecánica estadística. De hecho, es el único ejemplo no trivial de una transición de fase que puede analizarse con rigor matemático [11].

En el modelo de Ising el sistema considerado es un arreglo de N puntos fijos llamados sitios de la red que forman una red periódica de n dimensiones ($n = 1, 2, 3$). Asociado a cada sitio de la red hay una variable de espín S_i ($i = 1, \dots, N$). Un conjunto de números dado $\{S_i\}$ determina la configuración de todo el sistema. El hamiltoniano que describe la dinámica de tal sistema está definido con

$$\mathcal{H}_I = -J \sum_{kk'} S_k S_{k'} - H \sum_k S_k, \quad (3.1)$$

donde $S = \pm 1$, la constante ferromagnética de intercambio es J y H representa un campo magnético uniforme aplicado al sistema.

La función de partición es

$$Z = \text{Tr} \left\{ e^{\frac{1}{2} J \beta \sum_{kk'} S_k S_{k'} + H \beta \sum_k S_k} \right\}, \quad (3.2)$$

donde T es la temperatura y $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Un sistema descrito por el hamiltoniano de Ising en 1D no presenta transiciones de fase y esto se puede ver en el comportamiento de la magnetización que se muestra en la figura 3.1.

Es importante mencionar que, considerando condiciones periódicas de contorno nos permite resolver problemas analíticamente. Esto puede realizarse mediante el método de la matriz de transferencia. Para más información sobre el modelo de Ising se puede consultar un trabajo previo [4].

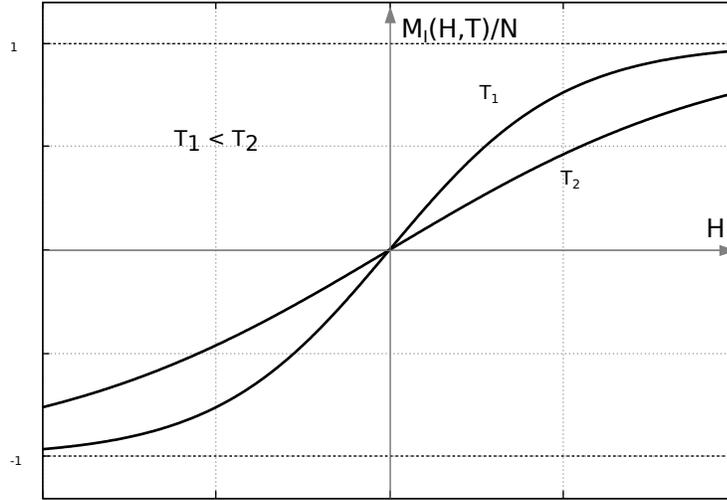


Figura 3.1. Magnetización por sitio $M_I(H,T)/N$ del modelo de Ising unidimensional como función del campo externo H . Fuente: elaboración propia.

3.2.2. Teoría de campo medio de Weiss

Como lo menciona Cardy [3]: *Hay tantas derivaciones de las ecuaciones básicas de la teoría de campo medio como libros escritos sobre el tema, todas varían en grados de rigurosidad y completitud.* La idea central de la teoría de campo medio es aproximar el caso interactuante (3.2) por una función de partición más sencilla y no interactuante. Esto se puede hacer de modo que se siga involucrando la física esencial del problema.

Si la constante de intercambio no está presente, es decir $J = 0$, el cálculo de Z , en la ecuación (3.2), sería trivial porque se podría factorizar en un producto de términos locales de cada sitio que describan un espín de Ising en un campo magnético. Entonces

$$Z = \prod_{i=1}^N (e^{\beta H} + e^{-\beta H}) = \left[2 \cosh\left(\frac{H}{k_B T}\right) \right]^N, \quad (3.3)$$

en cuyo caso la magnetización estaría dada por

$$M = \langle S \rangle = \frac{\sum_{S=\pm 1} S \exp^{\beta H S}}{\sum_{S=\pm 1} e^{\beta H S}} = \tanh(\beta H). \quad (3.4)$$

Por lo tanto, para $J = 0$ hemos descrito un paramagneto. Weiss intentó entender qué pasa cuando $J \neq 0$ postulando que cada espín experimenta la presencia de

un campo efectivo, H_{eff} , debido al momento magnético de todos los otros espines. Este momento magnético debería ser proporcional al momento magnético, M , de todos los otros espines, lo cual a su vez es desconocido al principio. Por lo tanto, un espín dado experimenta ambos, el campo aplicado externamente y el campo efectivo debido a los otros espines. Entonces la combinación de los dos campos determina la respuesta del espín en cuestión, es decir su momento magnético promedio. Pero no hay nada especial sobre el espín que elegimos, por lo que su momento debe ser el momento magnético promedio. De esta forma podemos calcular M de una forma autoconsistente [8].

Para ver esto explícitamente observamos que se puede escribir el hamiltoniano en la forma apropiada para un espín paramagnético en un sitio dependiente del campo magnético efectivo H_i :

$$\mathcal{H}_I = - \sum_i S_i H_i, \quad (3.5)$$

donde

$$H_i = H + \sum_j J_{ij} \langle S_{ij} \rangle + \sum_j J_{ij} (S_j - \langle S_j \rangle), \quad (3.6)$$

aquí, el primer término es el campo externo, el segundo es el campo medio y el último es una fluctuación que vamos ignorar por ahora. Con respecto estas fluctuaciones, Cardy [3] dice que *Esto es claramente drástico, ya que los espines en los sitios dentro de una longitud de correlación de los demás estarán fuertemente correlacionados. Por lo tanto, podemos esperar que la Teoría de Campo Medio pueda ser cuantitativamente correcta solo cuando la longitud de correlación es muy pequeña.*

Si los espines residen en los vértices de una red hipercúbica de d dimensiones, entonces el número de coordinación z de cada sitio es $2d$ y

$$H_i = H + 2dJM, \quad (3.7)$$

de la ecuación (3.4) encontramos

$$M = \tanh \left(\frac{H + 2dJM}{k_B T} \right), \quad (3.8)$$

aún en ausencia de un campo externo H , podemos aplicar la misma idea para

encontrar la magnetización espontánea. Fijando $H = 0$ obtenemos

$$M = \tanh\left(\frac{2dJM}{k_B T}\right), \quad (3.9)$$

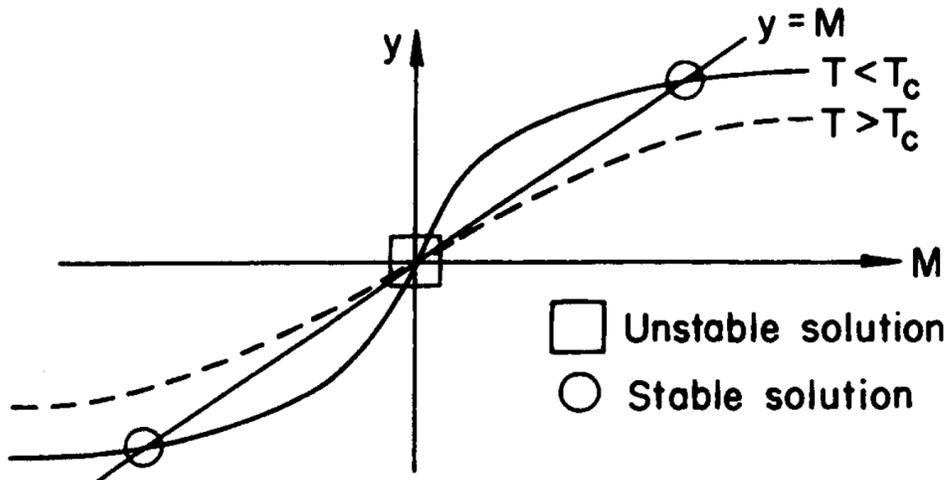


Figura 3.2. Solución gráfica de la ecuación de campo medio para la magnetización espontánea. Fuente: Goldenfeld, Lectures on phase transitions and the renormalization group, p.106.

esto se puede ver gráficamente en la figura 3.2. Para una temperatura por arriba de cierto valor T_c , la curva de la tangente hiperbólica queda debajo de $y = M$, y la única intersección es a $M = 0$. Para temperaturas por debajo de T_c se interseca a $\pm M_s(T)$. La parte no analítica aparece por la forma en la cual la solución a la ecuación (3.9) cambia cuando T varía. Entonces, en la teoría de campo medio encontramos que la temperatura crítica es

$$T_c = \frac{2dJ}{k_B}. \quad (3.10)$$

Esta estimación de la verdadera temperatura crítica es evidentemente tosca y es en muchos casos sobrestimada. Esto es porque los efectos de fluctuación no tomados en cuenta en la teoría de campo medio dan un efecto de desorden [3].

Podemos estudiar el comportamiento crítico proporcionado por esta descripción examinando la ecuación de estado (3.8) en la vecindad de T_c . Consideremos $\tau = T_c/T$ y ahora invirtamos la ecuación (3.8) para obtener la ecuación de estado

$$\begin{aligned}
M &= \tanh(H/k_B T + M\tau) \\
&= \frac{\tanh \frac{H}{k_B T} + \tanh \frac{M}{\tau}}{1 + \tanh \frac{H}{k_B T} \tanh \frac{M}{\tau}},
\end{aligned} \tag{3.11}$$

entonces

$$\tanh \frac{H}{k_B T} = \frac{M - \tanh M\tau}{1 - M \tanh M\tau}. \tag{3.12}$$

Para valores pequeños de H y de M , podemos expandir en potencias de M para encontrar

$$\frac{H}{k_B T} \approx M(1 - \tau) + M^3 \left(\tau - \tau^2 + \frac{\tau^3}{3} + \dots \right) + \dots \tag{3.13}$$

Ahora podemos extraer los exponentes críticos para la transición ferromagnética, como se calculan en la teoría de campo medio: para $H = 0$ y para $T \rightarrow T_c^-$, la ecuación (3.13) implica que

$$M^2 \approx 3 \frac{T_c - T}{T_c} + \dots \tag{3.14}$$

donde los puntos indican correcciones a este término dominante. También podemos obtener el exponente crítico $\beta = 1/2$. La isoterma crítica es la curva en el plano $H - M$ correspondiente a $T = T_c$. Su forma, cercano al punto crítico, es descrita por el exponente crítico δ :

$$H \sim M^\delta. \tag{3.15}$$

Fijando $\tau = 1$ en la ecuación de estado (3.13), tenemos

$$\frac{H}{k_B T} \sim -M^3, \tag{3.16}$$

mostrando que el valor de campo medio de $\delta = 3$. La susceptibilidad magnética χ_T también diverge cerca de T_c :

$$\chi_T = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_T. \tag{3.17}$$

Diferenciando la ecuación de estado (3.13), se tiene

$$\frac{1}{k_B T} = \chi_T(1 - \tau) + 3M^2\chi_T(\tau - \tau^2 + \frac{1}{3}\tau^3). \quad (3.18)$$

Para $T > T_c$, $M = 0$ y

$$\chi_T = \frac{1}{k_B} \frac{1}{T - T_c} + \dots \quad (3.19)$$

Comparando con la definición del exponente crítico γ

$$\chi_T \sim |T - T_c|^{-\gamma}, \quad (3.20)$$

concluimos que $\gamma = 1$. Para $T < T_c$,

$$M = \sqrt{3} \left(\frac{T_c - T}{T} \right)^{1/2} + \dots \quad (3.21)$$

Sustituyendo en la ecuación (3.18) se tiene

$$\chi_T = \frac{1}{2k_B} \frac{1}{T - T_c} + \dots, \quad (3.22)$$

que muestra que la divergencia de la susceptibilidad debajo de la temperatura de transición está gobernada por el exponente crítico $\gamma' = \gamma = 1$. El cálculo del exponente crítico α que gobierna la divergencia del calor específico cerca de la transición se obtiene del mismo modo. El resultado es que, el calor específico muestra una discontinuidad en $T = T_c$ en MFT [8].

3.2.3. Correlaciones espaciales

La teoría de campo medio presentada aquí no tiene el nivel de sofisticación que nos permita extraer los detalles completos de las correlaciones espaciales. Uno debe tener en mente que la teoría de campo medio y las correlaciones espaciales son antípodas: ¿cómo se puede estar interesado en las correlaciones espaciales cuando se han promediado las fluctuaciones sobre todo el sistema? La respuesta es que la longitud de correlación no solo gobierna la extensión de las fluctuaciones del parámetro de orden, sino también gobierna la forma en la cual el parámetro de orden varía en el espacio como respuesta a un campo no homogéneo externo. Dada esa perturbación en el sistema, uno aún puede construir una solución auto-consistente para el parámetro de orden en el espíritu de la teoría de campo medio [8].

Por ahora podemos proceder usando argumentos termodinámicos y una intere-

sante identidad conocida como la *regla de la suma de susceptibilidad estática*. Esta es una relación importante entre una cantidad termodinámica, la susceptibilidad isotérmica y la función de correlación de dos puntos [8]. La derivación es la siguiente

Primero, definimos la función de dos puntos

$$G(r_j - r_{j'}) = \langle S_j S_{j'} \rangle - \langle S_j \rangle \langle S_{j'} \rangle, \quad (3.23)$$

donde r_j es la posición espacial del espín S_j . Para futura referencia, el valor esperado puede obtenerse diferenciando la función de partición (3.1) con respecto al campo externo, entonces

$$\begin{aligned} \sum_j \langle S_j \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \sum S_j e^{-\beta \mathcal{H}_I}, \\ &= \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z(H, J)}{\partial H}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

y

$$\sum_{jj'} \langle S_j S_{j'} \rangle = \frac{1}{\beta^2 Z} \frac{\partial^2 Z(H, J)}{\partial H^2}. \quad (3.25)$$

Ahora vamos a construir una expresión general para la susceptibilidad isotérmica

$$\begin{aligned} \chi_T &= \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial H^2}, \\ &= \frac{1}{N} k_B T \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial H^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial H} \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{N} (k_B T)^{-1} \left[\sum_{jj'} \langle S_j S_{j'} \rangle - \left(\sum_j \langle S_j \rangle \right)^2 \right], \\ &= \frac{1}{N} (k_B T)^{-1} \sum_{jj'} G(r_j - r_{j'}), \\ &= \frac{1}{N} (k_B T)^{-1} \sum_j G(x_j), \\ &= (a^d k_B T)^{-1} \int d^d r G(r). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Este es un resultado importante porque conecta la divergencia en χ_T con la

función de correlación de dos puntos G : aparentemente, G debe reflejar la divergencia de χ_T . Para $|r| \gg \xi$,

$$G(r) \sim \frac{e^{-|r|/\xi}}{|r|^{(d-1)/2} \xi^{(d-3)/2}}, \quad (3.27)$$

donde ξ es la longitud de correlación. Como G decae rápidamente en infinito, la integral en la ecuación (3.26) debe ser convergente. Aún así, sabemos que χ_T diverge cuando $T \rightarrow T_c$, y por lo tanto también la integral. La solución a este aparente conundrum es que la correlación de longitud también diverge.

Podemos calcular cómo diverge la longitud de correlación, usando el resultado de que $\gamma = 1$. De las ecuaciones (3.26) y (3.27), tenemos

$$\begin{aligned} \left(\frac{T - T_c}{T}\right)^{-1} &\sim \int \frac{r^{d-1} e^{-r/\xi}}{r^{(d-1)/2} \xi^{-(d-3)/2}} dr \\ &\sim \left(\int z^{(d-1)/2} e^{-z} dz\right) \xi^2, \end{aligned} \quad (3.28)$$

donde hacemos la sustitución $z = r/\xi$. La integral es bien definida constante y entonces encontramos que la longitud de correlación también diverge como

$$\xi \sim \left(\frac{T - T_c}{T}\right)^{-\nu} \quad (3.29)$$

com

$$\nu = 1/2. \quad (3.30)$$

3.2.4. ¿Qué tan buena es la Teoría de campo medio?

El cuadro 3.1 compara los exponentes críticos calculados con la teoría de campo medio con mediciones realizadas en experimentos o deducidas de la teoría para el modelo de Ising en 2D o 3D. El cuadro es esencialmente ilustrativo: los valores dados no son necesariamente los más precisos conocidos en la actualidad. Además, los valores experimentales son solo aproximaciones, con un rango que refleja la inevitable incerteza experimental. Los valores para ν y δ no son independientes de otros valores obtenidos usando propiedades de leyes de escala. Los valores experimentales han sido obtenidos de experimentos de sistemas de fluidos [8].

Los valores numéricos de los exponentes críticos calculados usando la teoría de campo medio están en razonable cercanía a aquellos dados por los experimentos y

Tabla 3.1. Exponentes críticos para la Clase de universalidad de Ising. Fuente: Goldenfeld, Lectures on phase transitions and the renormalization group, p.111.

Exponente	Campo medio	Experimento	Ising 2D	Ising 3D
α	0 (disc.)	0.110-0.116	0 (log)	0.110 (5)
β	1/2	0.316-0.327	1/8	0.325 ± 0.0015
γ	1	1.23-1.25	7/4	1.2405 ± 0.0015
δ	3	4.6-4.9	15	4.82(4)
ν	1/2	0.625 ± 0.010	1	0.630(2)

por el modelo de Ising en 3D. Sin embargo tienen diferencias sistemáticas. Goldenfeld [8] dijo que la primera diferencia es que en MFT los exponentes no dependen de la dimensión. Cuando es claro que los valores exactos de los exponentes críticos lo hacen. Después dijo que los valores tienen errores, aunque pequeños, pero tienen error.

Además de esas observaciones, es importante mencionar que los resultados que podemos obtener usando MFT. La teoría de campo medio muestra universalidad. Además la teoría de campo medio ha predicho el diagrama de fases correcto en este caso y nos da una expresión para la temperatura crítica. Esas predicciones no son siempre de confianza, pero siempre proveen un buen primer paso para una teoría más completa [8].

3.3. Grupo de Renormalización

Schwabls se refiere con el término *renormalización* a una cierta reparametrización con el objetivo de hacer que la teoría renormalizada pueda tratar más fácilmente que la versión original [21]. El término *grupo de renormalización* (RG) viene del hecho de que dos transformaciones de grupo de renormalización dan una tercera transformación del mismo tipo de transformaciones. Todos los métodos usados en esta teoría terminan con ecuaciones matemáticas que describen *flujos de grupo de renormalización* en algún espacio de parámetros complicado. La esencia del grupo de renormalización es el estudio de esos flujos y de lo que pueden decir sobre el problema físico [21].

Generalmente, se esperan las siguientes ventajas de una transformación del grupo de renormalización:

- a. Una teoría prácticamente libre, sin interacciones, puede obtenerse por aplicaciones repetidas del procedimiento de renormalización.

- b. Después de un número de transformaciones del grupo de renormalización, el sistema no presenta más cambios si se está en un *punto fijo*. Ya que la eliminación de grados de libertad se acompaña de un cambio del espaciado de la red subyacente o de la longitud de escala, se puede inferir que los puntos fijos se pueden relacionar con los puntos críticos.

El método del grupo de renormalización lleva a la invariancia de la escala en la vecindad de un punto crítico. En el caso de las llamadas *transformaciones en espacio real*, ciertos grados de libertad que son definidos sobre una red son eliminados. Entonces, esto aporta la operación de una traza parcial de la función de partición. La constante de red del sistema resultante es reajustada y las variables internas se renormalizan. Esto es hecho de modo que el nuevo hamiltoniano corresponde con el original [21].

3.3.1. Transformaciones de bloques de espín

Para estudiar el grupo de renormalización, Goldenfeld introduce el concepto de bloques de espines [8]. Considere un sistema Ω de espines en una red hipercúbica de d dimensiones con un espaciado de red a . El sistema está bajo la influencia de un campo magnético externo H y un hamiltoniano \mathcal{H}_Ω dado por

$$\begin{aligned}\beta\mathcal{H}_\Omega &= -\beta J \sum_{\langle ij \rangle=1} S_i S_j - \beta H \sum_i S_i, \\ &\equiv -K \sum_{\langle ij \rangle}^N S_i S_j - h \sum_{i=1} S_i,\end{aligned}\tag{3.31}$$

con

$$\begin{aligned}K &\equiv \beta J, \\ h &= \beta H.\end{aligned}\tag{3.32}$$

Si $f_s(t, h)$ es la parte singular de la energía libre por espín cerca de T_c . Donde $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ es la *temperatura reducida* en termodinámica. Ya que los espines están correlacionados a longitudes del orden $\xi(T)$, los espines en una longitud de escala la , con $l > 1$, actúan en cierto modo como una *unidad simple* siempre que

$$a \ll la \ll \xi(T).\tag{3.33}$$

Entonces, podemos imaginar un procedimiento de *coarse-graining* en el cual los espines son reemplazados por de un bloque de lado l con un solo espín, un bloque de espín. Un bloque de espines que contiene l^d espines. El número total de bloques y por ende, el bloque de espines es Nl^{-d} . Tal procedimiento de *coarse-graining* recibe el nombre de *transformación de bloque de espín* [8].

El bloque de espín S_I en el bloque I está definido por

$$S_I \equiv \frac{1}{|\bar{m}_I|} \frac{1}{l^d} \sum_{i \in I} S_i, \quad (3.34)$$

donde la magnetización promedio del bloque I es

$$|\bar{m}_I| \equiv \frac{1}{l^d} \sum_{i \in I} \langle S_i \rangle. \quad (3.35)$$

Con esta normalización, el bloque de espines S_I tiene la misma magnitud que los espines originales

$$\langle S_I \rangle = \pm 1. \quad (3.36)$$

Ahora hacemos nuestra primera suposición: Si los espines originales interactúan solamente con los espines que son próximos vecinos y con el campo externo, vamos a asumir que el bloque de espines también interactúa solamente con los bloques de espines que son sus próximos vecinos y con un campo externo efectivo. Esta suposición implica que unas nuevas constantes de acoplamiento deben definirse entre los bloques de espines y un campo externo efectivo que interactúa con el bloque de espines. Esas constantes se denotan como K_l y h_l respectivamente. El subíndice l nos recuerda que estas constantes dependen de la definición del bloque de espines. Las constantes del hamiltoniano original corresponden a $l = 1$ [8].

Entonces tenemos las condiciones de frontera

$$K_1 = K, \quad (3.37)$$

y

$$h_1 = h. \quad (3.38)$$

De acuerdo a la primera suposición, el hamiltoniano efectivo \mathcal{H}_l para el bloque de espines está dado por

$$-\beta\mathcal{H}_l = K_l \sum_{\langle IJ \rangle}^{Nl^{-d}} S_I S_J + h_l \sum_{l=1}^{Nl^{-d}} S_I, \quad (3.39)$$

el cual, por construcción, es de la misma forma que el hamiltoniano original (3.31). Los subíndices I y J identifican diferentes bloques de espín. El sistema descrito por \mathcal{H}_l es idéntico a aquel descrito por \mathcal{H}_Ω , excepto por el espaciado de la red, que entre bloques de espín es la mientras que entre los espines originales es a . El sistema de bloques de espín tiene menos espines. Entonces, para los bloques de espines la longitud de correlación ξ_l es menor que la longitud de correlación ξ_1 del sistema inicial. La longitud de correlación ξ_l se mide en unidades del espaciado la entre los bloques de espines y ξ_1 en unidades del espaciado a entre los espines originales. Esto es porque los valores físicos de la longitud de correlación ξ no cambian por el ordenamiento de nuestros espines en bloques de espín, entonces

$$\xi = \xi_l(la) = \xi_1 a, \quad (3.40)$$

y

$$\xi_l = \frac{\xi_1}{l}. \quad (3.41)$$

Como $\xi_l < \xi_1$, el sistema con hamiltoniano \mathcal{H}_l debe estar más lejos del punto crítico que el sistema original. Entonces, Goldenfeld [8] concluye que el nuevo sistema está a una nueva temperatura reducida efectiva t_l .

Similarmente, el campo magnético h ha sido reescalado a un campo efectivo h_l que, usando las unidades apropiadas

$$h \sum_i S_i \approx h \bar{m}_l l^d \sum_I S_i \equiv h_l \sum_I S_I, \quad (3.42)$$

que implica una relación entre la magnetización promedio de un bloque y el campo efectivo

$$h_l = h \bar{m}_l l^d. \quad (3.43)$$

El hamiltoniano efectivo, \mathcal{H}_l , tiene la misma forma que el hamiltoniano original (3.31). Entonces la forma funcional de la energía libre del sistema de bloques de espín será de la misma forma que la del sistema original, aunque con t_l y h_l en lugar de t y h . En términos de la energía libre por espín o por bloque de espín,

$$Nl^{-d} f_s(t_l, h_l) = N f_s(t, h). \quad (3.44)$$

Aquí encontramos que

$$f_s(t_l, h_l) = l^d f_s(t, h). \quad (3.45)$$

A pesar de que esta ecuación describe cómo la energía libre por espín se transforma bajo una transformación de un bloque de espín, aún no tenemos ninguna información de cómo la temperatura reducida y el campo externo han cambiado durante la transformación. Para esto Goldenfeld [8] propone una segunda suposición:

Ya que buscamos entender la ley de potencia y el comportamiento de escala de la región crítica, asumimos que

$$\begin{aligned} t_l &= t l^{y_t}, & y_t &> 0, \\ h_l &= h l^{y_h}, & y_h &> 0, \end{aligned} \quad (3.46)$$

los exponentes y_t y y_h se asumen positivos, pero no podemos decir más sobre ellos en esta etapa. Veremos más adelante que en la teoría de RG completa, las circunstancias bajo las cuales esta suposición es correcta son identificadas. Entonces es posible hacer una transformación de bloque de espín aproximadamente y aquí se pueden estimar y_t y y_h . Por ahora, sustituimos en la ecuación (3.44) para obtener el resultado central de esta sección:

$$f_s(t, h) = l^{-d} f_s(t l^{y_t}, h l^{y_h}). \quad (3.47)$$

Note que no hemos especificado l , entonces tenemos libertad de elegir l . Por lo que elegimos

$$l = |t|^{-1/y_t}, \quad (3.48)$$

o

$$l^{y_t} |t| = 1. \quad (3.49)$$

Con esta elección

$$f_s(t, h) = |t|^{d/y_t} f(1, h |t|^{-y_h/y_t}). \quad (3.50)$$

Ahora definimos

$$\Delta \equiv \frac{y_h}{y_t}, \quad (3.51)$$

y

$$2 - \alpha \equiv \frac{d}{y_t}, \quad (3.52)$$

por razones obvias. Entonces la ecuación (3.50) se vuelve

$$f_s(t, h) = |t|^{2-\alpha} F_f \left(\frac{h}{|t|^\Delta} \right), \quad (3.53)$$

con

$$F_f(x) \equiv f_s(1, x), \quad (3.54)$$

una función que sólo depende de x . Este es el punto de inicio básico de la hipótesis de escala estático, que establece que la energía libre por unidad de volumen, o por lo menos su parte singular, $f_s(t, h)$, está dada por

$$f_s(t, h) = t^{2-\alpha} F_f \left(\frac{h}{t^\Delta} \right). \quad (3.55)$$

Ahora considere la función de correlación para el hamiltoniano del bloque de espín.

$$G(r_l, t_l) = \langle S_I S_J \rangle - \langle S_I \rangle \langle S_J \rangle, \quad (3.56)$$

donde r_l es el desplazamiento entre los centros de los bloques I y J en unidades de al . Si r es el desplazamiento entre los centros de los bloques I y J en unidades de a , entonces

$$r_l = \frac{r}{l}. \quad (3.57)$$

Para que la noción de una función de correlación de bloque de espines sea bien definida necesitamos que la separación entre los bloques sea mucho mayor que la del bloque mismo. Entonces, nos interesa solo el límite de la longitud de onda $r \gg a$. ¿Cómo se relacionan $G(r_l, t_l)$ y $G(r, t)$? usando la definición de S_l , las ecuaciones (3.34) y (3.41), el promedio de la magnetización en un bloque queda

$$\bar{m}_l = h_l l^{-d} / h = l^{y_h - d}. \quad (3.58)$$

Entonces la función de correlación se transforma

$$\begin{aligned}
G(r_l, t_l) &= \frac{1}{l^{2(y_h-d)} \cdot l^{2d}} \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} [\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle], \\
&= \frac{1}{l^{2(y_h-d)} \cdot l^{2d}} \cdot l^d \cdot l^d \cdot [\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle], \\
&= l^{2(d-y_h)} G(r, t).
\end{aligned} \tag{3.59}$$

Incluyendo la dependencia en h tenemos

$$G\left(\frac{r}{l}, tl^{y_t}, hl^{y_h}\right) = l^{2(d-y_h)} G(r, t, h). \tag{3.60}$$

Nuevamente, podemos elegir l como querramos y por eso la elegimos $l = t^{-1/y_t}$ como antes, para obtener

$$G(r, t, h) = t^{2(d-y_h)/y_t} G(rt^{1/y_t}, ht^{-y_h/y_t}, 1). \tag{3.61}$$

El prefactor $t^{2(d-y_h)/y_t}$ no es familiar, pero podemos fácilmente reescribir la expresión

$$G(rt^{1/y_t}, ht^{-y_h/y_t}, 1) \equiv (rt^{1/y_t})^{-2(d-y_h)} F_G(rt^{1/y_t}, ht^{-y_h/y_t}), \tag{3.62}$$

la cual define la función de escala F_G . Substituyendo en la ecuación (3.61), obtenemos nuestro resultado final

$$G(r, t, h) = \frac{1}{r^{2(d-y_h)}} F_G(rt^{1/y_t}, ht^{-y_h/y_t}). \tag{3.63}$$

Esta es la forma asumida por la ley de escala

$$G(r, t, h) = \frac{1}{r^{d-2+\eta}} F_G\left(rt^\nu, \frac{h}{t^\Delta}\right), \tag{3.64}$$

de la cual siguen más leyes de escala involucrando η, ν :

$$2 - \alpha = d\nu, \tag{3.65}$$

y

$$\gamma = \nu(2 - \eta). \tag{3.66}$$

La ecuación (3.65) se llama *relación de Josephson* y es un ejemplo de una ley de hiperescala, la cual involucra d [8]. Comparando la ecuación (3.63) con las

expectativas de la hipótesis de escala (3.65) y (3.66), podemos obtener

$$\nu = \frac{1}{y_t}, \quad (3.67)$$

$$2(d - y_h) = d - 2 + \eta, \quad (3.68)$$

$$\Delta = y_h/y_t. \quad (3.69)$$

De esos resultados, podemos ver que sólo hay dos exponentes críticos independientes, correspondiendo con las dos variables t y h [8].

3.3.2. Ideas básicas del grupo de renormalización

Goldenfeld propone que el grupo de renormalización consiste de dos pasos principales, que abordan dos cuestiones distintas [8]. El primer paso es una realización concreta de una transformación *coarse-graining* usada en la sección anterior. Aquí tenemos que examinar cuidadosamente las propiedades de la transformación de bloque de espín. El segundo paso es identificar el origen del comportamiento singular. La idea crucial es esta: después de una transformación de bloque de espín se ha realizado, los bloques de espín están separados a una distancia la . Si ahora reescalamos las longitudes de modo que en las nuevas unidades el bloque de espines estén separados por la distancia original a , entonces el sistema se verá como el sistema original en términos de los grados de libertad pero con un hamiltoniano diferente.

Repetiendo esta secuencia de pasos da una secuencia de hamiltonianos, cada uno describiendo sistemas de mecánica estadística más y más lejos del punto crítico. La construcción de una transformación de bloque de espines es perfectamente analítica. Pueden aparecer regiones no analíticas en un número infinito de repeticiones, en la cual todos los grados de libertad en el límite termodinámico han sido integrados.

Consideremos un sistema descrito por el hamiltoniano

$$\mathcal{H} \equiv -\beta H_\Omega = \sum_n K_n \Theta_n\{S\}, \quad (3.70)$$

donde K_n son las constantes de acoplo y $\Theta_n\{S\}$ son los operadores locales que son funcionales de los grados de libertad $\{S\}$.

3.3.2.1. Propiedades de las transformaciones del grupo de renormalización

Consideremos cómo \mathcal{H} , tal como se define en la ecuación (3.70), cambia bajo una transformación que haga un *coarse-graining* en los grados de libertad de longitud de onda corta. Esto deja como resultado un hamiltoniano efectivo para los grados de libertad de longitud de onda larga. Conceptualmente, esto significa que los grados de libertad están agrupados en un bloque de dimensión lineal la [8]. En la práctica hay maneras más sofisticadas de lograr esto.

Supongamos que bajo una transformación de grupo de renormalización R_l , el conjunto de constantes de acoplamiento $K \equiv [K]$ se convierte en

$$[K'] \equiv R_l[K], l > 1. \quad (3.71)$$

Como antes, R_l describe cómo las constantes de acoplamiento cambian a medida que varía la escala de longitud. Según Goldenfeld [8], los operadores locales se definen sobre la escala de longitud. La ecuación (3.71) se refiere a veces como una *relación de recursión* [8]. En general, R_l es una transformación no lineal muy complicada. Desde $l > 1$, no hay transformación inversa.

Las transformaciones R_l para diferentes $l > 1$ sí forman un semi-grupo: dos transformaciones sucesivas con $l = l_1$ y $l = l_2$ deben ser equivalentes a un cambio de escala combinado de $l_1 l_2$

$$[K'] = R_{l_1}[K], \quad (3.72)$$

$$[K''] = R_{l_2}[K'] = R_{l_2} \cdot R_{l_1}[K], \quad (3.73)$$

y entonces

$$R_{l_1 l_2}[K] = R_{l_2} \cdot R_{l_1}[K]. \quad (3.74)$$

¿Cómo se puede calcular R_l ? Goldenfeld [8] menciona que hay muchas maneras diferentes y que no hay una transformación RG única. Se pueden construir muchas transformaciones RG diferentes para un problema dado. Todos ellos implican aplicar un *coarse-graining* a los grados de libertad, que ahora describimos formalmente aquí.

Comenzamos escribiendo la función de partición

$$Z_N[K] = \text{Tr } e^{\mathcal{H}}, \quad (3.75)$$

y definiendo una cantidad g , relacionada con la energía libre por grado de libertad

$$g[K] \equiv \frac{1}{N} \log Z_N[K]. \quad (3.76)$$

Una transformación RG reduce el número de grados de libertad por un factor l^d . Dejando $N' = N/l^d$ grados de libertad, descritos por *variables de bloque* $\{S'I\}$, $I = 1, \dots, N'$, con un hamiltoniano efectivo $\mathcal{H}'_{N'}$. Esto se logra haciendo un trazado parcial sobre los grados de libertad $\{S_i\}$ manteniendo los grados de libertad de bloque $\{S'_I\}$ fijos

$$e^{\mathcal{H}'_{N'}\{[K'], S'_I\}} = \text{Tr}'_{\{S_i\}} e^{\mathcal{H}_N\{[K], S_i\}},$$

$$e^{\mathcal{H}'_{N'}\{[K'], S'_I\}} = \text{Tr}_{\{S_i\}} P(S_i, S'_I) e^{\mathcal{H}_N\{[K], S_i\}}, \quad (3.77)$$

donde $P(S_i, S'_I)$ es un *operador de proyección* que permite que la traza en la ecuación (3.77) no esté restringida. El operador de proyección $P(S_i, S'_I)$ se construye de modo que los grados de libertad de a los que se les haya aplicado un *coarse-graining* S'_I tengan el mismo rango de valores S_i .

El operador de proyección $P(S_i, S'_I)$ debe satisfacer los tres requisitos siguientes:

- (i) $P(S_i, S'_I) \geq 0$,
- (ii) $P(S_i, S'_I)$ refleja las simetrías del sistema,
- (iii) $\sum_{\{S'_I\}} P(S_i, S'_I) = 1$.

La condición (i) garantiza que $\exp(\mathcal{H}'_{N'}\{[K'], S'_I\}) \geq 0$, de manera que $\mathcal{H}'_{N'}$ se puede identificar con el hamiltoniano efectivo para los grados de libertad S'_I . La condición (ii) implica que $\mathcal{H}'_{N'}$ posee las simetrías exhibidas por el hamiltoniano original \mathcal{H}_N . Por ejemplo, si \mathcal{H}_N tiene la forma

$$\mathcal{H}_N = NK_0 + h \sum_i S_i + K_1 \sum_{ij} S_i S_j + K_2 \sum_{ijk} S_i S_j S_k + \dots \quad (3.78)$$

donde cada multinomial en S_i permitido por simetría está incluido en \mathcal{H} , con constantes de acoplamiento que son en general no nulas. Entonces el hamiltoniano transformado o renormalizado

$$\mathcal{H}'_{N'} = N'K'_0 + h' \sum_I S'_I + K'_1 \sum_{IJ} S'_I S'_J + K'_2 \sum_{IKJ} S'_I S'_J S'_K + \dots \quad (3.79)$$

tiene la misma forma, pero con constantes de acoplamiento transformadas o renormalizadas. Si una constante de acoplamiento K_m es cero en \mathcal{H} , entonces, en general, K'_m será no cero. La condición (iii) garantiza que

$$\begin{aligned} Z_{N'}[K'] &\equiv \text{Tr}_{\{S'_I\}} e^{\mathcal{H}'_{N'}\{[K'], S'_I\}}, \\ &= \text{Tr}_{\{S'_I\}} \text{Tr}_{\{S_I\}} P(S_i, S'_I) e^{\mathcal{H}_N\{[K], S_i\}}, \\ &= \text{Tr}_{\{S_i\}} e^{\mathcal{H}_N\{[K], S_i\}}, \\ &= Z_N[K]. \end{aligned} \quad (3.80)$$

Por lo tanto, la función de partición es invariante bajo una transformación RG [8]. También queremos saber qué ocurre con *energía libre*, g ,

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \log Z_N[K] &= \frac{l^d}{l^d N} \log Z_{N'}[K'], \\ &= l^{-d} \frac{1}{N'} \log Z_{N'}[K'], \end{aligned} \quad (3.81)$$

y por lo tanto

$$g[K] = l^{-d} g[K']. \quad (3.82)$$

Goldenfeld [8] concluye que el formalismo anterior encapsula el espíritu de las transformaciones de bloques de espín. Pero difiere de las transformaciones de bloque de espín en que al principio se permite la posibilidad de que se generen nuevos operadores locales durante la transformación RG. El formalismo es exacto, pero no obviamente útil. La única virtud de la presentación que emerge es que aunque el cálculo de $[K']$ como funciones de $[K]$ es en general difícil, las funciones deben ser analíticas. Esto se debe a que sólo un número finito de grados de libertad se han integrado en la transformación RG. La utilidad del enfoque RG se deriva del hecho de que, por lo tanto, es considerablemente más fácil aproximar el $[K']$ que la función de partición en sí. Esta observación nos lleva ahora a la segunda parte de la técnica RG: el origen del comportamiento singular.

3.3.2.2. El origen del comportamiento singular

Se requiere un número infinito de iteraciones de las transformaciones RG para eliminar todos los grados de libertad de un sistema termodinámico en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$. De este modo puede ocurrir comportamiento singular.

Para ver esto, Goldenfeld [8] presenta el siguiente ejemplo simple de cómo el comportamiento singular puede surgir de una transformación analítica. Una partícula que se mueve en un potencial unidimensional $V(x)$ está sujeta a un amortiguamiento lo suficientemente fuerte que la inercia puede ser desestimada. La posición de la partícula $X(t)$ está determinada por la ecuación

$$\frac{dX}{dt} = -V'(X), \quad (3.83)$$

donde las unidades han sido elegidas de manera que el coeficiente de fricción sea equivalente a la unidad. Supongamos que $V(x)$ se encuentra graficado en la figura 3.3, y la partícula es liberada desde cualquier punto $x < x_C$. La partícula se moverá hacia x_A y se detendrá. Si la partícula es liberada desde cualquier punto $x > x_C$, se desplazará a x_B y se detendrá. Así, la posición final de la partícula es una función discontinua de la posición inicial, x_0 . Debemos tener en cuenta que $X(t, x_0)$, la posición en el momento t después de la liberación en x_0 , es una función continua de x_0 para los valores finitos de t . Pero es una función discontinua de x_0 cuando $t \rightarrow \infty$. El potencial $V(x)$ es analítico, por lo que el comportamiento singular no se debe a problemas en $V(x)$. En su lugar, el origen del comportamiento singular es la amplificación de la condición inicial debido al límite de tiempo infinito.

Los puntos x_A , x_B y x_C son *puntos fijos* de la ecuación (3.83). Si la partícula está en un punto fijo en algún momento t' , entonces permanece allí para $t > t'$. También vemos que los puntos fijos vienen en dos variedades, repulsivas y atractivas. Un punto fijo es repulsivo si la partícula comienza cerca del punto fijo en x_C y termina en x_A o en x_B pero nunca en x_C . Por otro lado, el punto fijo es atractivo si la partícula comienza cerca de x_A o x_B , y termina en ese punto fijo [8].

El conjunto de condiciones iniciales $\{x_0\}$ que fluye a un punto fijo dado se denomina *cuenca de atracción* de ese punto fijo. En el ejemplo simple que acabamos de dar, la cuenca de atracción de x_B es $x > x_C$, mientras que la cuenca de atracción de x_A es $x < x_C$. La cuenca de atracción de x_C es $x = x_C$.

Este ejemplo del sistema dinámico sugiere que el comportamiento singular puede aparecer después de un número infinito de transformaciones RG. Después de n RG iteraciones, la escala de longitud de *coarse graining* es l^n , y el sistema se describe

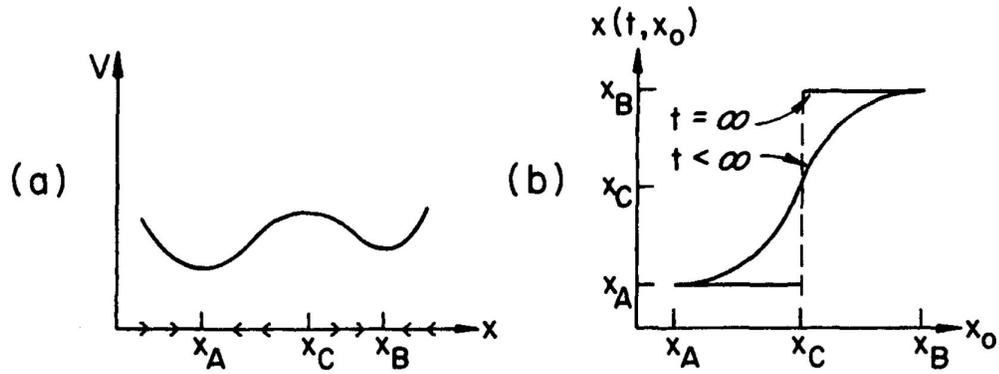


Figura 3.3. Un potencial $V(x)$ de una partícula moviéndose en una dimensión. (a) El potencial $V(x)$. Las flechas en el eje x indican la dirección del movimiento de la partícula en función de x . (b) Posición de la partícula un tiempo después t como función de la posición inicial, para tiempos finitos e infinitos. Fuente: Goldenfeld, Lectures on phase transitions and renormalization group, p.9.

por las constantes de acoplamiento $K_0^{(n)}, K_1^{(n)}$, etc. A medida que n varía, el sistema puede considerarse representado por un punto que se mueve en un espacio cuyos ejes son las constantes de acoplamiento K_0, K_1 , etc. La transformación RG, un sistema dado representado por su conjunto inicial de constantes de acoplamiento, traza una trayectoria en el espacio de constantes de acoplamiento. El conjunto de todas estas trayectorias, generadas por diferentes conjuntos iniciales de constantes de acoplamiento, genera un *flujo de grupo de renormalización* en el espacio de constantes de acoplamiento.

Aunque es posible que la trayectoria del punto representativo trace ciclos límite, atractores extraños, etc., casi siempre se observa que la trayectoria es atraída a puntos fijos. Como veremos, el comportamiento de escala está invariablemente asociado con la dinámica cerca de un determinado tipo de punto fijo. La naturaleza de los puntos fijos y los flujos del punto representativo en el espacio de constantes de acoplamiento, proporcionan información importante que permite determinar el diagrama de fases del sistema [8].

3.3.3. Puntos fijos

El ingrediente crucial del método RG es el reconocimiento de la importancia y el significado físico de los puntos fijos (PF) de la transformación RG. En esta sección, usaremos el desarrollo de Goldenfeld [8] para expresar estas ideas en términos generales.

3.3.3.1. Significado físico de los puntos fijos

Supongamos que conocemos la transformación RG $R_l[K]$. Entonces el punto fijo de la transformación RG es un punto $[K^*]$ en el espacio de constantes de acoplamiento que satisface

$$[K^*] = R_l[K^*]. \quad (3.84)$$

Ahora, bajo la transformación RG, R_l , las escalas de longitud se reducen por un factor l , como hemos discutido. Para cualquier valor particular de las constantes de acoplamiento, podemos calcular la longitud de correlación ξ , que se transforma en R_l de acuerdo con la regla

$$\xi[K'] = \xi[K]/l, \quad (3.85)$$

lo que indica que el sistema se aleja de la criticalidad después de que se haya realizado una transformación RG. En un punto fijo,

$$\xi[K^*] = \xi[K^*]/l, \quad (3.86)$$

que implica que $\xi[K^*]$ sólo puede ser cero o infinito.

Nos referiremos a un punto fijo con $\xi = \infty$ como *punto fijo crítico*, y un punto fijo con $\xi = 0$ como *punto fijo trivial*. En general, una transformación RG tendrá varios puntos fijos. Cada punto fijo tiene su propia cuenca de atracción o dominio: todos los puntos en el espacio de constantes de acoplamiento que se encuentran dentro de la cuenca de atracción de un flujo de punto fijo dado, fluyen hacia el punto fijo y finalmente lo alcanzan después de un número infinito de iteraciones de R_l [8].

Teorema:

Todos los puntos en la cuenca de atracción de un punto fijo crítico tienen una longitud de correlación infinita.

Prueba:

Supongamos que comenzamos con un sistema físico representado por un punto en el espacio de constantes de acoplamiento $[K]$. Después de n iteraciones de la transformación RG, R_l , el sistema está ahora en un punto representativo denotado por $[K^{(n)}]$. Usando la ecuación (3.85), tenemos la secuencia de identidades

$$\xi[K] = l\xi[K^{(1)}] = l^2\xi[K^{(2)}] = \dots = l^N\xi[K^{(N)}] \quad (3.87)$$

para cualquier N . Tomando el límite $N \rightarrow \infty$, el lado derecho de la ecuación (3.87) se convierte en infinito si $\xi[K^*] = \infty$, es decir, si $[K]$ estaba en la cuenca de atracción de un punto fijo crítico. *QED*.

La cuenca de atracción de un punto fijo crítico es a menudo llamada el *manifold* crítico. El hecho de que todos los puntos del *manifold* crítico fluyan hacia el mismo punto fijo es el mecanismo básico de la universalidad, pero no es de ninguna manera la explicación completa. De acuerdo con Goldenfeld [8], la universalidad implica comportamientos expuestos por sistemas cercanos, pero no en el punto crítico. Para completar este tema, tendremos que examinar el comportamiento fuera del *manifold* crítico.

Pronto veremos que los puntos críticos fijos describen el comportamiento crítico singular. Además, los puntos fijos triviales describen las fases masivas del sistema. Goldenfeld [8] también menciona que el conocimiento de la ubicación y la naturaleza de los puntos fijos de una transformación RG permite así determinar el diagrama de fases. Mientras que el comportamiento de los flujos de RG cerca de un punto fijo crítico determina los exponentes críticos.

Aunque hemos asumido implícitamente que los puntos fijos son puntos aislados, este no es el caso. Goldenfeld [8] señala que es posible tener líneas y superficies de puntos fijos.

3.3.3.2. Comportamiento local de flujos RG cerca de un punto fijo

En esta sección aprenderemos del comportamiento de los flujos cerca de un punto fijo. Sea

$$K_n = K_n^* + \delta K_n, \quad (3.88)$$

de modo que el hamiltoniano inicial está cerca del hamiltoniano de punto fijo, es decir, el hamiltoniano con las constantes de acoplamiento iguales a sus valores de puntos fijos: $\mathcal{H} = [K^*] \equiv \mathcal{H}^*$. Sea $\mathcal{H} = \mathcal{H}^* + \delta\mathcal{H}$. Ahora realizaremos una transformación RG: $[K'] = R_l[K]$. Entonces

$$K'_n = K'_n \equiv K_n^* + \delta K'_n, \quad (3.89)$$

con $\delta K'_N$ dado por el teorema de Taylor

$$K'_n \{K_1^* + \delta K_1, K_2^* + \delta K_2, \dots\} = K_n^* + \sum_m \frac{\partial K'_n}{\partial K'_m} \Big|_{K_m=K_m^*} \cdot K_m + O((\delta K)^2), \quad (3.90)$$

de modo que

$$\delta K'_m = \sum_m M_{nm} \delta K_m, \quad (3.91)$$

donde

$$M_{nm} \equiv \frac{\partial K'_n}{\partial K'_m} \Big|_{K=K_m^*}, \quad (3.92)$$

es la *transformación RG linealizada* en la vecindad del punto fijo K^* . La matriz M es real, pero en general no es simétrica, y tendremos que distinguir entre vectores propios izquierdos y vectores propios derechos. En consecuencia, en general, M no es diagonalizable y los autovalores no son necesariamente reales. En la práctica la situación es a menudo más agradable, y M es diagonalizable con valores propios reales. Desarrollaremos las ideas básicas de RG asumiendo que M es simétrica para simplificar. Al final, mencionaremos las modificaciones menores que surgen para las matrices no simétricas [8].

Estudiemos los flujos RG cerca del punto fijo, usando la transformación lineal RG, $M^{(l)}$, donde el superíndice l denota el factor de escala implicado en la transformación RG, R_l . Denotamos los autovalores y los vectores propios por $\Lambda_l^{(\sigma)}$ y $e_n^{(\sigma)}$ respectivamente. Donde σ marca los autovalores y el subíndice n marca el componente del vector e . Usando la convención de la suma de Einstein, tenemos

$$M_{mn}^{(l)} e_m^{(\sigma)} = \Lambda^{(\sigma)} e_n^{(\sigma)}. \quad (3.93)$$

La propiedad de semi-grupo de la ecuación (3.74) implica que

$$M^{(l)} M^{(l')} = M^{(ll')} \quad (3.94)$$

y por lo tanto

$$\Lambda_l^{(\sigma)} \Lambda_{l'}^{(\sigma)} = \Lambda_{ll'}^{(\sigma)}. \quad (3.95)$$

Una forma de resolver la ecuación funcional (3.95) es notar que la configuración $l' = 1$ da $\Lambda_1^{(\sigma)} = 1$. Por lo tanto, diferenciando la ecuación (3.95) con respecto a l' ,

estableciendo $l' = 1$, y resolviendo la ecuación diferencial resultante para $\Lambda_l^{(\sigma)}$ se obtiene

$$\Lambda_l^{(\sigma)} = l^{y_\sigma}, \quad (3.96)$$

siendo y_σ un número a determinar, pero independiente de l .

¿Cómo $[\delta K]$ se transforma en M ? expandimos $[\delta K]$ en términos de los vectores propios de M , y luego vemos cómo los componentes de $[\delta K]$ crecen o disminuyen en las direcciones de los vectores propios.

$$\delta K = \sum_{\sigma} a^{(\sigma)} e^{(\sigma)}, \quad (3.97)$$

escribiendo $[K]$ como un vector $K = (K_1, K_2, \dots)$. Los coeficientes $a^{(\sigma)}$ son obtenidos de la asunción de la ortonormalidad de los vectores propios.

$$a^{(\sigma)} = e^{(\sigma)} \cdot \delta K. \quad (3.98)$$

Se debe tener en cuenta que la propiedad de ortonormalidad generalmente no se mantiene cuando la matriz M no es simétrica. Cuando aplicamos la transformación lineal RG, M , encontramos que

$$\begin{aligned} \delta K' &= M \delta K, \\ &= M \sum_{\sigma} a^{(\sigma)} e^{(\sigma)}, \\ &= \sum_{\sigma} a^{(\sigma)} \Lambda^{(\sigma)} e^{(\sigma)} \equiv \sum_{\sigma} a^{(\sigma)'} e^{(\sigma)}, \end{aligned} \quad (3.99)$$

definiendo así $a^{(\sigma)'}$ como la proyección de $\delta K'$ en la dirección $e^{(\sigma)}$. Esta ecuación es muy importante. Nos dice que algunos componentes de δK crecen bajo $M^{(l)}$ mientras que otros se reducen [8]. Si ordenamos los valores propios por su valor absoluto,

$$|\Lambda_1| \geq |\Lambda_2| \geq |\Lambda_3| \dots \quad (3.100)$$

podemos distinguir tres casos:

- (i) $|\Lambda^{(\sigma)}| > 1$, es decir $y^\sigma > 0$, lo cual implica que $a^{(\sigma)'}$ crece a medida que l incrementa.
- (ii) $|\Lambda^{(\sigma)}| < 1$, es decir $y^\sigma < 0$, lo cual implica que $a^{(\sigma)'}$ se encoge a medida que l

incrementa.

- (iii) $|\Lambda^{(\sigma)}| = 1$, es decir $y^\sigma = 0$, lo cual implica que $a^{(\sigma)'}$ no cambia cuando l incrementa.

El significado de estos tres casos es que después de muchas iteraciones de $M^{(l)}$, sólo las componentes de δK a lo largo de las direcciones $e^{(\sigma)}$ para las cuales (i) se cumple, son importantes. Las proyecciones de δ a lo largo de otras direcciones se encogerán o permanecerán fijas en algún valor finito. Los tres casos anteriores tienen la siguiente terminología:

- (i) \rightarrow **relevante** eigenvalores/direcciones/eigenvectores.
(ii) \rightarrow **irrelevante** eigenvalores/direcciones/eigenvectores.
(iii) \rightarrow **marginal** eigenvalores/direcciones/eigenvectores.

El significado de estas distinciones es que si comenzamos en K cerca de K^* , pero no en el *manifold* crítico entonces los flujos K^* están asociados con valores propios relevantes. Los valores propios irrelevantes corresponden a direcciones de flujo hacia el punto fijo. Los autovectores correspondientes a los valores propios irrelevantes abarcan el *manifold* crítico [8].

Los autovalores marginales resultan estar asociados con correcciones logarítmicas de escalamiento, y son importantes en las dimensiones críticas superior e inferior. El número de valores propios relevantes debe ser, por tanto, la codimensión c del *manifold* crítico, es decir, la diferencia entre las dimensiones del espacio de constantes de acoplamiento y el *manifold* crítico. Es muy importante recordar que los términos relevantes, irrelevantes y marginales deben especificarse siempre con respecto a un punto fijo determinado. Un término en particular en el hamiltoniano puede ser relevante en un punto fijo, pero no en otro [8].

3.3.4. Propiedades globales de los flujos RG

Pronto veremos que el comportamiento local cerca de puntos críticos fijos determina el comportamiento crítico. El comportamiento global de los flujos RG determina el diagrama de fases del sistema. La idea básica es simple: partiendo de cualquier punto en el espacio de constantes de acoplamiento, es decir, en el diagrama de fases, iterar la transformación RG e identificar el punto fijo al que fluye el sistema. El estado del sistema descrito por este punto fijo representa la fase en el

punto original en el diagrama de fases. Sin embargo, es útil primero clasificar los tipos de puntos fijos y elaborar la noción de universalidad. En esta sección, describiremos las propiedades globales de los flujos de una manera cualitativa. El propósito de esta sección es proporcionar al lector alguna perspectiva antes de embarcarse en detalles técnicos [8].

La tabla 3.2 muestra una clasificación de puntos fijos por su codimensión. Aquellos con codimensión 0 no tienen direcciones relevantes. Por lo tanto, las trayectorias sólo fluyen hacia ellos, dando lugar al nombre de *sumidero* o *sink* en inglés. Los sumideros corresponden a fases estables a granel, y la naturaleza de las constantes de acoplamiento en el sumidero caracterizan la fase.

Hay dos tipos de puntos fijos con la codimensión uno: discontinuidad y puntos fijos de continuidad. Los primeros corresponden a puntos en un límite de fase y describen una transición discontinua de fase. Un ejemplo es la línea $H = 0$, cuando $T < T_c$ en un ferromagneto: todos los puntos de esa línea fluyen hasta el punto fijo de discontinuidad a temperatura y campo cero. Un punto fijo de continuidad representa una fase del sistema, pero no sucede nada interesante en su vecindad. Un ejemplo es el punto fijo paramagnético en $H = 0$, $T = \infty$, que atrae puntos en la línea $H = 0$, $T > T_c$. Ambos puntos fijos de codimensión uno son inestables hacia los sumideros: un campo externo infinitesimal hará que los flujos de RG se aproximen a los sumideros, pero no los puntos fijos de codimensión uno.

Los puntos fijos con codimensión mayor o igual a dos describen los puntos de coexistencia de múltiples puntos multicríticos, dependiendo del valor de la longitud de correlación ξ . El caso más simple de la codimensión dos, corresponde a un punto triple ($\xi = 0$) o a un punto crítico ($\xi = \infty$). En cada caso, una forma útil de interpretar la presencia de dos direcciones relevantes es que éstas representan las dos variables que deben ser sintonizadas para colocar el sistema en el punto apropiado. Por ejemplo, para mantener un sistema magnético en el punto crítico, es necesario ajustar el campo externo a cero y la temperatura a la temperatura crítica.

Goldenfeld [8] describe lo que sucede con un sistema cercano a la criticalidad usando la figura 3.4. Las trayectorias de los sistemas en el *manifold* crítico permanecen en el *manifold* y fluyen al punto fijo. Las trayectorias que comienzan ligeramente fuera del *manifold* crítico fluyen inicialmente hacia el punto fijo crítico, pero finalmente son rechazadas desde el *manifold* crítico, porque el punto fijo crítico tiene dos direcciones inestables, es decir, las dos direcciones relevantes. El hecho de que sean los mismos valores propios los que alejan todos los sistemas ligeramente críticos del punto fijo es el origen de la universalidad. Así, los valores iniciales de las constantes

de acoplamiento no determinan el comportamiento crítico. Sólo el comportamiento del flujo cerca del punto fijo controla el comportamiento crítico.

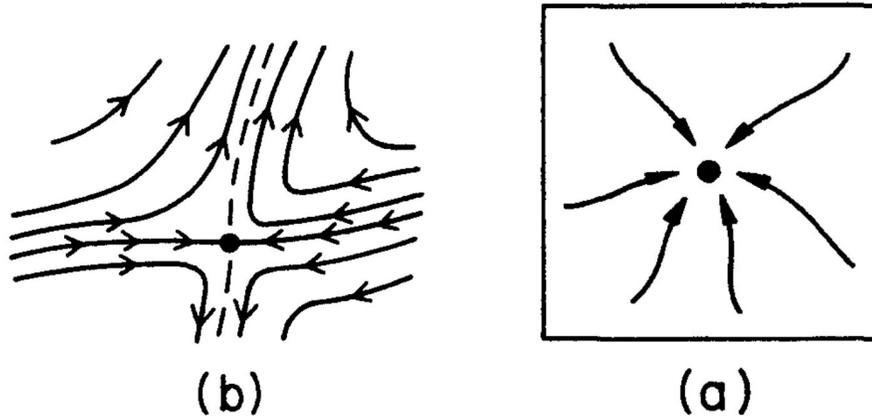


Figura 3.4. Flujos de grupo de renormalización que fluyen cerca de un punto fijo crítico: (a) Vista de los flujos en el *manifold* crítico. (b) Vista de los flujos fuera del *manifold* crítico. Fuente: Goldenfeld, Lectures on phase transitions and the renormalization group.

3.4. Grupo de renormalización de la matriz densidad

Desde su creación en 1992, el método del grupo de renormalización de la matriz de densidad (DMRG) ha evolucionado y mutado. Desde su formulación original en un contexto de materia condensada, se ha adaptado para estudiar problemas en diversos campos, tales como la física nuclear y la química cuántica, convirtiéndose en una de las técnicas numéricas dominantes para simular sistemas fuertemente correlacionados.

DMRG es un método variacional, pero se basa en gran medida en la diagonalización exacta y en las ideas del grupo de renormalización numérica (NRG). La premisa es obtener una función de onda que se aproxima al estado real en un espacio de Hilbert reducido, minimizando la pérdida de información. De cierta manera, puede ser considerado como un algoritmo para comprimir la función de onda. Es variacional porque la solución propuesta tiene la forma muy peculiar de un *estado de producto matricial* (MPS), y también implica un truncamiento de la base. Otro ingrediente es un proceso de decimación en bloque. El DMRG posee características que lo hacen extremadamente poderoso. Es capaz de tratar sistemas muy grandes

con cientos de grados de libertad, y de proporcionar los resultados más precisos para las energías del estado fundamental [7].

3.4.1. Matriz densidad

La matriz de densidad es de primordial importancia para la formulación de la estadística cuántica. En este campo, los términos *operador estadístico* y *operador densidad* se utilizan indistintamente para la matriz densidad [20].

Cuando resolvemos un problema de mecánica cuántica, lo que realmente hacemos es dividir el universo en dos partes [6]. Normalmente suponemos que el sistema comprende todo el universo: para motivar el uso de matrices de densidad, vamos a ver qué sucede cuando se incluye la parte del universo fuera del sistema.

Sea x la variable que describe las coordenadas del sistema, y sea y la que describe el resto del universo. Sea $\phi_i(X)$ un conjunto completo de funciones de onda. La función de onda más general se puede escribir

$$\psi(x, y) = \sum_i C_i(y) \phi_i(x). \quad (3.101)$$

En este punto se empleará la notación de Dirac. Sea $|\phi_i\rangle$ un conjunto completo de vectores en el espacio vectorial que describe el sistema, y que $|\Theta_i\rangle$ sea un conjunto completo para el resto del universo. Las respectivas funciones propias son

$$\phi_i = \langle x | \phi_i \rangle, \quad (3.102)$$

y

$$\theta_i = \langle y | \theta_i \rangle. \quad (3.103)$$

La función de onda más general se puede escribir como

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_{ij} C_{ij} |\phi_i\rangle |\theta_j\rangle, \\ \psi(x, y) &= \langle y | \langle x | \psi \rangle \sum_{ij} C_{ij} \langle x | \phi_i \rangle \langle y | \theta_j \rangle. \end{aligned} \quad (3.104)$$

Comparando la ecuación (3.104) con la ecuación (3.101), se puede observar que

$$C_i(y) = \sum_j C_{ij} \langle y | \theta_j \rangle.$$

Ahora sea A un operador que actúa sólo en el sistema; es decir, A no actúa sobre $|\theta_j\rangle$. Cuando A actúa en los estados del producto (por ejemplo $|\psi\rangle$) lo que realmente se quiere decir es que $A|a\rangle|b\rangle \equiv (A|a\rangle)|b\rangle$. En tal caso A no es igual

$$\sum_{ii'} = A_{ii'}|\phi_i\rangle\langle\phi_{i'}|,$$

pero equivale a

$$\sum_{ii'j} = A_{ii'}|\phi_i\rangle|\theta_j\rangle\langle\theta_j|\langle\phi_{i'}|.$$

Entonces,

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi | A \psi \rangle = \sum_{ijj'} C_{ij}^* C_{i'j'} \langle \theta_j | \langle \phi_i | A | \phi_{i'} \rangle | \theta_{j'} \rangle, \\ &= \sum_{ijj'} C_{ij}^* C_{i'j} \langle \phi_i | A | \phi_{i'} \rangle, \\ &= \sum_{ii'} \langle \phi_i | A | \phi_{i'} \rangle \rho_{i'i}, \end{aligned} \quad (3.105)$$

donde

$$\rho_{i'i} = \sum_j C_{ij}^* C_{i'j} \quad (3.106)$$

es la matriz densidad.

Sea ρ definida como $\rho_{i'i} = \langle \phi_{i'} | \rho | \phi_i \rangle$. Es importante mencionar que ρ opera únicamente en el sistema descrito por x .

$$\begin{aligned} \langle \psi | A | \psi \rangle &= \sum_i \langle \phi_i | A \sum_{i'} |\phi_{i'}\rangle \langle \phi_{i'} | \rho | \phi_i \rangle, \\ &= \sum_i \langle \phi_i | A \rho | \phi_i \rangle, \\ &= \text{Tr} \rho A, \end{aligned} \quad (3.107)$$

donde fue utilizada la propiedad de cerradura.

De la ecuación (3.106) es obvio que ρ es hermítica. Por lo tanto, se puede diagonalizar con un conjunto completo de vectores propios ortogonales $|i\rangle$ y valores propios reales w_i . Sea

$$\rho = \sum_i w_i |i\rangle\langle i|, \quad (3.108)$$

si $A = 1$,

$$\sum_i w_i = \text{Tr} \rho = \langle A \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1.$$

Y si $A = |i'\rangle\langle i'|$,

$$\begin{aligned} w_{i'} = \text{Tr} \rho A = \langle A \rangle &= \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_j (\langle \psi | i' \rangle \langle \theta_j |) (\langle \theta_j | i' \rangle \langle \psi |), \\ &= \sum_j |\langle i' | \langle \theta_j | \rangle \langle \psi | \rangle|^2. \end{aligned} \quad (3.109)$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} w_i &\geq 0, \\ \sum_i w_i &= 1. \end{aligned}$$

Ahora consideramos el concepto de matriz de densidad independientemente de la presentación anterior. Primero empezaremos con la formulación de la mecánica cuántica [6]. Cualquier sistema es descrito por una matriz de densidad ρ , donde esta es de la forma $\sum_i w_i |i\rangle\langle i|$ y

- a. El conjunto $|i\rangle$ es un conjunto completo de vectores ortonormales.
- b. $w_i \geq 0$.
- c. $\sum_i w_i = 1$.
- d. Dado un operador A , su valor esperado se encuentra dado por

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \rho A.$$

Debemos darnos cuenta que

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle = \text{Tr} \rho A &= \sum_{i'} \langle i' | \rho A | i' \rangle = \sum_{i'} w_i \langle i' | i \rangle \langle i | A | i' \rangle, \\
&= \sum_i w_i \langle i | A | i \rangle.
\end{aligned} \tag{3.110}$$

Como $\langle i | A | i \rangle$ es el valor esperado de A en el estado $|i\rangle$, es obvio de (b), (c) y la ecuación (3.110) que w_i puede ser interpretado como la probabilidad de que el sistema esté en el estado $|i\rangle$. Si todos, excepto uno, de los w_i son cero, el sistema está en *estado puro* [18]. Es fácil demostrar que una condición necesaria y suficiente para un estado puro es [6]

$$\rho = \rho^2.$$

Si un sistema se encuentra en un estado puro, $|i_{\text{pure}}\rangle$, entonces la matriz densidad se puede expresar como

$$\begin{aligned}
\rho &= |i_{\text{pure}}\rangle \langle i_{\text{pure}}|, \\
\rho_{ij} &= \langle \phi_i | \rho | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | i_{\text{pure}} \rangle \langle i_{\text{pure}} | \phi_j \rangle, \\
&= \langle \phi_i | i_{\text{pure}} \rangle (\langle \phi_j | i_{\text{pure}} \rangle)^*,
\end{aligned} \tag{3.111}$$

de forma más general,

$$\rho_{ij} = \sum_k w_k \langle \phi_i | k \rangle \langle \phi_j | k \rangle^*. \tag{3.112}$$

Si es posible discutir el sistema en la representación x , la matriz de densidad puede escribirse

$$\begin{aligned}
\rho(x', x) &\stackrel{\text{def.}}{=} \langle x' | \rho | x \rangle = \sum_i \langle x' | i \rangle \langle i | x \rangle, \\
&= \sum_i w_i i(x') i^*(x),
\end{aligned} \tag{3.113}$$

la cual para un estado puro $|i\rangle$, se convierte en

$$\rho(x', x) = i(x') i^*(x). \tag{3.114}$$

En la representación x , el valor esperado se define como

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \rho A = \int dx \langle x | \rho A | x \rangle. \quad (3.115)$$

Pero

$$\begin{aligned} \langle x | \rho A | x \rangle &= \langle x | \rho \left(\int dx' |x'\rangle \langle x'| \right) A | x \rangle, \\ &= \int dx' \langle x | \rho | x' \rangle \langle x' | A | x \rangle = \int dx' \rho(x, x') A(x', x), \\ \langle A \rangle &= \int dx dx' \rho(x, x') A(x', x). \end{aligned} \quad (3.116)$$

Considerando de nuevo el problema de un sistema más el resto del universo, se puede demostrar fácilmente que

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(x', y) A(x', x) \psi(x, y) dx dx' dy,$$

en este caso

$$\rho(x, x') = \int \psi(x, y) \psi^*(x', y) dy. \quad (3.117)$$

Del ejemplo en el que el universo se divide en dos partes, podemos ver que los estados puros no son lo suficientemente generales para describir un sistema mecánico cuántico que no incluya al universo entero. Se desconoce si el universo está o no en un estado puro. Para reformular la mecánica cuántica en términos de las matrices densidad más generales, es conveniente encontrar la ecuación de movimiento de ρ [6].

Para derivar la ecuación de movimiento para una matriz densidad arbitraria, primero recordamos que el operador de la matriz densidad puede escribirse como

$$\rho = \sum_i w_i |i\rangle \langle i|, \quad (3.118)$$

donde el sistema está en el estado $|i\rangle$ con probabilidad w_i . A medida que cambia el tiempo, los posibles estados del sistema también cambian, por lo que

$$\rho(t) = \sum_i w_i |i(t)\rangle \langle i(t)|. \quad (3.119)$$

Es fácil encontrar cómo $|i(t)\rangle$ cambia en el tiempo, $|i(0)\rangle$ se puede expandir en estados propios del hamiltoniano, H . Y también sabemos cómo estos estados propios

cambian con el tiempo. Sea $H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$.

$$|i(t)\rangle = \sum_n |E_n\rangle \langle E_n|i(0)\rangle. \quad (3.120)$$

Se tiene que

$$|i(t)\rangle = \sum_n |E_n\rangle e^{-iE_n t} \langle E_n|i(0)\rangle. \quad (3.121)$$

Por conveniencia tomamos $\hbar = 1$. Si $f(H)$ está definida para cualquier función f por la ecuación $f(H)|E_n\rangle = f(E_n)|E_n\rangle$, podemos escribir

$$|i(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n t} |E_n\rangle \langle E_n|i(0)\rangle = e^{-iHt}|i(0)\rangle. \quad (3.122)$$

Observe que, de acuerdo con la definición de $f(H)$, si $f(E_n)$ puede expandirse en una serie de potencias para cualquier valor propio de H , entonces $f(H)$ puede ser expandido con la misma serie de potencias. Sustituyendo la ecuación (3.122) en la ecuación (3.119), se puede obtener

$$\rho(t) = \sum_i w_i e^{-iHt} |i(0)\rangle \langle i(0)| e^{iHt} = e^{-iHt} \rho(0) e^{iHt}. \quad (3.123)$$

Tomando la derivada de ρ con respecto al tiempo

$$\begin{aligned} \dot{\rho} &= -i(H\rho - \rho H), \\ &= -\frac{i}{\hbar}[H, \rho]. \end{aligned} \quad (3.124)$$

Esta es la ecuación de von Neumann, que también se aplica a hamiltonianos dependientes del tiempo. Esta describe la evolución temporal de la matriz densidad en la representación de Schrödinger. Obsérvese que la ecuación de movimiento para ρ no debe en ningún caso ser confundida con la ecuación de movimiento para los operadores en la representación de Heisenberg. La ecuación de von Neumann es el análogo en mecánica cuántica de la ecuación de Liouville de la mecánica estadística clásica [20].

3.4.2. Diagonalización truncada

En esta sección presentamos el concepto de *diagonalización truncada* como lo hace Feiguin en [7]. La idea es diagonalizar el hamiltoniano en un espacio de Hilbert

restringido. Para lograr esto, tenemos que encontrar la manera en la que vamos a elegir los estados con los que nos vamos a quedar. Debemos considerar si esta elección depende de la representación. Además, tenemos que cuantificar la cantidad de *información* perdida en el proceso. Comenzaremos por describir un procedimiento de diagonalización no convencional que nos ayudará a introducir las principales herramientas necesarias para construir el algoritmo DMRG. Para fines ilustrativos consideramos una cadena de spin-1/2 cuántica descrita por el Hamiltoniano de Heisenberg.

El espacio de Hilbert para el problema de dos espines consiste en cuatro posibles configuraciones de dos espines

$$\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}. \quad (3.125)$$

Este sistema puede ser descrito por el Hamiltoniano del modelo de Heisenberg (2.24). Por simplicidad vamos a utilizar el modelo de Heisenberg isotrópico (2.30) con $J = -2$:

$$\mathcal{H} = S_1^z S_2^z + \frac{1}{2} [S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+]. \quad (3.126)$$

La matriz correspondiente tendrá dimensiones 4×4 . Para calcular esta matriz utilizaremos un álgebra de matrices para obtener primero los operadores para un sitio en el espacio de Hilbert expandido. Esto se hace mediante el siguiente esquema simple. Un operador O_1 que actúa sobre el espín izquierdo, tendrá la forma matricial

$$\tilde{O}_1 = O_1 \otimes \mathbb{I}_2. \quad (3.127)$$

De forma similar, para un operador O_2 actuando en el espín derecho tenemos

$$\tilde{O}_2 = \mathbb{I}_2 \otimes O_2, \quad (3.128)$$

donde introducimos la matriz identidad \mathbb{I}_n de dimensión $n \times n$. El producto de dos operadores que actúan en sitios diferentes se puede obtener como

$$\tilde{O}_{12} = O_1 \otimes O_2. \quad (3.129)$$

Es fácil ver que la matriz del hamiltoniano está dada por

$$\mathcal{H}_{12} = S^z \otimes S^z + \frac{1}{2} [S^+ \otimes S^- + S^- \otimes S^+], \quad (3.130)$$

donde hemos utilizado la matriz de spin S^z y los operadores escalera S^+ y S^- . Imaginemos ahora que añadimos un tercer espín a la derecha de nuestros dos espines. Podemos utilizar el resultado anterior para obtener la nueva matriz hamiltoniana de 8×8

$$\mathcal{H}_3 = \mathcal{H}_2 \otimes \mathbb{I}_2 + S_2^z \otimes S^z + \frac{1}{2} [S_2^+ \otimes S^- + S_2^- \otimes S^+]. \quad (3.131)$$

Aquí utilizamos el operador para un solo espín S_1^z, S_1^\pm y las matrices definidas en las ecuaciones (3.127) y (3.128)

$$S_2^z = \mathbb{I}_2 \otimes S^z, \quad (3.132)$$

$$S_2^\pm = \mathbb{I}_2 \otimes S^\pm. \quad (3.133)$$

Es fácil ver que esto conduce a un esquema de recursión para construir la matriz del hamiltoniano $2^i \times 2^i$ para el i -ésimo paso

$$\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_{i-1} \otimes \mathbb{I}_2 + S_{i-1}^z \otimes S^z + \frac{1}{2} [S_2^+ \otimes S^- + S_{i-1}^- \otimes S^+] \quad (3.134)$$

con

$$S_{i-1}^z = \mathbb{I}_{2^{i-1}} \otimes S^z, \quad (3.135)$$

and

$$S_{i-1}^\pm = \mathbb{I}_{2^{i-2}} \otimes S^\pm. \quad (3.136)$$

Este algoritmo de recursión se puede visualizar como un *bloque* a la izquierda, al cual añadimos nuevos *sitios* o espines a la derecha, uno a la vez, como se muestra en la figura 3.5. Este bloque tiene un *hamiltoniano de bloque* $\mathcal{H}_{\mathcal{L}}$, que se construye iterativamente conectándolo a los nuevos espines a través de los correspondientes términos de interacción.

El proceso descrito anteriormente conduce a un esquema de recursión simple y elegante que nos permite construir la matriz hamiltoniana usando álgebra simple. Sin embargo, esta idea es muy poco práctica. El tamaño de la base, o la dimensión lineal de la matriz, crece con el número de espines N como 2^N . Está claro que este tamaño de matriz no puede ser manejado por nuestra computadora, incluso aunque se implemente la diagonalización de bloques para tratar este problema, como mostramos en un trabajo anterior [4]. Otra solución para hacer frente a este crecimiento

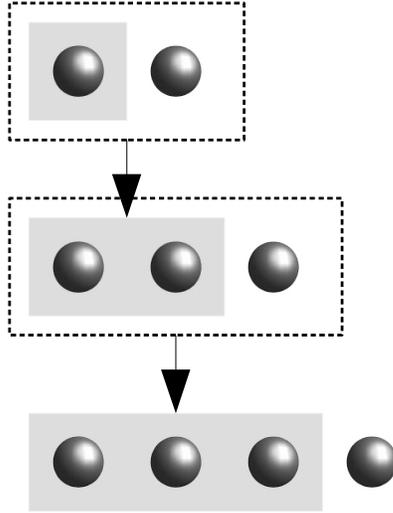


Figura 3.5. Representación gráfica de la recursión de la construcción del Hamiltoniano. Fuente: A. Feguin, *The Density Matrix Renormalization Group. Strongly Correlated Systems*, Springer Series in Solid-State Sciences, Volume 176.

exponencial de la base se remonta al grupo de renormalización numérica de Wilson.

Supongamos que somos capaces de diagonalizar una cadena de spin de Heisenberg, para obtener el estado fundamental como

$$|\Psi\rangle = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} a_{s_1, s_2, \dots, s_N} |s_1, s_2, \dots, s_N\rangle, \quad (3.137)$$

donde la suma corre sobre todas las configuraciones de N espines. Si trazamos los pesos $|a_{s_1, s_2, \dots, s_N}|^2$ en orden decreciente, podemos encontrar una estructura como la representada en el panel izquierdo de la figura 3.6. La mayor parte del peso se concentra en un par de configuraciones. Y el resto del peso se extiende sobre una larga cola. Normalmente sólo unos pocos estados importantes poseen la mayor parte del peso, especialmente en los estados fundamentales que se asemejan a un estado clásico como el antiferromagneto. Entonces podríamos sentir inclinación a tomar un par de tijeras y truncar la base a unos pocos estados con pesos más grandes, y deshacerse del resto. Sin embargo, esta larga cola de estados con pesos pequeños son responsables de la mayor parte de la física interesante: Las fluctuaciones cuánticas. La diferencia de peso de un estado a otro en esta cola no puede ser necesariamente ignorada, ya que son del mismo orden de magnitud.

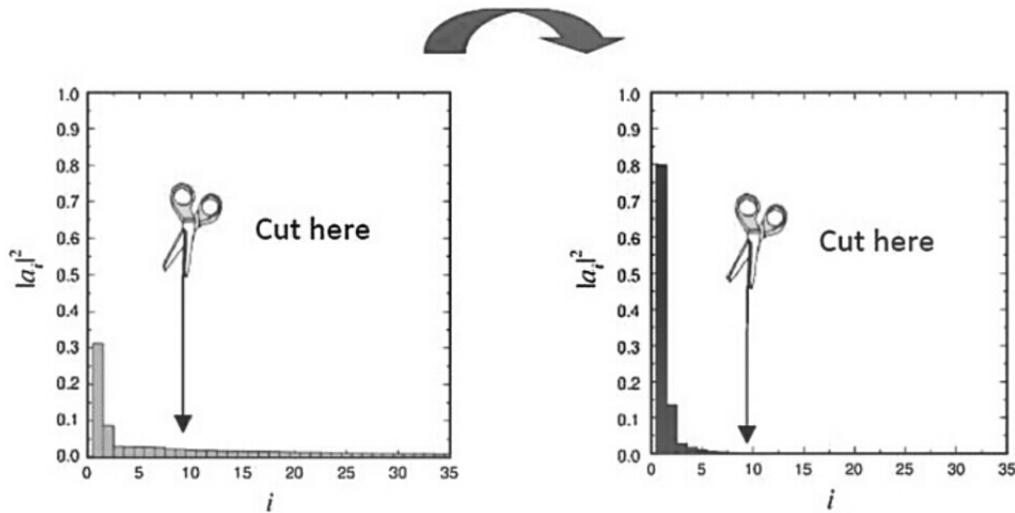


Figura 3.6. Imagen esquemática del truncamiento de base ideal. Fuente: A. Feguin, *The Density Matrix Renormalization Group. Strongly Correlated Systems*, Springer Series in Solid-State Sciences, Volume 176.

Sin embargo, podemos notar un hecho simple: este es un problema que depende de la representación. Por lo tanto, a través de una elección inteligente de base, podemos encontrar una representación en la que la distribución de pesos es tal que todo el peso en la cola se desplace a la izquierda, como se muestra en el panel derecho de la figura 3.6. Entonces, si truncamos la base, no nos preocuparíamos por la pérdida de información. Este es un concepto agradable y simple que podría funcionar en la práctica, si supiéramos cómo elegir la representación óptima. Y resulta que esto no es en principio una tarea fácil. Como aprenderemos, necesitamos un método para cuantificar la información.

3.4.2.1. La idea de la decimación de bloques

Intentemos una idea simple, usando el esquema de recursión descrito anteriormente. En cada paso de la recursión, añadimos un espín a la derecha, y la dimensión de nuestra base crece por un factor 2. En algún punto durante esta recursión, la matriz será demasiado grande para ser tratada. Así que fijemos un número máximo de estados, m , que queremos conservar. En cierto punto durante el proceso, la dimensión de base será mayor que m . Es aquí donde comenzamos a aplicar la *regla de truncamiento*: Diagonalice exactamente la matriz del hamiltoniano y mantenga sólo los m estados con los valores propios más bajos de la matriz de densidad reducida,

que se introducirán luego [7].

A medida que el sistema crece, la base del bloque izquierdo cambia a medida que rotamos la nueva base de estados propios del hamiltoniano. Esto se hace usando una transformación unitaria. Esta matriz U no es otra cosa que la matriz con los estados propios ordenados en columnas. Por lo tanto, agregar un espín al bloque ahora implica dos pasos:

- (i) necesitamos construir los operadores de espín como antes, y
- (ii) rotar la matriz del Hamiltoniano y los operadores de espín a la nueva base.

Supongamos que nuestro antiguo bloque antes de añadir un sitio tiene una base $\{|\alpha_{i-1}\rangle\}$, de dimensión D_{i-1} y el sitio tiene una base $\{|S_i\rangle\}$ de dimensión d . La nueva base de los bloques $\{|\alpha_{i-1}, s_i\rangle\}$ tiene dimensión $d \times D_{i-1}$, de modo que podemos diagonalizarla fácilmente para obtener todos los valores propios y los correspondientes vectores propios $\{|\alpha_{i+1}\rangle\}$. Construimos la matriz U como la matriz unitaria $D_{i-1} \times D_i$ con los $D_i = m$ vectores propios con los valores propios más grandes en las columnas

$$U_{\alpha_{i-1}s_i, \alpha_i} = \langle \alpha_{i-1}s_i | \alpha_i \rangle. \quad (3.138)$$

Antes de la rotación, en general, los operadores tienen los siguiente elementos matriciales

$$\tilde{O}_{\alpha_{i-1}s_i, \alpha'_{i-1}s'_i} = \langle \alpha_{i-1}s_i | O | \alpha'_{i-1}s'_i \rangle, \quad (3.139)$$

ahora podemos rotar todos los operadores a la nueva base

$$\begin{aligned} \tilde{O}_{\alpha_{i-1}, \alpha'_i} &= \langle \alpha_i | O | \alpha'_i \rangle = \sum_{\alpha_{i-1}, s_i} \sum_{\alpha'_{i-1}, s'_i} \langle \alpha_i | \alpha_{i-1}s_i \rangle \langle \alpha_{i-1}s_i | O | \alpha'_{i-1}s'_i \rangle \langle \alpha'_{i-1}s'_i | \alpha_i \rangle, \\ &= \sum_{\alpha_{i-1}, s_i} \sum_{\alpha'_{i-1}, s'_i} (U^\dagger)_{\alpha_i, \alpha_{i-1}s_i} \tilde{O}_{\alpha_i, \alpha'_i} U_{\alpha'_{i-1}s'_i, \alpha'_i}, \end{aligned} \quad (3.140)$$

donde las nuevas matrices tendrán dimensiones $m \times m$. Ahora podemos usar estas matrices para continuar con el proceso de crecimiento en bloque añadiendo otro sitio. Esto puede repetirse hasta que converja la energía por sitio, o hasta que alcancemos el tamaño de sistema deseado.

3.4.3. Truncamiento de la matriz densidad

Según Feiguin [7] el problema fue resuelto por Steve White usando lo que él llamó el *truncamiento de la matriz densidad*. Él se dio cuenta (sin saber en ese momento) que en lugar de deshacerse del estado de alta energía, se tiene que redistribuir el *entrelazamiento cuántico* y minimizar la pérdida de información. Sin embargo, la forma en que formuló el problema no incorporó la idea de entrelazamiento. Este es un concepto que surgió mucho más tarde, después de que las ideas de información cuántica se utilizaran para entender por qué y cuando el DMRG realmente funciona. Antes de introducir estas ideas, describiremos la formulación original del truncamiento de la matriz de densidad.

Con el fin de introducir este nuevo concepto, vamos a utilizar un nuevo esquema: vamos a utilizar dos bloques en lugar de uno, un bloque izquierdo y un bloque derecho. Vamos a hacer crecer ambos bloques simultáneamente utilizando el mismo procedimiento descrito anteriormente: En cada paso añadimos un sitio a la derecha del bloque izquierdo y un sitio a la izquierda del bloque derecho. El estado fundamental puede ser escrito como

$$\Psi = \sum_{i,j} \Psi_{ij} |i\rangle |j\rangle, \quad (3.141)$$

donde las sumas corren sobre todos los estados del bloque izquierdo $|i\rangle$ y el bloque derecho $|j\rangle$, con sus correspondientes coeficientes Ψ_{ij} .

Ahora la idea es la siguiente: una vez que alcancemos la dimensión de base deseada m , rotaremos el bloque izquierdo a una nueva base $|i\rangle \rightarrow |\alpha\rangle$. Nosotros queremos escoger estos estados $|\alpha\rangle$ de tal manera que cuando trunquemos la base, la diferencia S entre el estado fundamental original $|\Psi\rangle$ y la nueva aproximación variacional truncada $|\tilde{\Psi}\rangle$, es minimizada

$$S = \left| |\Psi\rangle - |\tilde{\Psi}\rangle \right|^2, \quad (3.142)$$

donde

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \sum_{\alpha=1}^m \sum_j \Psi_{\alpha j} |\alpha\rangle |j\rangle. \quad (3.143)$$

Vamos a anticiparnos a la solución: escogemos la base $|\alpha\rangle$ dada por m valores propios de la matriz de densidad reducida del bloque izquierdo con los valores propios m más grandes. Para justificar este resultado, primero debemos introducir algunos

conceptos importantes.

3.4.3.1. La matriz densidad reducida

Imaginemos que tenemos un sistema bipartito, compuesto por el subsistema A y el subsistema B , como se muestra en la figura (3.7). El espacio de Hilbert del sistema $A + B$, \mathbb{H} , será dado por el producto tensorial de los espacios de Hilbert de los dos subsistemas

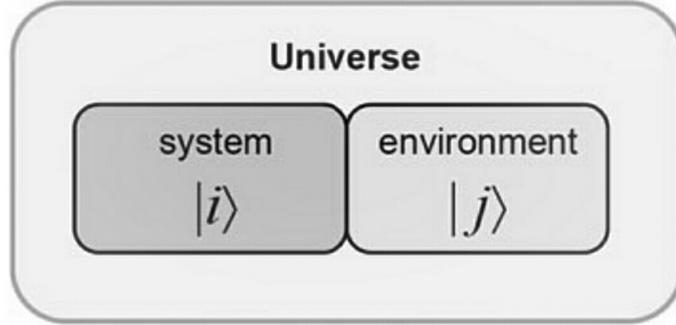


Figura 3.7. Sistema bipartito, compuesto por el subsistema A y el subsistema B . Fuente: A. Feguin, *The Density Matrix Renormalization Group*. Strongly Correlated Systems, Springer Series in Solid-State Sciences, Volume 176.

$$\mathbb{H}_{A+B} = \mathbb{H}_A \otimes \mathbb{H}_B, \quad (3.144)$$

y tendrá la dimensión $D_{A+B} = D_A \times D_B$. Supongamos que el estado de nuestro sistema está descrito por una función de onda normalizada $|\Psi\rangle$ que tiene soporte en \mathbb{H}_{A+B} . Definimos la matriz densidad reducida del subsistema A como

$$\rho_A = Tr_B |\Psi\rangle\langle\Psi|, \quad (3.145)$$

y su correspondiente forma matricial es

$$\rho_{Aii'} = \langle i|\rho_A|i'\rangle = \sum_j \langle ij|\Psi\rangle\langle\Psi|i'j\rangle = \sum_j \Psi_{ij}\Psi_{i'j}^*. \quad (3.146)$$

Este operador describe la matriz densidad de un estado mixto, en el que el sistema A está en contacto con un baño o entorno B . Este es el precio que tenemos que pagar por nuestro desconocimiento del subsistema B .

La matriz densidad reducida tiene algunas propiedades:

- Es hermítica (o simétrica en el caso de matrices reales). Esto significa que sus valores propios son reales.
- Sus valores propios no son negativos.
- La traza equivale a la unidad: $Tr\rho_A = 1$.
- Sus vectores propios $|\alpha\rangle$ y sus valores propios ω_α forman una base ortonormal.

Esto significa que la matriz densidad reducida puede redefinirse en la nueva base de vectores propios, esto se hace de la siguiente manera

$$\rho_A = \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha|, \quad (3.147)$$

con $\omega_{\alpha} \geq 0$ y $\sum_{\alpha} \omega_{\alpha} = 1$. El valor medio de uno observable \tilde{O}_A actuando en un subsistema A , puede ser obtenido de la siguiente maneras

$$\langle \Psi | \tilde{O}_A | \Psi \rangle = Tr \rho_A O_A, \quad (3.148)$$

las mismas consideraciones son válidas para el bloque B .

3.4.3.2. Descomposición en valores singulares

Considere una matriz arbitraria Ψ de dimensiones $D_A \times D_B$. Se puede probar que Ψ se puede factorizar de la siguiente manera

$$|\Psi\rangle = UDV^{\dagger}, \quad (3.149)$$

donde U es una $(D_A \times D_B)$ matriz unitaria, V es una $(D_B \times D_B)$ matriz unitaria, y D es una $(D_B \times D_B)$ matriz diagonal con números reales no-negativos a lo largo de la diagonal y ceros en las demás partes. Esta representación se conoce como *Singular Value Decomposition* (SVD). Dado que U y V son unitarios, satisfacen

$$UU^{\dagger} = \mathbb{I}, \quad (3.150)$$

$$VV^{\dagger} = \mathbb{I}. \quad (3.151)$$

U y V pueden considerarse como matrices de rotación, dado a que sus columnas son vectores ortonormales. Los elementos λ_{α} de la matriz diagonal de D son conocidos como *valores singulares* [7].

Es importante mencionar que se trata de una forma de la SVD. Para otras aplicaciones hay otra forma en la que se prefiere dejar que las matrices U y V sean cuadradas, es decir $\dim(U) = D_A \times D_A$ y $\dim(V) = D_B \times D_B$. Mientras que la matriz de valores singulares, D , es rectangular con dimensión $D_A \times D_B$ [9].

3.4.3.3. La descomposición de Schmidt

Aplicemos el SVD a nuestra función de onda cuántica $|\Psi\rangle$ (3.141), y como ilustración, supongamos que $D_B \leq D_A$. Los coeficientes Ψ_{ij} definen una matriz Ψ . Después de un SVD, pueden ser reescritos como

$$\Psi_{ij} = \sum_{\alpha}^{D_B} U_{i\alpha} \lambda_{\alpha} (V^{\dagger})_{\alpha j} = \sum_{\alpha}^{D_B} U_{i\alpha} \lambda_{\alpha} V_{\alpha j}^*. \quad (3.152)$$

La función de onda puede ser expresada como

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_i^{D_A} \sum_j^{D_B} \sum_{\alpha}^{D_B} U_{i\alpha} \lambda_{\alpha} V_{\alpha j}^* |i\rangle |j\rangle, \\ &= \sum_{\alpha}^{D_B} \left(\sum_i^{D_A} U_{i\alpha} |i\rangle \right) \lambda_{\alpha} \left(\sum_j^{D_B} V_{\alpha j}^* |j\rangle \right), \\ &= \sum_{\alpha}^{D_B} \lambda_{\alpha} |\alpha\rangle_A |\alpha\rangle_B, \end{aligned} \quad (3.153)$$

donde hemos definido los estados $|\alpha\rangle_A = \sum_i U_{i\alpha} |i\rangle$ y $|\alpha\rangle_B = \sum_j V_{\alpha j}^* |j\rangle$. Debido a las propiedades de U y V , estos estados definen una nueva base ortogonal. Esta expresión final se conoce como la descomposición de *Schmidt* del estado $|\Psi\rangle$, y las bases $|\alpha\rangle$ como *las bases de Schmidt* [7].

En general, tenemos que el estado Ψ puede escribirse en la nueva base como:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha}^r \lambda_{\alpha} |\alpha\rangle_A |\alpha\rangle_B, \quad (3.154)$$

donde $r = \min(D_A, D_B)$. Este r es conocido como el rango de Schmidt [9]. En la base de Schmidt, las matrices densidad reducida para los subsistemas A y B son

$$\rho_A = \text{Tr} |\Psi\rangle \langle \Psi| = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^2 |\alpha\rangle_{AA} \langle \alpha|, \quad (3.155)$$

y

$$\rho_B = \text{Tr}|\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^2 |\alpha\rangle_{BB}\langle\alpha|, \quad (3.156)$$

En este punto, tenemos unas observaciones interesantes:

- Los eigenvalores de la matriz densidad reducida son $\omega_{\alpha} = \lambda_{\alpha}^2$, el cuadrado de los valores singulares.
- Las dos matrices reducidas, ρ_A y ρ_B , comparten el espectro.
- Los componentes de la base de Schmidt son vectores propios de las matrices densidad reducidas.

3.4.3.4. Optimización de la función de onda truncada

Volvemos al problema original de optimizar la función de onda en una base reducida. Para resolverlo, vamos a reformular la pregunta: Dada una matriz Ψ , ¿cuál es la matriz óptima $\tilde{\Psi}$ con rango fijo m que minimiza la distancia de Frobenius entre las dos matrices? resulta que este es un problema bien conocido llamado *aproximación de baja clasificación* [7].

Si ordenamos los valores propios de la matriz de densidad reducida en orden decreciente $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_m, \dots, \omega_r$, es fácil ver que la distancia de Frobenius entre las dos matrices viene dada por

$$S = \left| |\Psi\rangle - |\tilde{\psi}\rangle \right|^2 = \sum_{m+1}^r \omega_i. \quad (3.157)$$

Esto demuestra que la base óptima está dada por los vectores propios de la matriz de densidad reducida con los valores propios más grandes de m .

3.4.4. DMRG de tamaño infinito

Las consideraciones anteriores nos permiten ahora introducir el algoritmo DMRG de una manera muy natural. Vamos a presentarlo en la formulación tradicional y siguiendo las ideas de Feiguin [7]. Comenzaremos con el algoritmo de tamaño infinito, seguido por el esquema de tamaño finito.

La idea principal detrás del algoritmo de tamaño infinito consiste en hacer crecer los bloques izquierdo y derecho añadiendo un sitio a la vez. A medida que agregamos sitios, la base de los bloques crecerá, hasta que alcancemos el número máximo deseado de estados m . En este punto necesitamos comenzar a aplicar el

truncamiento de la matriz de densidad en ambos bloques. Este proceso se repite hasta alcanzar el tamaño del sistema deseado, o si el error en la energía está por debajo de una tolerancia predefinida.

El algoritmo ilustrado en la figura 3.8 se podría esbozar como a continuación:

- Construir todas las matrices del operador para un hamiltoniano de un solo sitio. Y también los operadores involucrados en las interacciones entre el sitio y el resto del sistema.
- Comenzar a crecer los bloques agregando sitios únicos. Suponemos que el espacio de Hilbert para el sitio único tiene dimensión d .
- Cuando el tamaño de los bloques es mayor que $d \times m$, comenzar a aplicar el truncamiento de la matriz de densidad como sigue:
 1. Usar una rutina adecuada de la biblioteca, diagonalizar el hamiltoniano completo (a veces llamado el súper hamiltoniano) de los dos bloques combinados (a veces llamado como superbloque), para obtener el estado fundamental $|\Psi\rangle = \sum_{ij} \Psi_{ij} |i\rangle |j\rangle$.
 2. Calcular la matriz densidad reducida del bloque izquierdo y del bloque derecho. Cuando el sistema es simétrico bajo reflexiones, sólo se necesita una de ellas.
 3. Para cada uno de los bloques, diagonalizar la matriz de densidad para obtener el espectro completo y los vectores propios.
 4. Truncar la base manteniendo sólo los vectores propios m con los valores propios más grandes.
 5. Rotar el hamiltoniano y los operadores involucrados en las interacciones entre bloques a la nueva base.
 6. Añadir un nuevo sitio al bloque izquierdo y derecho, para construir nuevos bloques de dimensión $d \times m$, y repetir los pasos de diagonalización y truncamiento. Detener cuando se alcance el tamaño del sistema deseado, o el error en la energía se encuentre por debajo de una tolerancia predefinida.

En los primeros días de DMRG se suponía que este esquema conduciría a una buena aproximación de las propiedades del sistema en el límite termodinámico. Hoy se sabe que la mejor manera de alcanzar el límite termodinámico es utilizando el

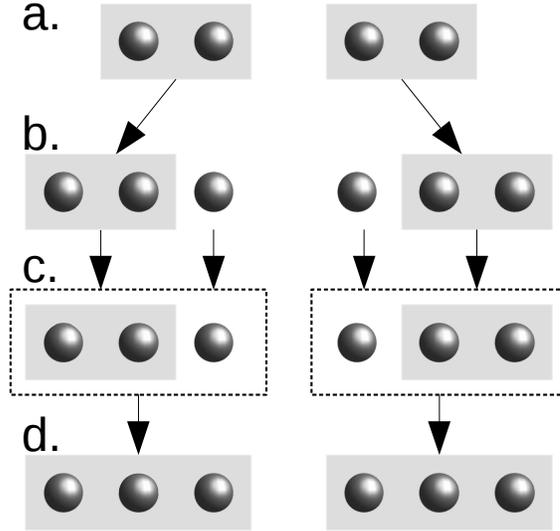


Figura 3.8. Ilustración del paso a paso del esquema del crecimiento de bloques en el algoritmo del DMRG de tamaño infinito. Fuente: A. Feguin, *The Density Matrix Renormalization Group. Strongly Correlated Systems*, Springer Series in Solid-State Sciences, Volume 176.

algoritmo de tamaño finito en sistemas de longitud fija y realizando un cuidadoso análisis del tamaño finito de los resultados.

Vamos a explicar algunos de los pasos del algoritmo del DMRG de tamaño infinito con más detalle.

3.4.4.1. Adición de un sitio a un bloque

Como hicimos en la sección 3.4.2, podemos agregar sitios a los bloques mediante la realización de productos tensoriales de los operadores en el bloque, y los operadores de un solo sitio.

Primero asumimos que estamos en la i -ésima iteración del algoritmo, con nuestros bloques izquierdo y derecho de longitud i . Vamos a etiquetar a nuestros estados D_L de la base para el bloque izquierdo $\{|\alpha_i\rangle\}$, y nuestros d estados de la base para un solo sitio que viene a la derecha $\{|s_{i+1}\rangle\}$. Cuando añadimos el sitio al bloque, obtenemos una nueva base para el nuevo bloque combinado $|\alpha_{i+1}\rangle = |\alpha_i\rangle \otimes |s_{i+1}\rangle$.

Supongamos con fines ilustrativos que estamos tratando una vez más con la cadena isotrópica de Heisenberg con $J = -2$. Todas estas ideas pueden generalizarse fácilmente a modelos arbitrarios. Como lo hicimos en la sección de diagonalización

exacta, obtenemos la nueva matriz hamiltoniana para el bloque combinado como

$$\mathcal{H}_{L,i+1} = \mathcal{H}_{L,i} \otimes \mathbb{I}_2 + S_{L,i}^z \otimes S^z + \frac{1}{2} (S_{L,i}^+ \otimes S^- + S_{L,i}^- + S_{L,i}^- \otimes S^+). \quad (3.158)$$

En esta expresión los operadores $S_{L,i}$ están en la base $|\alpha_i\rangle$, mientras que los otros se definen en la base de un solo sitio.

Una expresión similar se aplica al bloque derecho, que se obtiene del sitio único en la posición $i+2$, con la base $\{|s_{i+2}\rangle\}$ y la dimensión d , y el bloque de la derecha con base $\{|\beta_{i+3}\rangle\}$ y dimensión D_R

$$\mathcal{H}_{R,i+2} = \mathbb{I}_2 \otimes \mathcal{H}_{R,i+3} + S^z \otimes S_{R,i+3}^z + \frac{1}{2} (S^+ \otimes S_{R,i+3}^- + S^- \otimes S_{R,i+3}^+). \quad (3.159)$$

3.4.4.2. La construcción del super hamiltoniano

Ahora necesitamos combinar los bloques izquierdo y derecho para formar el super hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{L,i+1} + \mathcal{H}_{R,i+2} + S_{i+1}^z S_{i+2}^z + \frac{1}{2} (S_{i+1}^+ S_{i+2}^- + S_{i+1}^- S_{i+2}^+) \quad (3.160)$$

donde $\mathcal{H}_{L(R)}$ se obtuvieron anteriormente, y sólo implican términos en el bloque izquierdo (derecho). Los sitios individuales en las posiciones $i+1$ y $i+2$ fueron absorbidos por los bloques izquierdo y derecho, respectivamente. Para construir las interacciones, tenemos que rotar los operadores correspondientes a la nueva base de los bloques

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \mathcal{H}_{L,i+1} \otimes \mathbb{I}_{D_R \times 2} + \mathbb{I}_{D_L \times 2} \otimes \mathcal{H}_{R,i+2} \\ & + S_{L,i+1}^z \otimes S_{R,i+2}^z + \frac{1}{2} S_{L,i+1}^+ \otimes S_{R,i+2}^- + \frac{1}{2} S_{L,i+1}^- \otimes S_{R,i+2}^+. \end{aligned} \quad (3.161)$$

3.4.4.3. Truncación de la matriz densidad y la rotación a la nueva base

El proceso de truncamiento es similar al uso en el grupo de renormalización numérica, pero en lugar de usar la matriz de vectores propios del hamiltoniano, usamos los vectores propios $\{|\alpha\rangle\}, \{|\beta\rangle\}$ de la matriz densidad reducida izquierda y derecha [7]. Por lo tanto, los nuevos estados de base para el bloque izquierdo y

derecho están relacionados con los estados en el paso anterior de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
|\alpha_{i+1}\rangle &= \sum_{s_{i+1}, \alpha_i} \langle \alpha_i s_{i+1} | \alpha_{i+1} \rangle |\alpha_i s_{s+i}\rangle, \\
&= \sum_{s_{i+1}, \alpha_i} (U_L)_{\alpha_i s_{i+1}, \alpha_{i+1}} |\alpha_i s_{i+1}\rangle,
\end{aligned} \tag{3.162}$$

$$\begin{aligned}
|\beta_{i+2}\rangle &= \sum_{s_{i+2}, \beta_{i+3}} \langle s_{i+2} \beta_{i+3} | \beta_{i+2} \rangle |s_{i+2} \beta_{i+3}\rangle, \\
&= \sum_{s_{i+2}, \beta_{i+3}} (U_R)_{s_{i+2}, \beta_{i+3}, \beta_{i+2}} |\alpha_i s_{i+2} \beta_{i+3}\rangle.
\end{aligned} \tag{3.163}$$

donde

$$(U_L)_{\alpha_i s_{i+1}, \alpha_{i+1}} = \langle \alpha_i s_{i+1} | \alpha_{i+1} \rangle, \tag{3.164}$$

y

$$(U_R)_{s_{i+2} \beta_{i+3}, \beta_{i+2}} = \langle s_{i+2} \beta_{i+3} | \beta_{i+2} \rangle. \tag{3.165}$$

Si mantenemos sólo m estados, las matrices $U_{L(R)}$ tendrán dimensiones $D_{L(R)} d \times m$. Si la base ya se había truncado en el paso anterior, entonces $D_{L(R)} = m$. Ahora podemos usar estas transformaciones para obtener los elementos de la matriz para todas las operaciones en la nueva base truncada. Por ejemplo, un operador que actúa en un sitio dentro del bloque izquierdo se transformará como:

$$\begin{aligned}
(\tilde{O}_{L,i+1})_{\alpha_{i+1}, \alpha'_{i+1}} &= \langle \alpha_{i+1} | O | \alpha'_{i+1} \rangle, \\
&= \sum_{\alpha_i, s_{i+1}} \sum_{\alpha'_i, s'_{i+1}} \langle \alpha_{i+1} | \alpha_i s_{i+1} \rangle \langle \alpha_i s_{i+1} | O | \alpha'_i s'_{i+1} \rangle \langle \alpha'_i s'_{i+1} | \alpha'_{i+1} \rangle, \\
&= \sum_{\alpha_i, s_{i+1}} \sum_{\alpha'_i, s'_{i+1}} (U_L^\dagger)_{\alpha_{i+1}, \alpha_i s_{i+1}} (\tilde{O}_{L,i})_{\alpha_i s_{i+1}, \alpha'_i s'_{i+1}} (U_L)_{\alpha'_i s'_{i+1}, \alpha'_{i+1}},
\end{aligned} \tag{3.166}$$

se puede obtener una expresión similar para los operadores en el bloque derecho.

3.4.5. DMRG de tamaño finito

Según Feiguin [7]: *la manera correcta de alcanzar el límite termodinámico con DMRG es estudiando sistemas finitos y realizando un análisis de tamaño finito. Para estudiar sistemas finitos, debe aplicarse una generalización de las ideas anteriores.* El DMRG de tamaño finito (ver figura 3.9) puede resumirse de la siguiente manera:

- Ejecutar el algoritmo de tamaño infinito hasta que se alcance el tamaño del sistema deseado. Durante este proceso, almacenar todos los bloques izquierdo y derecho, con sus correspondientes operadores y transformaciones de base. Este paso se denomina normalmente *warmup*.
- Una vez que se alcance el tamaño del sistema deseado, se comienzan a realizar *DMRG sweeps* o barridos, de derecha a izquierda y de izquierda a derecha para optimizar las bases y mejorar la precisión. Un barrido de izquierda a derecha se describe como sigue:
 1. Añadir un sitio al bloque izquierdo usando la misma idea del DMRG de tamaño finito. Dado que el tamaño total del sistema debe mantenerse fijo, necesitamos reducir el bloqueo correcto. Esto se hace usando el bloque derecho del paso de tamaño infinito o del barrido anterior de derecha a izquierda.
 2. Usar una rutina de biblioteca adecuada, diagonalizar el súper Hamiltoniano de los dos bloques combinados, igual que para el DMRG de tamaño infinito.
 3. Calcular la matriz de densidad reducida del bloque izquierdo.
 4. Diagonalizar la matriz de densidad para obtener el espectro completo y los vectores propios.
 5. Truncar la base manteniendo sólo m eigenvectores con los valores propios más grandes.
 6. Rotar el Hamiltoniano y los operadores del bloque izquierdo implicados en las interacciones entre bloques a la nueva base.
 7. Iterar hasta llegar al extremo derecho del sistema, con un bloque derecho que contenga un solo sitio. De esta forma se completa el barrido de izquierda a derecha.

- Realizar un barrido de derecha a izquierda, creciendo el bloque correcto de un sitio a la vez y usando el bloque izquierdo del barrido anterior de izquierda a derecha.
- Re-iterar el barrido. Parar cuando el cambio en la energía se encuentre por debajo de una tolerancia predefinida. Normalmente se detiene el proceso en un punto en el cual ambos bloques tienen el mismo tamaño, es decir, cuando tenemos una configuración simétrica.

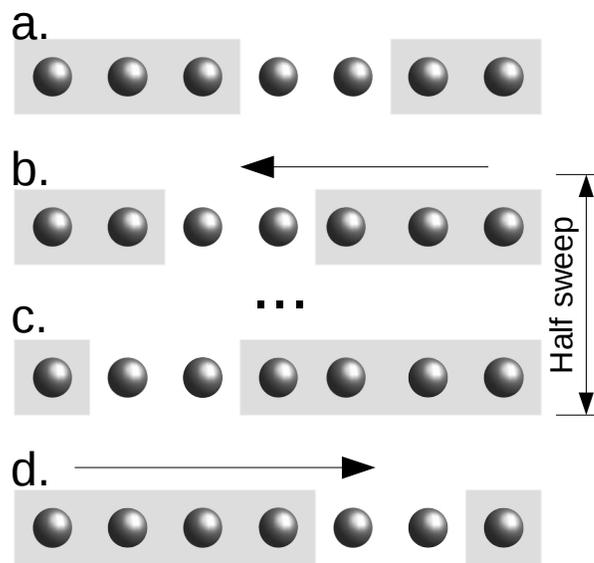


Figura 3.9. Ilustración esquemática del algoritmo del DMRG de tamaño finito. Fuente: A. Feguin, *The Density Matrix Renormalization Group. Strongly Correlated Systems*, Springer Series in Solid-State Sciences, Volume 176.

El DMRG puede ser formulado como un método variacional, en el cual los parámetros se mejoran continuamente para minimizar un funcional de energía. Intuitivamente una manera de verlo es imaginando a un demonio probando el entorno alrededor del bloque para que los estados óptimos mejoren la base que representa al estado fundamental. Estos estados son *absorbidos* dentro del bloque por la matriz de densidad y sus vectores propios [7].

Como se ha descrito anteriormente, el bloque de contraído se sustituye por el bloque del barrido anterior en la dirección opuesta. Esto significa que toda la información sobre el bloque y sus operadores necesita ser almacenada.

3.4.5.1. Predicción de la función de onda

A cada paso del barrido o *sweep* encontramos que tenemos que obtener el estado fundamental del hamiltoniano usando alguna rutina de diagonalización adecuada. Estos algoritmos convergen iterativamente al estado fundamental, típicamente partiendo de alguna semilla aleatoria. Dependiendo de la precisión deseada, habría que realizar una serie de iteraciones, digamos entre 20 y 100, aplicando el hamiltoniano a un nuevo estado en cada iteración, hasta que se alcance la convergencia. En las primeras obras, White se dio cuenta de que el proceso podría acelerarse si utilizamos el estado fundamental del paso anterior en el barrido, como semilla inicial para la diagonalización. Todo lo que tendría que hacer es transformar el viejo estado fundamental en la nueva base. Este proceso se conoce generalmente como *predicción de función de onda* o *transformación de función de onda* [7].

Asumimos que obtuvimos el estado fundamental de nuestro Hamiltoniano, que antes del cambio de base se escribe como

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_i, s_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3}} \langle \alpha_i s_{i+1} s_{i+2} \beta_{i+3} | \Psi \rangle | \alpha_i s_{i+1} s_{i+2} \beta_{i+3} \rangle. \quad (3.167)$$

Después del cambio de base, añadimos un sitio del bloque izquierdo, y tomamos uno del bloque derecho

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_{i+1}, s_{i+2}, s_{i+3}, \beta_{i+4}} \langle \alpha_{i+1} s_{i+2} s_{i+3} \beta_{i+4} | \Psi \rangle | \alpha_{i+1} s_{i+2} s_{i+3} \beta_{i+4} \rangle. \quad (3.168)$$

Después de un poco de álgebra y asumiendo que $\sum_{\alpha_i} |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \approx 1$ y $\sum_{\beta_i} |\beta_i\rangle\langle\beta_i| \approx 1$ después del truncamiento, podemos obtener

$$\begin{aligned} \langle \alpha_{i+1} s_{i+2} s_{i+3} \beta_{i+4} | \Psi \rangle &\approx \sum_{\alpha_i, s_{i+1}, \beta_{i+3}} \langle \alpha_{i+1} | \alpha_i s_{i+1} \rangle \langle s_{i+3} \beta_{i+4} | \beta_{i+3} \rangle \langle \alpha_i s_{i+1} s_{i+2} \beta_{i+3} | \Psi \rangle, \\ &= \sum_{\alpha_i, s_{i+1}, \beta_{i+3}} (U_L^\dagger)_{\alpha_{i+1}, \alpha_i s_{i+1}} (U_R)_{s_{i+3} \beta_{i+4}, \beta_{i+3}} \langle \alpha_i s_{i+1} s_{i+2} \beta_{i+3} | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (3.169)$$

Esta operación tiene relativamente poco costo computacional, especialmente después de considerar que reducirá el cálculo del estado fundamental.

3.5. Entrelazamiento cuántico

El entrelazamiento cuántico es una propiedad de sistemas mecánicos cuánticos con dos o más componentes. En la mecánica cuántica un estado puede ser descrito como una superposición lineal de estados base. La mayoría de las veces, no podemos describir el estado de una parte del sistema sin el conocimiento del resto. Para ilustrar esta idea, seguimos el enfoque de Feiguin [7]. Consideremos el caso simple de dos espines, y asumamos que hay un estado que se puede describir como:

$$|\Psi\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (3.170)$$

Podemos ver que esto es equivalente a

$$|\Psi\rangle = (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \otimes (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle). \quad (3.171)$$

Aunque partimos de un estado que parecía tener una estructura compleja, encontramos que los dos espines no están *entrelazados*. Esto significa que sus kets de estado pueden ser escritos como el producto de los estados de los espines individuales, i.e. los estados son *factorizables*. Los dos espines llevan la información individualmente, y el conocimiento del estado de un espín no nos dice nada sobre el estado del segundo espín.

Otro ejemplo es el siguiente estado

$$|\Psi\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle, \quad (3.172)$$

y resulta que no se puede separar, es un estado *no factorizable*. Si miramos un espín y está apuntando en una dirección, sabemos que el otro espín estará apuntando en la dirección opuesta. Para este ejemplo particular, el estado de un espín lleva toda la información sobre el estado del segundo espín. Vamos a ver más adelante que este caso se refiere como el estado de *máximo entrelazamiento* de dos espines. Es importante mencionar que en el caso de una cadena de espines de Heisenberg a $T = 0K$ este estado corresponde a una fase antiferromagnética. En el caso de

$$|\Psi\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \quad (3.173)$$

El estado es claramente factorizable y corresponde a un estado ferromagnético, como vimos antes.

3.5.1. Entrelazamiento y la descomposición de Schmidt

Supongamos que definimos una partición en nuestro sistema en partes A y B como lo hemos estado haciendo todo el tiempo durante nuestra discusión. Un estado general de nuestro sistema puede ser expresado nuevamente como

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} \Psi_{ij} |i\rangle |j\rangle, \quad (3.174)$$

Donde los estados $\{|i\rangle\}$ y $\{|j\rangle\}$ forman parte de A y B , y tienen dimensiones D_A y D_B , respectivamente. Esto significa que para describir el problema necesitamos conocer $D_A \times D_B$ coeficientes complejos.

Hemos visto, que a través de una descomposición SVD, podemos reescribir el estado como

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha}^r \lambda_{\alpha} |\alpha\rangle |\alpha\rangle \quad (3.175)$$

Donde $r = \min(D_A, D_B)$, los estados $\{|\alpha\rangle_A\}$ y $\{|\alpha\rangle_B\}$ forman una base ortogonal para los subsistemas.

Observamos de inmediato que si el rango de Schmidt es $r = 1$, entonces la función de onda se reduce a un producto de estados, *desentrelazando* los dos subsistemas.

Feiguin [7] señala que con exactitud o fidelidad con la que seamos capaces de representar el estado al truncar la base, dependerá claramente del comportamiento de los coeficientes de Schmidt λ_{α} . Se debe recordar que estos están relacionados con los valores propios de las matrices densidad reducidas como $\omega_{\alpha} = \lambda_{\alpha}^2$. Y por lo tanto, se concluye que la eficiencia del DMRG estará completamente determinada por el espectro de las matrices densidad reducidas, el llamado *espectro de entrelazamiento*, de las siguientes maneras:

- Si los valores propios decaen muy rápido, entonces introducimos poco error descartando los más pequeños.
- Pocos coeficientes significan menos entrelazamiento. En el caso extremo de un solo coeficiente distinto de cero, la función de onda es un estado de productos en completado desentrelazamiento.
- DMRG minimiza la pérdida de información. Cuanto más cerca el estado se asemeje a un producto de estados, más eficiente será nuestro truncamiento.

La cantidad de entrelazamiento es en realidad siempre la misma. Sin embargo, cuando rotamos a una nueva base, la seleccionamos de tal manera que los coeficientes de Schmidt se concentren en el menor número posible de estados. Y por lo tanto, podemos descartar el resto con una mínima pérdida de información.

3.5.2. Entropía de entrelazamiento

Según Ramírez [16], hay muchas medidas de entrelazamiento, tales como la entropía de von Neumann, las entropías de Rényi, etc. Pero en este trabajo nos centramos en la primera para cuantificar el entrelazamiento. En términos de la matriz densidad reducida, la entropía de entrelazamiento está dada por

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A) = -\text{Tr}(\rho_B \log \rho_B), \quad (3.176)$$

Feiguin [7] la expresa en términos de los coeficientes de Schmidt λ_α de la siguiente manera

$$S = -\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^2 \log \lambda_{\alpha}^2. \quad (3.177)$$

Con el fin de mostrar lo que esta cantidad representa, vamos a analizar de nuevo el estado

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (3.178)$$

La matriz densidad reducida para el primer espín se puede obtener trazando sobre el segundo espín

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}. \quad (3.179)$$

Este estado es considerado como el estado de *entrelazamiento máximo*. Esto sucede cuando la matriz densidad reducida es proporcional a la identidad. La entropía de entrelazamiento en este caso es

$$S = -\frac{1}{2} \log \left(\frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \log \left(\frac{1}{2} \right) = \log 2. \quad (3.180)$$

Ramírez [16] señala que para un estado puro, $S_A = S_B$. La entropía de von Neumann satisface $S_A \geq 0$. Y también enfatiza que $S_A = 0$ sólo para estados

factorizables, es decir cuando no hay entrelazamiento.

Tabla 3.2. Clasificación de los puntos fijos. Fuentes: Goldenfeld, Lectures on phase transitions and the renormalization group, p.247.

Codimensión	Valor de ξ	Tipo de punto fijo	Dominio físico
0	0	Sumidero	Fase masiva
1	0	Discontinuidad PF	Plano de coexistencia
1	0	Continuidad PF	Plano de coexistencia
2	0	Punto triple	Punto triple
2	∞	PF crítico	Manifold crítico
Mayor que 2	∞	Punto multicrítico	Punto multicrítico
Mayor que 2	0	Coexistencia múltiple PF	Coexistencia múltiple

4. RESULTADOS

4.1. Diagonalización exacta

4.1.1. Resultados analíticos

Las versiones XX, XXX y XXZ del modelo de Heisenberg fueron resueltos analíticamente para dos y cuatro sitios. Esto fue hecho por diagonalización exacta utilizando WxMaxima. Los resultados que fueron encontrados analíticamente fueron usados para tener una noción del diagrama de fase para cada modelo a una temperatura del cero absoluto y para encontrar puntos críticos.

4.1.1.1. Heisenberg XX

Dos sitios

El Hamiltoniano que describe la dinámica de una cadena de Heisenberg XX de dos sitios es

$$\mathcal{H}_{XX2} = -\frac{J}{4} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+ + S_2^+ S_1^- + S_2^- S_1^+). \quad (4.1)$$

El diagrama de fases fue construido usando la técnica de cruce de niveles, esto se hizo graficando la energía del estado fundamental como función de la constante de intercambio, ver figura 4.1.

Se puede notar que hay una discontinuidad en $J = 0$. Para identificar a qué fase corresponde cada estado, se midió la magnetización por sitio, ver tabla 4.1. Para ambas condiciones ($J < 0$ y $J > 0$) el estado se encuentra en una fase antiferromagnética. Lo que significa que $J = 0$, no es un punto crítico y por lo tanto no hay una transición de fase.

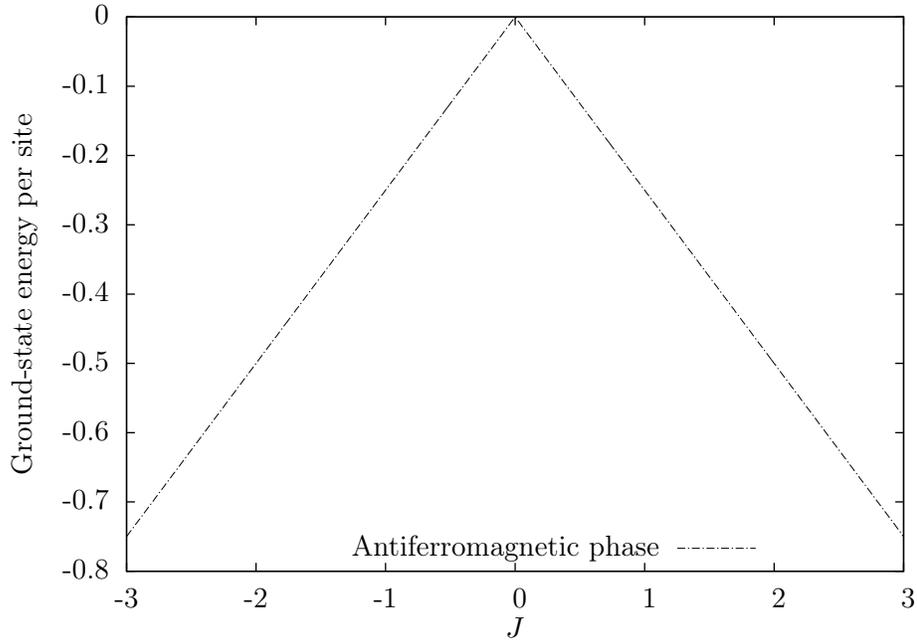


Figura 4.1. Diagrama de fases de la solución analítica del modelo XX para una cadena de dos sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia.

Tabla 4.1. Estado fundamental del modelo XX para dos sitios. Fuente: elaboración propia.

Estado	Condición	E_0 por sitio	M por sitio
$\frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$	$J < 0$	$\frac{J}{4}$	0
$\frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	$J > 0$	$-\frac{J}{4}$	0

Cuatro sitios

El Hamiltoniano que describe la dinámica de una cadena de Heisenberg XX de cuatro sitios es

$$\mathcal{H}_{XX4} = -\frac{J}{4}(S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+ + S_2^+ S_3^- + S_2^- S_3^+ + S_3^+ S_4^- + S_3^- S_4^+ + S_4^+ S_1^- + S_4^- S_1^+). \quad (4.2)$$

El diagrama de fases se obtuvo nuevamente por cruce de niveles. Este diagrama es similar al diagrama para dos sitios, ver figura 4.2. Obsérvese que la discontinuidad se encuentra nuevamente en $J = 0$ y para ambas condiciones ($J < 0$ y $J > 0$) el estado se encuentra en una fase antiferromagnética.

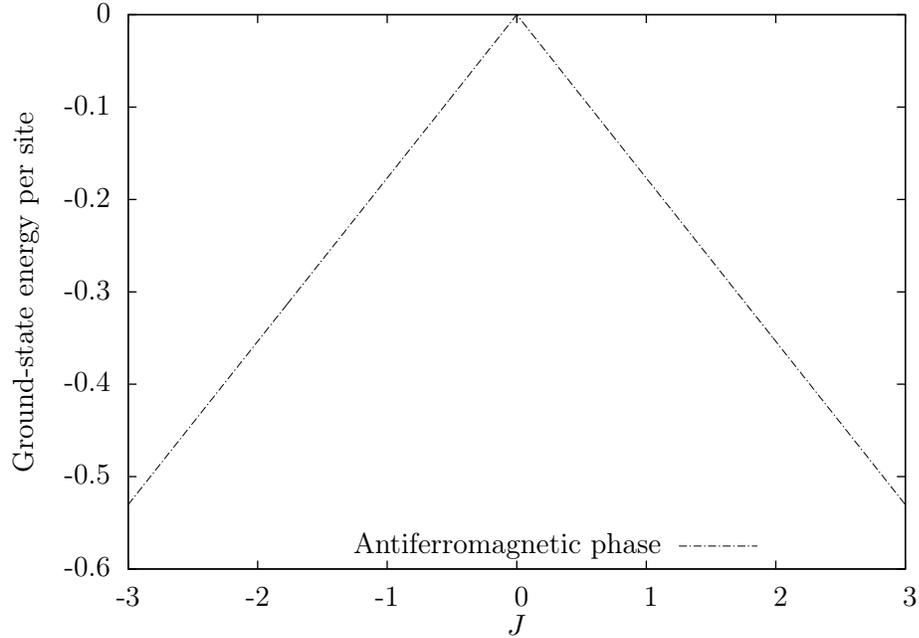


Figura 4.2. Diagrama de fases de la solución analítica del modelo XX para cuatro sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia.

La energía por sitio del estado fundamental está dada por

$J < 0$

$$E_0 = \frac{J\sqrt{2}}{8}. \quad (4.3)$$

$J > 0$

$$E_0 = -\frac{J\sqrt{2}}{8}. \quad (4.4)$$

Por lo tanto, podemos observar que con el aumento de tamaño de una cadena de dos a cuatro sitios, resulta en un aumento de la pendiente en la energía por sitio del estado fundamental.

4.1.1.2. Heisenberg XXX

Dos sitios

El Hamiltoniano que describe la dinámica de una cadena de Heisenberg XXX de dos sitios es

$$\mathcal{H}_{XX2} = -\frac{J}{2} \left[S_1^z S_2^z + S_2^z S_1^z + \frac{1}{2} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+ + S_2^+ S_1^- + S_2^- S_1^+) \right]. \quad (4.5)$$

El diagrama de fases también fue encontrado por la técnica de cruce de niveles y se puede encontrar en la figura 4.3.

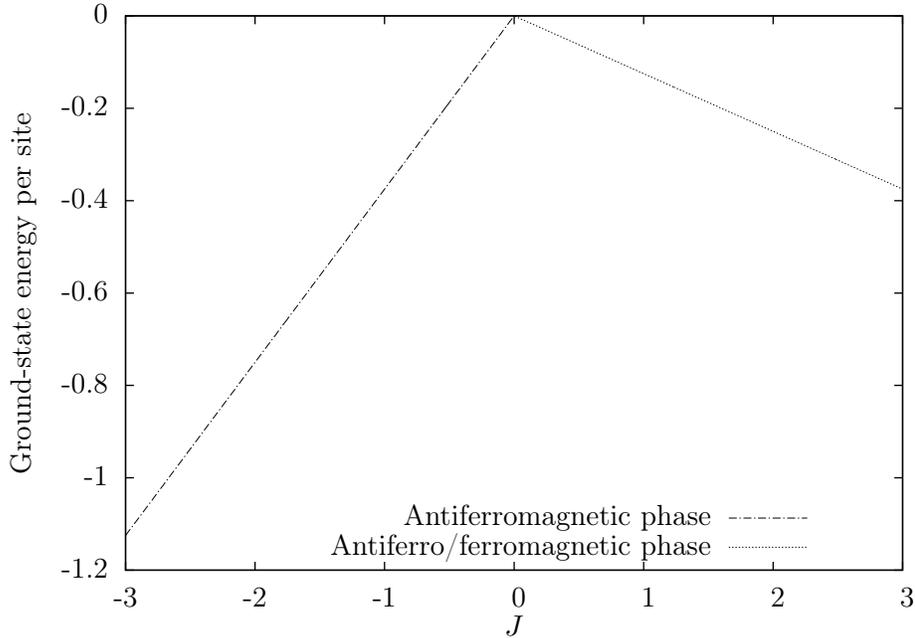


Figura 4.3. Diagrama de fases de la solución analítica del modelo XXX para dos sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia.

Se nota que hay una discontinuidad en $J = 0$. Cuando $J < 0$, el estado se

encuentra en una fase antiferromagnética. Cuando $J > 0$, el estado fundamental se encuentra degenerado. Con el fin de identificar qué fase corresponde a cada estado, se mide la magnetización por sitio, ver tabla 4.2. Se encontró que existe una coexistencia de fases antiferromagnéticas y ferromagnéticas cuando $J > 0$. Esto significa que hay una transición de fase y que $J = 0$ es un punto crítico.

Tabla 4.2. Estado fundamental del modelo XXX para dos sitios. Fuente: elaboración propia

Estado	Condición	E_0 por sitio	M por sitio
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$	$J < 0$	$\frac{3J}{8}$	0
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	$J > 0$	$-\frac{J}{8}$	0
$ \uparrow\uparrow\rangle$	$J > 0$	$-\frac{J}{8}$	1/2
$ \downarrow\downarrow\rangle$	$J > 0$	$-\frac{J}{8}$	-1/2

Cuatro sitios

El hamiltoniano que describe la dinámica de una cadena de Heisenberg XXX de cuatro sitios es

$$\mathcal{H}_{XXX4} = -\frac{J}{2}[S_1^z S_2^z + S_2^z S_3^z + S_3^z S_4^z + S_4^z S_1^z + \frac{1}{2}(S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+ + S_2^+ S_3^- + S_2^- S_3^+ + S_3^+ S_4^- + S_3^- S_4^+ + S_4^+ S_1^- + S_4^- S_1^+)]. \quad (4.6)$$

El diagrama de fases obtenido es similar al diagrama para dos sitios. Obsérvese que la discontinuidad se encuentra nuevamente en $J = 0$. Y se confirma que en este punto hay una transición de fase, de una fase antiferromagnética a una coexistencia de fases antiferro/ferromagnética.

La energía por sitio del estado fundamental está dada por

$J < 0$

$$E_0 = \frac{J}{4}. \quad (4.7)$$

$J > 0$

$$E_0 = -\frac{J}{8}. \quad (4.8)$$

En este caso, podemos notar que con el aumento de tamaño de una cadena de dos sitios a cuatro sitios resulta en un aumento de la pendiente en la energía por

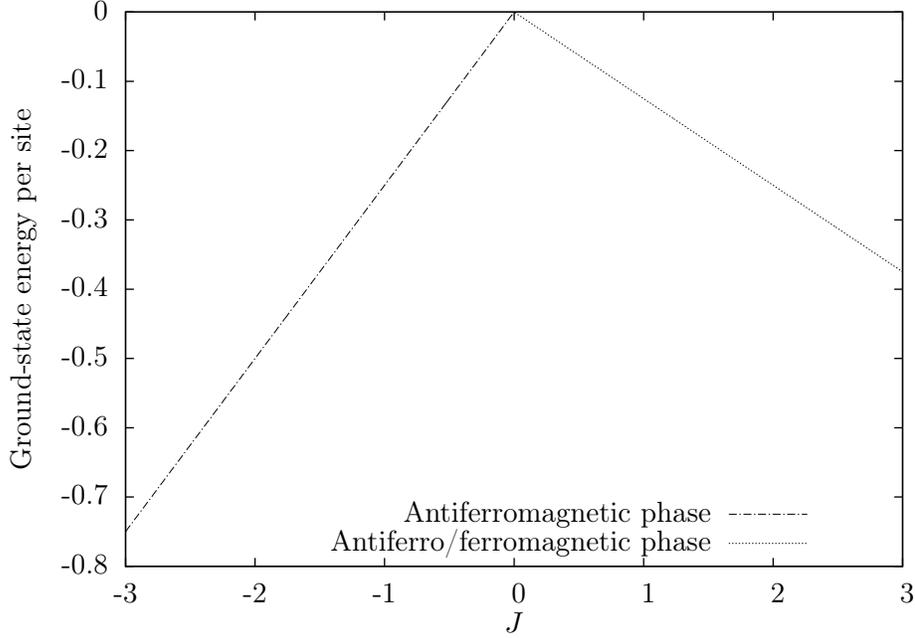


Figura 4.4. Diagrama de fase de la solución analítica para el modelo XXX para cuatro sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia.

sitio del estado fundamental cuando $J < 0$ y permanece constante cuando $J > 0$.

4.1.1.3. Heisenberg XXZ

Dos sitios

El hamiltoniano que describe la dinámica de una cadena de Heisenberg XXZ de dos sitios es

$$\mathcal{H}_{XXZ2} = -\frac{1}{2}[\Delta(S_1^z S_2^z + S_2^z S_1^z) + \frac{1}{2}(S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+ + S_2^+ S_1^- + S_2^- S_1^+)]. \quad (4.9)$$

El diagrama de fases se encontró con la técnica de cruce de niveles y se puede encontrar en la figura 4.5.

Se puede observar que hay una discontinuidad en $\Delta = 1$. Con el fin de identificar qué fase corresponde a cada estado, se midió la magnetización por sitio, ver tabla 4.3. Para $\Delta < 1$ el sistema se encuentra en una fase antiferromagnética. Mientras que para $\Delta > 1$ el sistema está en una fase ferromagnética. Esto significa que hay

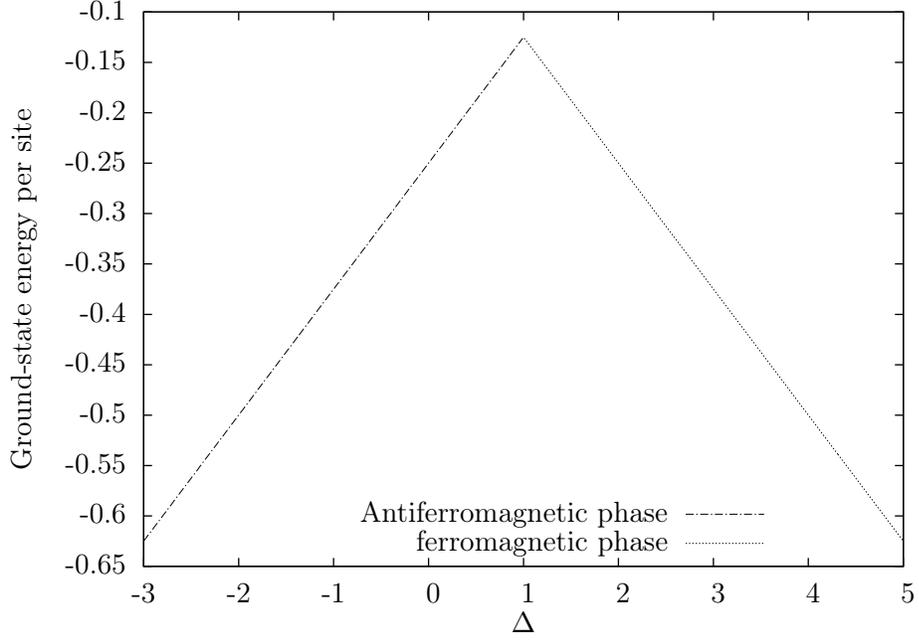


Figura 4.5. Diagrama de fases de la solución analítica del modelo XXZ para dos sitios. La energía por sitio del estado fundamental como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia.

una transición de fase y por lo tanto $\Delta = 1$ es un punto crítico.

Tabla 4.3. Estado fundamental del modelo XXZ para dos sitios. Fuente: elaboración propia.

Estado	Condición	E_0 por sitio	M por sitio
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	$\Delta < 1$	$\hbar^2(\Delta - 2)/8$	0
$ \uparrow\uparrow\rangle$	$\Delta > 1$	$-\Delta/8$	1/2
$ \downarrow\downarrow\rangle$	$\Delta > 1$	$-\Delta/8$	-1/2

Cuatro sitios

El hamiltoniano que describe la dinámica de una cadena de Heisenberg XXZ de cuatro sitios es

$$\mathcal{H}_{XXZ4} = -\frac{J}{2}[\Delta(S_1^z S_2^z + S_2^z S_3^z + S_3^z S_4^z + S_4^z S_1^z) + \frac{1}{2}(S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+ + S_2^+ S_3^- + S_2^- S_3^+ + S_3^+ S_4^- + S_3^- S_4^+ + S_4^+ S_1^- + S_4^- S_1^+)]. \quad (4.10)$$

El diagrama de fases obtenido es similar al diagrama para dos sitios. Obsérvese

que la discontinuidad se encuentra nuevamente en $\Delta = 1$. Y se confirma que en este punto el sistema experimenta una transición de fase, de una fase antiferromagnética a una fase ferromagnética.

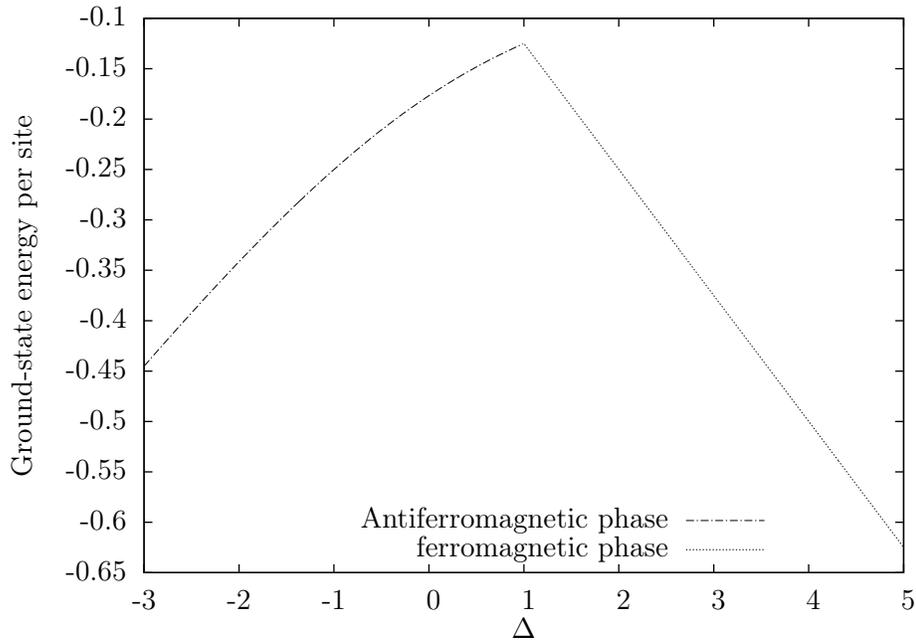


Figura 4.6. Diagrama de fase de la solución analítica del modelo XXZ para cuatro sitios. La energía por sitio de estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia.

La energía por sitio del estado fundamental está dada por

$$\Delta < 1$$

$$E_0 = -\frac{\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta}{16}. \quad (4.11)$$

$$\Delta > 1$$

$$E_0 = -\frac{\Delta}{8}. \quad (4.12)$$

Es importante mencionar que la dependencia de la energía por sitio con Δ cambia de una forma lineal a una cuadrática cuando el tamaño de la cadena aumenta de dos sitios a cuatro. Este comportamiento ocurre cuando $\Delta < 1$ y cuando $\Delta > 1$ la energía por sitio permanece constante.

4.1.2. Resultados numéricos

Los resultados numéricos que se obtuvieron a través de diagonalización por bloques en un trabajo anterior [4] se validaron con la solución analítica. Todos los resultados que se presentarán en las próximas secciones se obtuvieron por un método numérico basado en un método analítico exacto y por lo tanto las incertidumbres están relacionadas con la precisión computacional.

4.1.2.1. Heisenberg XX

La energía por sitio del estado fundamental se calculó para 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios. Se realizó un ajuste lineal con los datos obtenidos de la simulación para encontrar la energía por sitio del estado fundamental en términos de J , véase la tabla 4.4. El diagrama de fases para cada tamaño del sistema se construyó de la misma manera que en el caso analítico.

Tabla 4.4. Energía por sitio del estado fundamental para la cadena de Heisenberg para 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios. Fuente: elaboración propia.

Número de sitios	E_0 por sitio	E_0 per site
	$J < 0$	$J > 0$
4	0.176777*J	-0.176777*J
6	0.166667*J	-0.166667*J
8	0.163320*J	-0.163320*J
10	0.161803*J	-0.160988*J
12	0.160988*J	-0.160988*J
14	0.160499*J	-0.160499*J

Los diagramas de fase siguen mostrando el mismo comportamiento que en el caso analítico: hay una discontinuidad en $J = 0$, el estado se encuentra en una fase antiferromagnética para todos los valores de J y por lo tanto no hay transición de fase. El diagrama de fases para 14 sitios se muestra en la figura 4.7.

A partir de estos últimos resultados se puede observar que, para ambas condiciones $J > 0$ y $J < 0$, la energía por sitio parece converger asintóticamente a medida que aumenta el número de sitios. Una gráfica de todos los diagramas de fase se encuentra en la figura 4.8. Además, un detalle de la figura 4.8 se puede ver en la figura 4.9.

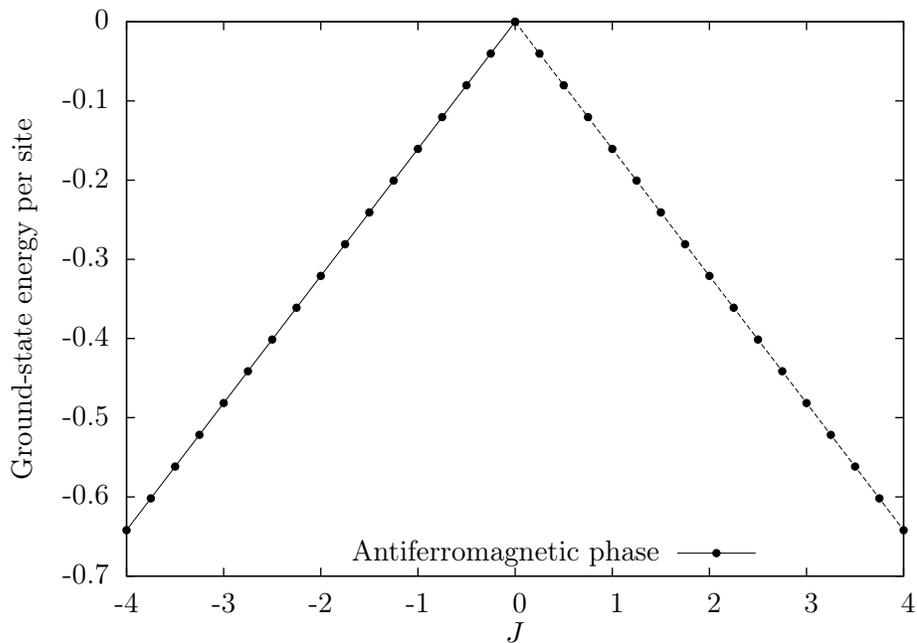


Figura 4.7. Diagrama de fase para una cadena de Heisenberg XX para catorce sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia

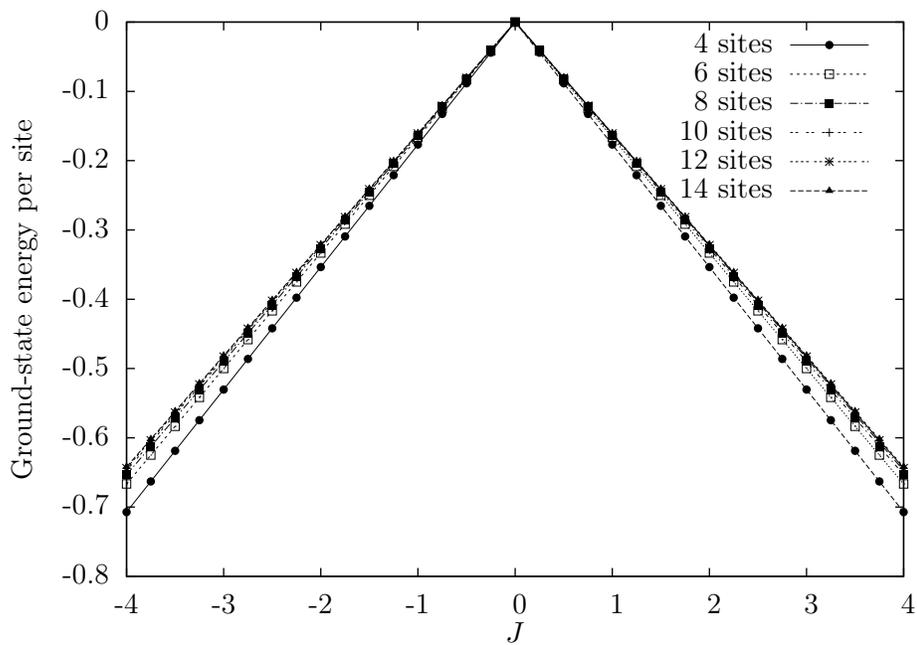


Figura 4.8. Diagramas de fase para una cadena de Heisenberg XX de 4, 6, 8, 10, 12 and 14 sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia.

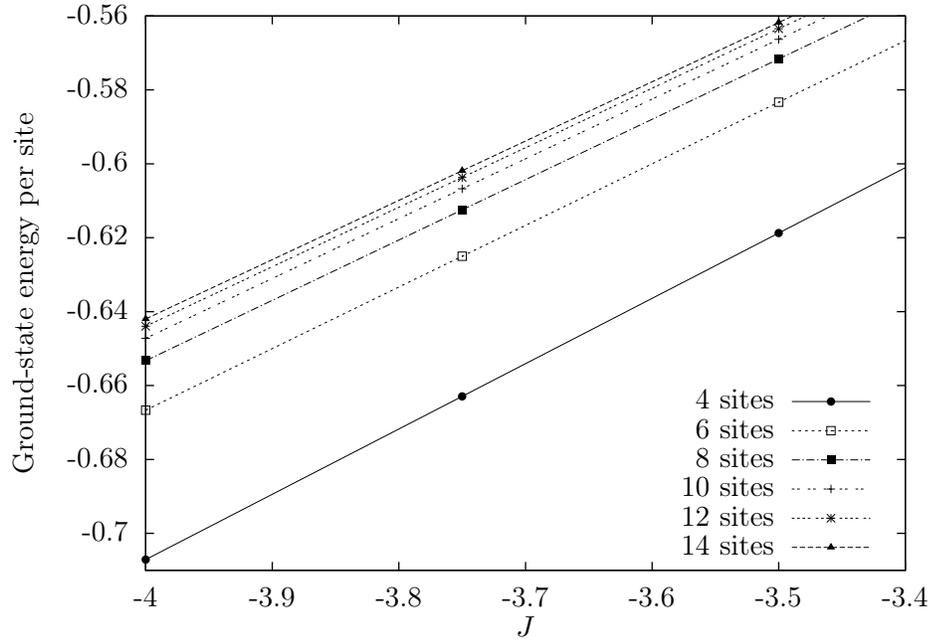


Figura 4.9. Detalle de la figura 4.8. Se puede observar cómo la energía por sitio converge asintóticamente cuando se incrementa el número de sitios. Fuente: elaboración propia.

4.1.3. Costos computacionales

Un gráfico del tiempo de ejecución y la memoria consumida por la simulación del modelo de Heisenberg XX en función del número de sitios se muestra en la figura 4.10.

Se nota que a medida que aumenta el número de sitios, ambas cantidades aumentan de forma exponencial. Este comportamiento fue confirmado por un ajuste lineal del tiempo de ejecución y la memoria consumida usando una escala logarítmica. Vea la figura 4.11.

Los resultados de los ajustes lineales se encuentran en la tabla 4.5.

Tabla 4.5. Ajustes lineales aplicados al tiempo de ejecución y a la memoria consumida por el modelo de Heisenberg XX en escala logarítmica. Fuente: elaboración propia

	Modelo	χ^2
Tiempo de ejecución	$\ln(t) = (1.46006 \pm 0.03357) * N - (15.6702 \pm 0.3769)$	0.0225442
Memoria consumida	$\ln(t) = (1.1515 \pm 0.10770) * N - (0.95494 \pm 1.2090)$	0.231874

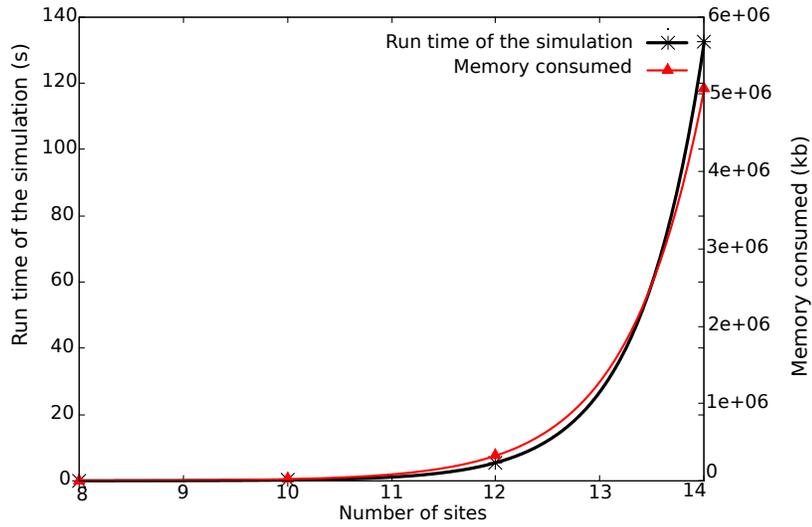


Figura 4.10. Tiempo de ejecución y memoria utilizada por el modelo de Heisenberg XX como función del número de sitios. Fuente: elaboración propia.

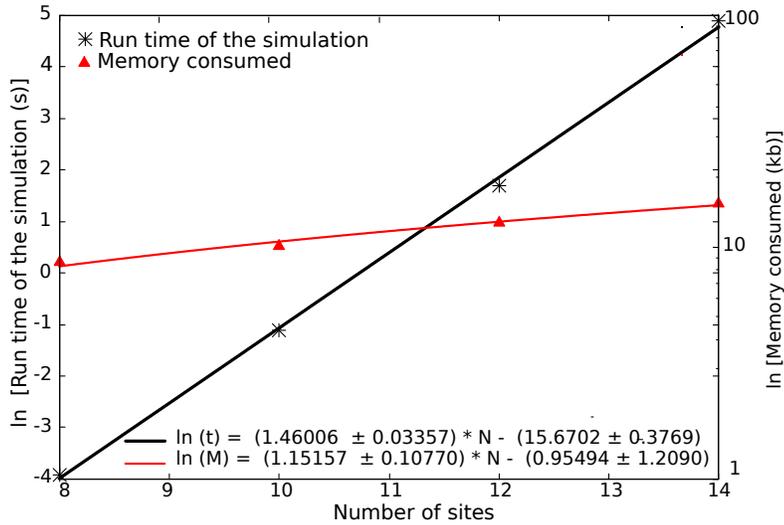


Figura 4.11. Tiempo de ejecución y memoria consumida por el modelo de Heisenberg XX en escala logarítmica. Fuente: elaboración propia.

4.1.3.1. Heisenberg XXX

La energía por sitio del estado fundamental se calculó para 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios. Se realizó un ajuste lineal con los datos obtenidos de la simulación para encontrar la energía por sitio del estado fundamental en términos de la constante de intercambio, ver tabla 4.6. El diagrama de fases para cada tamaño del sistema se construyó de la misma manera que en el caso analítico.

Tabla 4.6. Energía por sitio del estado fundamental de la cadena de Heisenberg XXX con 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios. Fuente: elaboración propia.

Número de sitios	E_0 por sitio	E_0 por sitio
	$J < 0$	$J > 0$
4	0.25*J	-0.125*J
6	0.233565*J	-0.125*J
8	0.228193*J	-0.125*J
10	0.225772*J	-0.125*J
12	0.224475*J	-0.125*J
45	0.223698*J	-0.125*J

Los diagramas de fase siguen mostrando el mismo comportamiento que en el caso analítico: hay un punto crítico en $J = 0$, para $J < 0$ el sistema está en una fase antiferromagnética y para $J > 0$ existe una coexistencia de fases. El diagrama de fases para 14 sitios se muestra en la figura 4.12.

A partir de estos últimos resultados se puede observar que, para $J < 0$, la energía por sitio converge asintóticamente a medida que aumenta el número de sitios. Para $J > 0$ la energía por sitio es la misma, independientemente del tamaño del sistema. Una figura con todos los diagramas de fase se encuentra en la figura 4.13. La figura 4.13 muestra en detalle el comportamiento descrito en la figura 4.14.

4.1.4. Costos computacionales

Un gráfico del tiempo de ejecución y la memoria consumida por la simulación del modelo Heisenberg XXX en función del número de sitios se muestra en la figura 4.15.

Se nota que a medida que aumenta el número de sitios, ambas cantidades aumentan de forma exponencial. Este comportamiento fue confirmado por un ajuste lineal del tiempo de ejecución y la memoria consumida en escala logarítmica. Vea la figura 4.16. Los resultados de los ajustes lineales se encuentran en la tabla 4.7.

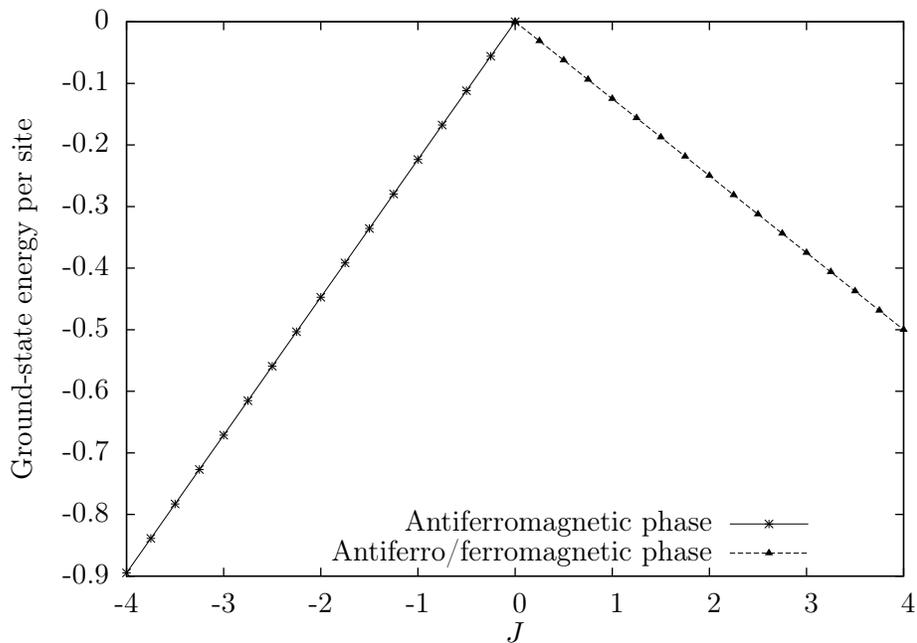


Figura 4.12. Diagrama de fases para una cadena de Heisenberg XXX de catorce sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia

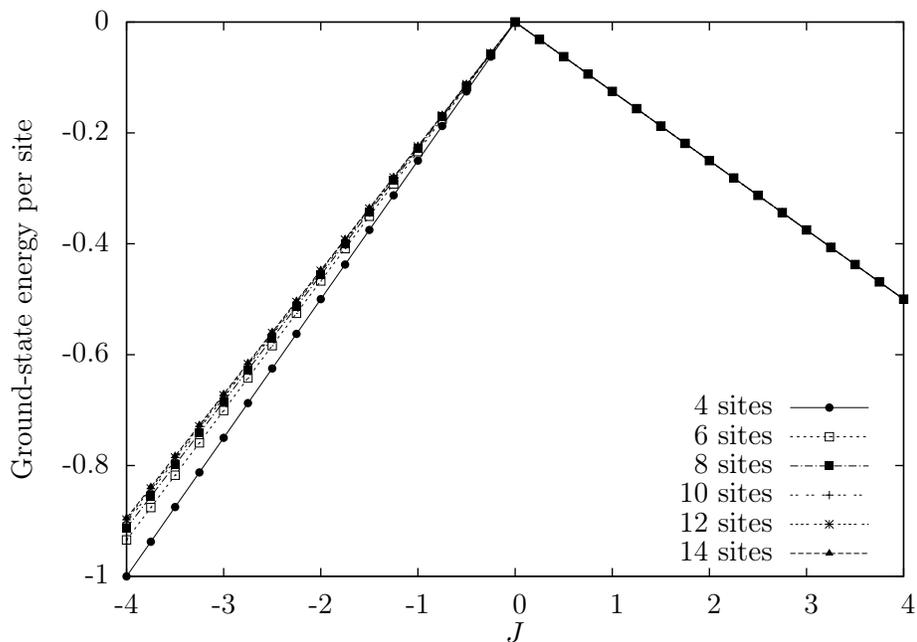


Figura 4.13. Diagramas de fase de una cadena de Heisenberg XXX de 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia

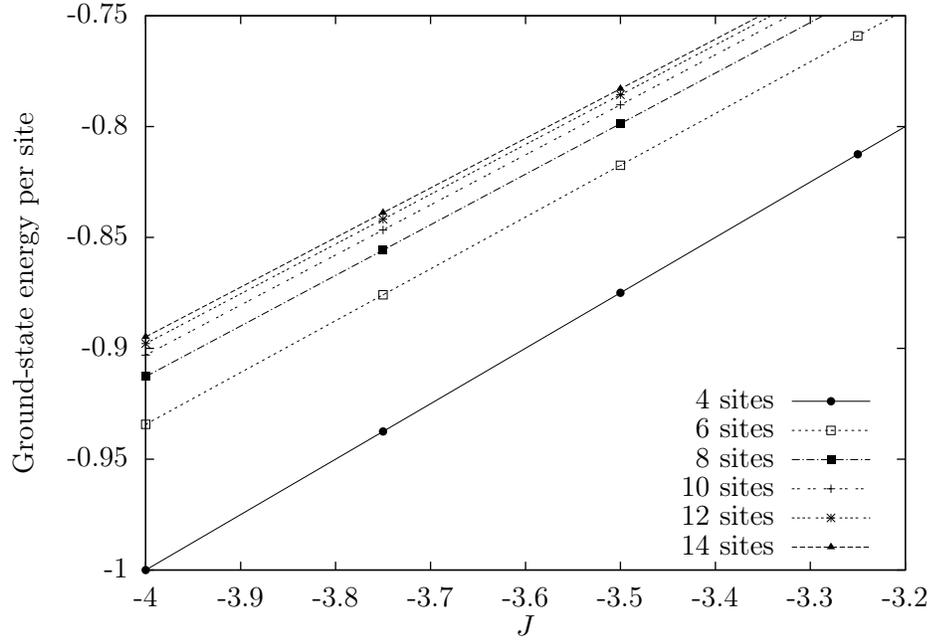


Figura 4.14. Detalle de la figura 4.13. Se puede ver cómo la energía por sitio converge asintóticamente cuando se incrementa el número de sitios de la cadena para $J < 0$. Fuente: elaboración propia.

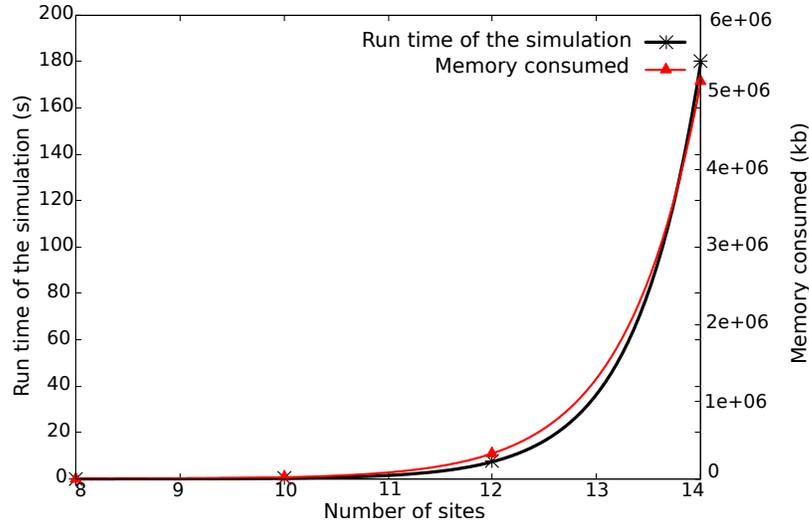


Figura 4.15. Tiempo de ejecución y memoria consumida por la simulación del modelo de Heisenberg XXX como función del número de sitios. Fuente: elaboración propia.

Tabla 4.7. Ajustes lineales aplicados al tiempo de ejecución y a la memoria consumida por el modelo de Heisenberg XXX en escala logarítmica. Fuente: elaboración propia.

	Modelo	χ^2
Tiempo de ejecución	$\ln(t) = (1.5178 \pm 0.0180) * N - (16.1127 \pm 0.2020)$	0.006480
Memoria consumida	$\ln(t) = (1.1623 \pm 0.1006) * N - (1.0766 \pm 1.1290)$	0.20245

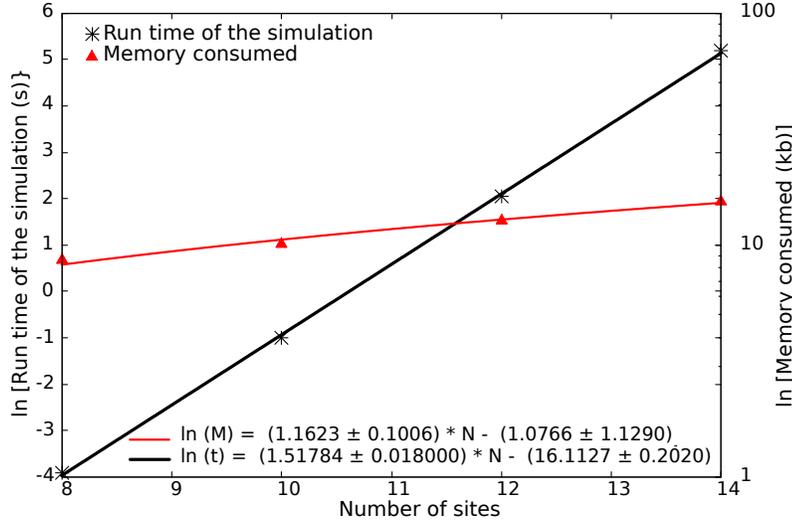


Figura 4.16. Tiempo de ejecución y memoria consumida por el modelo de Heisenberg XXX en escala logarítmica. Fuente: elaboración propia.

4.1.4.1. Heisenberg XXZ

La energía por sitio del estado fundamental se calculó para 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios. Para $\Delta < 1$ la energía por sitio del estado fundamental fue encontrada por un ajuste de los datos a una función de la forma

$$E(\Delta) = a * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta), \quad (4.13)$$

donde a es una constante, ver tabla 4.8. Esta función se tomó del resultado analítico de la energía por sitio de cuatro sitios. Para $\Delta > 1$ la energía por sitio del estado fundamental se encontró por un ajuste lineal. Esta última tiene la siguiente forma

$$E(\Delta) = -0.125 * \Delta, \quad (4.14)$$

coincidiendo con los resultados analíticos.

Tabla 4.8. Energía por sitio del estado fundamental para las cadenas de Heisenberg XXZ con 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios para $\Delta < 1$. Fuente: elaboración propia.

Número de sitios	E_0 por sitio	χ^2
4	$-0.0625 * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta)$	0
6	$(-0.0590662 \pm 0.0001516) * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta)$	7.94194e-06
8	$(-0.058008 \pm 0.0002082) * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta)$	1.49741e-05
10	$(-0.0575622 \pm 0.0002378) * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta)$	1.95261e-05
12	$(-0.0573399 \pm 0.0002558) * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta)$	2.26031e-05
14	$(-0.057216 \pm 0.0002678) * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta)$	2.47704e-05

Los diagramas de fase siguen mostrando el mismo comportamiento que en el caso analítico: hay un punto crítico en $\Delta = 1$, para $\Delta < 1$ el sistema está en una fase antiferromagnética y para $\Delta > 1$ el sistema está en una fase ferromagnética. El diagrama de fases para 14 sitios se muestra en la figura 4.17.

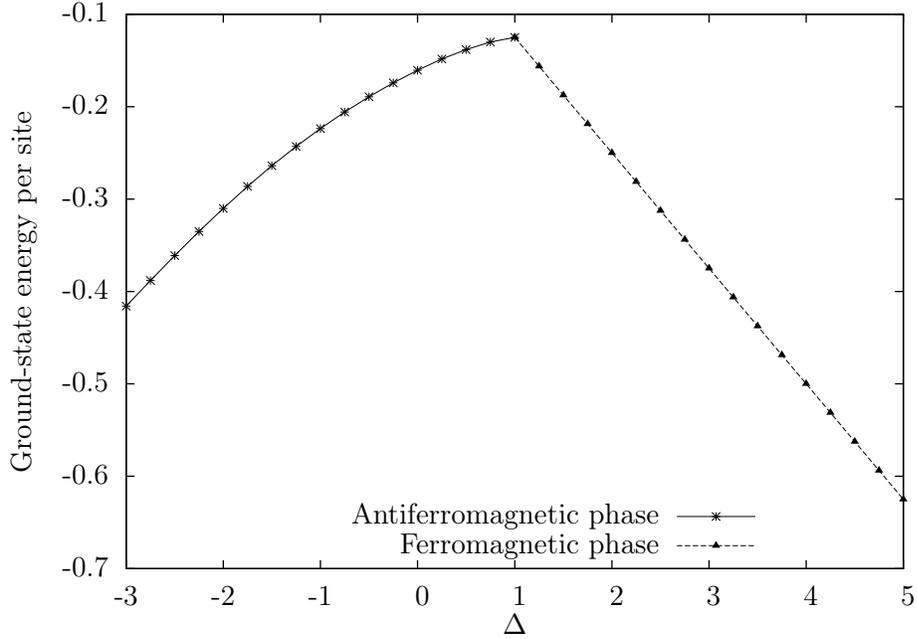


Figura 4.17. Diagrama de fase para una cadena de XXZ con catorce sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia.

A partir de estos últimos resultados se puede observar que, para $\Delta < 1$, la energía por sitio parece converger asintóticamente a medida que aumenta el número de sitios. Para $\Delta > 1$ la energía por sitio es la misma, independientemente del tamaño del sistema. Una figura de todos los diagramas de fase se encuentra en la figura 4.18. Un detalle de la figura 4.18 se puede encontrar en la figura 4.19.

4.1.5. Costos computacionales

En la figura 4.20 se muestra un gráfico del tiempo de ejecución y la memoria consumida por la simulación del modelo de Heisenberg XXZ en función del número de sitios.

Se puede notar que a medida que aumenta el número de sitios, ambas cantidades aumentan de forma exponencial. Este comportamiento fue confirmado por un ajuste lineal del tiempo de ejecución y la memoria consumida en escala logarítmica. Vea la

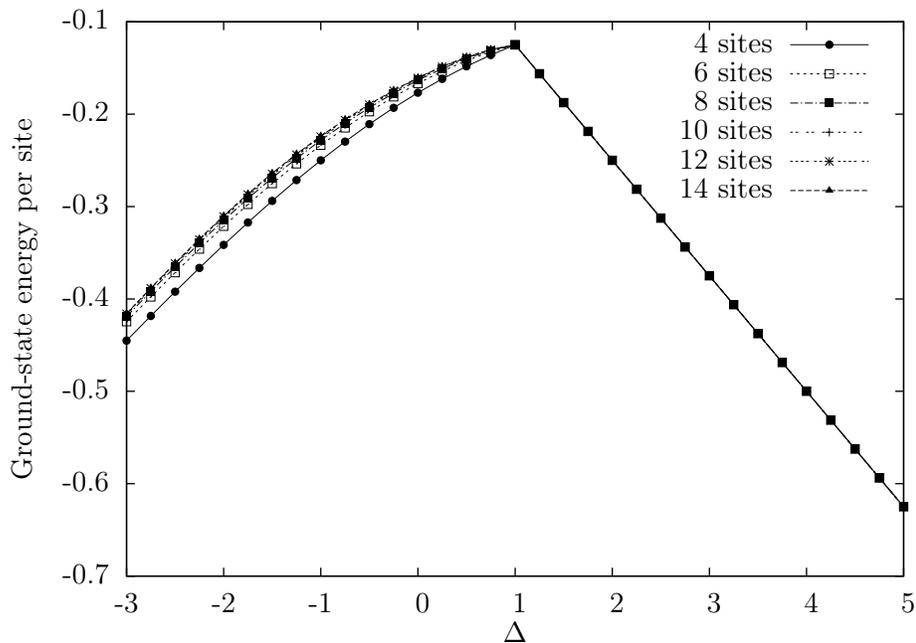


Figura 4.18. Diagramas de fase de una cadena de Heisenberg XXZ de 4, 6, 8, 10, 12 y 14 sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante Δ . Fuente: elaboración propia.

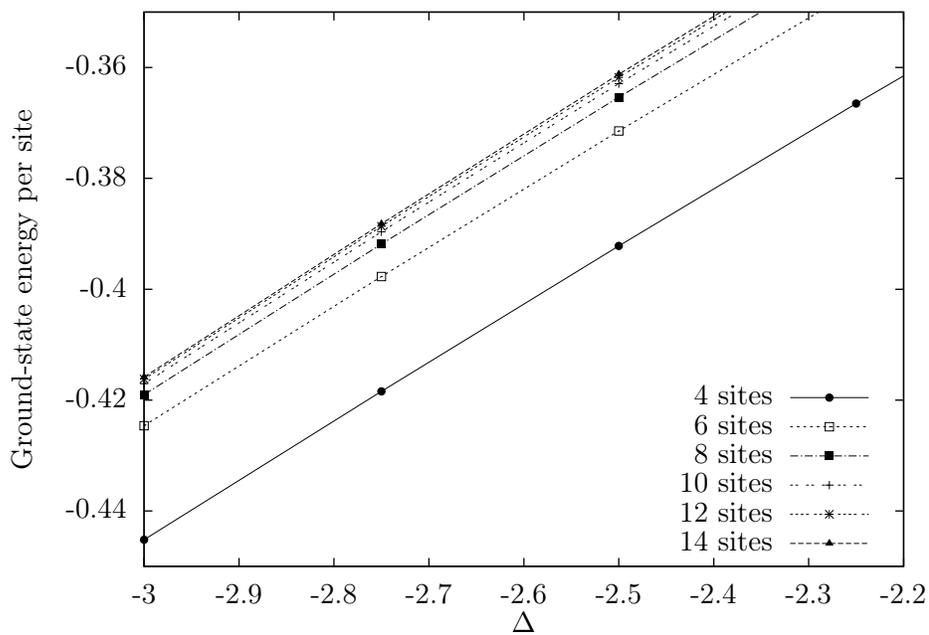


Figura 4.19. Detalle de la figura 4.18. Se puede ver cómo la energía por sitio converge asintóticamente cuando el número de sitios aumenta para $\Delta < 1$. Fuente: elaboración propia.

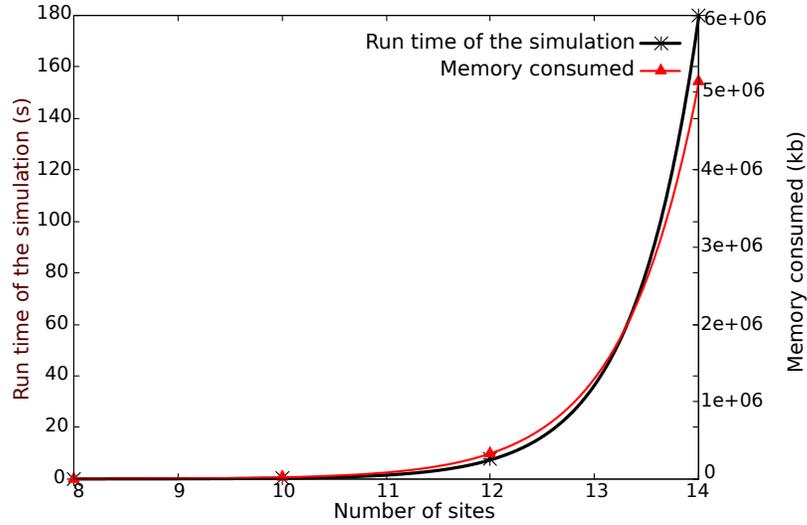


Figura 4.20. Tiempo de ejecución y memoria consumida por la simulación del modelo de Heisenberg XXZ en función del número de sitios. Fuente: elaboración propia.

figura 4.21. Los resultados de los ajustes lineales se encuentran en la tabla 4.9.

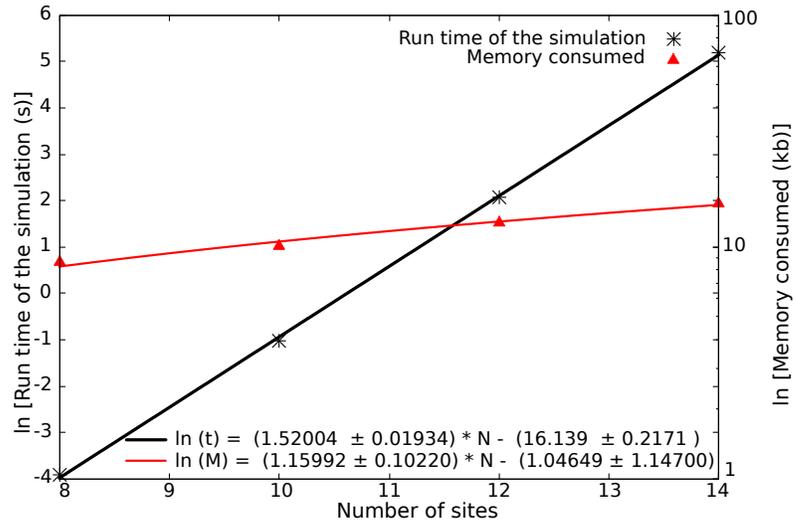


Figura 4.21. Tiempo de ejecución y memoria consumida por el modelo de Heisenberg XXZ en escala logarítmica. Fuente: elaboración propia.

4.2. DMRG

Por el método DMRG obtuvimos resultados para la energía por sitio para cadenas de mayor tamaño y se cuantificó el entrelazamiento cuántico a través de la entropía de von Neumann.

Tabla 4.9. Ajustes lineales aplicados al tiempo de ejecución y a la memoria consumida por el modelo de Heisenberg XXZ en escala logarítmica. Fuente: elaboración propia.

	Modelo	χ^2
Tiempo de ejecución	$\ln(t) = (1.52004 \pm 0.01934) * N - (16.139 \pm 0.2171)$	0.007482
Memoria consumida	$\ln(t) = (1.15992 \pm 0.1022) * N - (1.04649 \pm 1.147)$	0.208762

4.2.1. Energía por sitio del estado fundamental

En las últimas secciones se observó que la energía por sitio del estado fundamental de las cadenas XX, XXX y XXZ convergía asintóticamente a medida que aumentaba el número de sitios. Por lo tanto, para continuar analizando este comportamiento, se deben analizar sistemas con un mayor número de sitios. Nos dimos cuenta de que el uso de la diagonalización exacta o de diagonalización por bloques no es viable a medida que el espacio de Hilbert crece. Resulta que el número máximo de sitios que alcanzamos con diagonalización exacta fue de 4 y en el caso de diagonalización por bloques fue de 14.

Por lo tanto, se utilizó el método DMRG para obtener el estado fundamental de cadenas más grandes. En la implementación del DMRG se preestableció un error de tolerancia en la energía por sitio del estado fundamental dependiendo del número de sitios. Esta tolerancia expresa cuán bien se aproximó el estado fundamental, como se ve en la sección 3.4.3.4. Mientras ejecutamos el código, notamos que la ejecución del DMRG se hizo difícil cerca del punto crítico. Y por lo tanto, en estas regiones se necesitó una mayor cantidad de tiempo y de recursos computacionales. Esta vez obtuvimos el estado fundamental de cadenas XX y XXZ con $N = 64$ y cadenas XXX con $N = 128$. Debido a problemas de tiempo y recursos, fue imposible obtener resultados para cadenas más grandes. Sin embargo, se sabe que es posible obtener el estado fundamental de sistemas de tamaño del orden de miles de sitios con DMRG.

Los resultados obtenidos a partir de la implementación de DMRG fueron validados con los obtenidos a través de diagonalización por bloques en un trabajo anterior [4]. Los datos obtenidos se ajustan a los modelos propuestos en las secciones 4.1.2.1, 4.1.3.1 y 4.1.4.1. Además, obtuvimos los siguientes resultados, ver tablas 4.10, 4.11 y 4.12. Una confirmación gráfica de la convergencia de la energía por sitio del estado fundamental se puede ver en los diagramas 4.22, 4.24 y 4.26, y los detalles en las figuras 4.23, 4.25 y 4.27 respectivamente.

Tabla 4.10. Energía por sitio del estado fundamental para la cadena de Heisenberg XX de 4, 8, 16, 32 y 64 sitios. Todos los coeficientes tienen incertezas del orden de 10^{-8} . En todos los ajustes $\tilde{\chi}^2$ es del orden de 10^{-13} . Fuente: elaboración propia.

Número de sitios	E_0 por sitio	E_0 per site
	$J < 0$	$J > 0$
4	$0.176777 * J$	$-0.176777 * J$
8	$0.163320 * J$	$-0.163320 * J$
16	$0.160182 * J$	$-0.160182 * J$
32	$0.159411 * J$	$-0.159411 * J$
64	$0.159202 * J$	$-0.159202 * J$

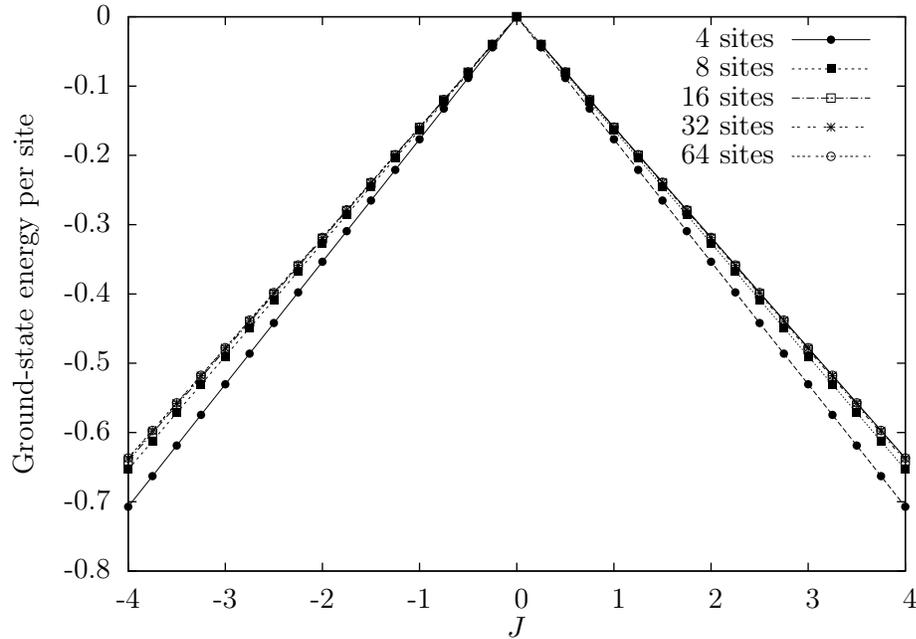


Figura 4.22. Diagramas de fase de cadenas de Heisenberg XX de 4, 8, 16, 32 y 64 sitios. La energía por sitio del estado fundamental como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia.

Tabla 4.11. Energía por sitio del estado fundamental de la cadena de Heisenberg XXX con 4, 8, 16, 32 y 64 sitios. Todos los coeficientes tienen incertezas del orden de 10^{-8} . En todos los ajustes $\tilde{\chi}^2$ es del orden de 10^{-13} . Fuente: elaboración propia.

Número de sitios	E_0 por sitio	E_0 per site
	$J < 0$	$J > 0$
4	$0.25 * J$	$-0.125 * J$
8	$0.228193 * J$	$-0.125 * J$
16	$0.223197 * J$	$-0.125 * J$
32	$0.221975 * J$	$-0.125 * J$
64	$0.221672 * J$	$-0.125 * J$
128	$0.220832 * J$	$-0.125 * J$

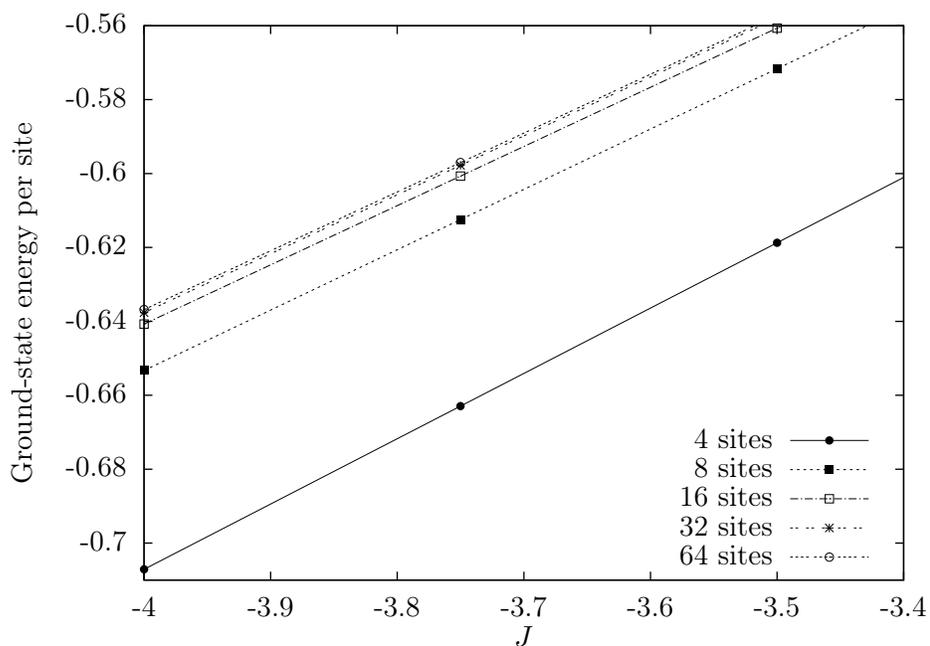


Figura 4.23. Detalle de la figura 4.22. Se puede ver cómo la energía por sitio converge asintóticamente cuando el número de sitios se incrementa. Fuente: elaboración propia.

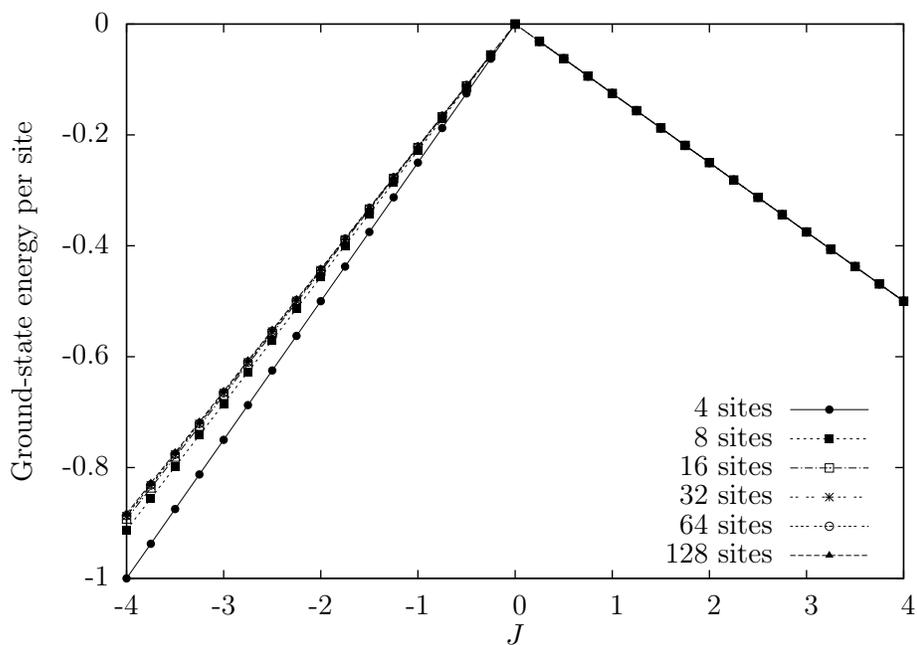


Figura 4.24. Diagramas de fase de cadenas de Heisenberg XXX de 4, 8, 16, 32, 64 y 128 sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio J . Fuente: elaboración propia.

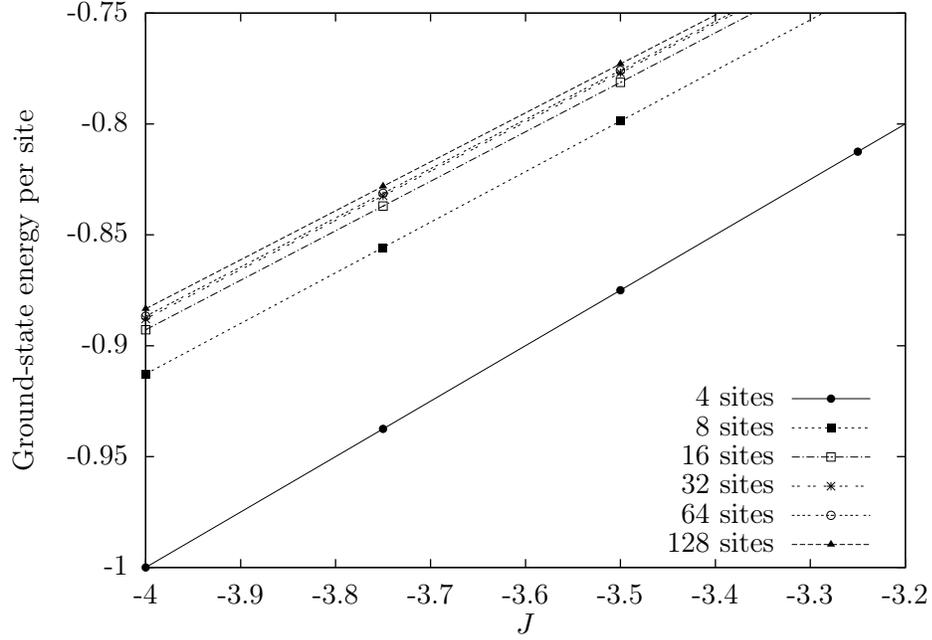


Figura 4.25. Detalle de la figura 4.24. Se puede observar cómo la energía por sitio converge asintóticamente cuando se incrementa el número de sitios. Fuente: elaboración propia.

Tabla 4.12. Energía por sitio del estado fundamental de cadenas de Heisenberg XXZ de 4, 8, 16, 32 and 64 sitios para $\Delta < 1$. Fuente: elaboración propia.

Número de sitios	E_0 por sitio	$\tilde{\chi}^2$
4	$-0.0625 * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta)$	0
8	$(-0.058008 \pm 0.0002082) * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta)$	1.49741e-05
16	$(-0.0571414 \pm 0.0002762) * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta)$	2.63438e-05
32	$(-0.0569237 \pm 0.0002691) * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta)$	2.47254e-05
64	$(-0.0568584 \pm 0.0002853) * (\sqrt{\Delta^2 + 8} - \Delta)$	2.77937e-05

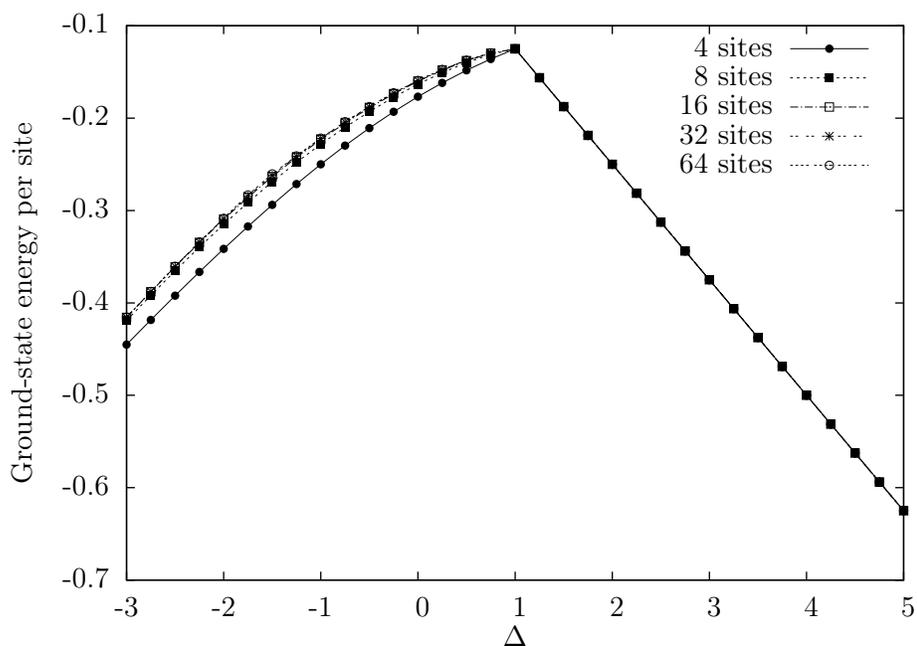


Figura 4.26. Diagramas de fase para cadenas de Heisenberg XXZ de 4, 8, 16, 32 y 64 sitios. La energía por sitio del estado fundamental E_0 como función de la constante de intercambio Δ . Fuente: elaboración propia.

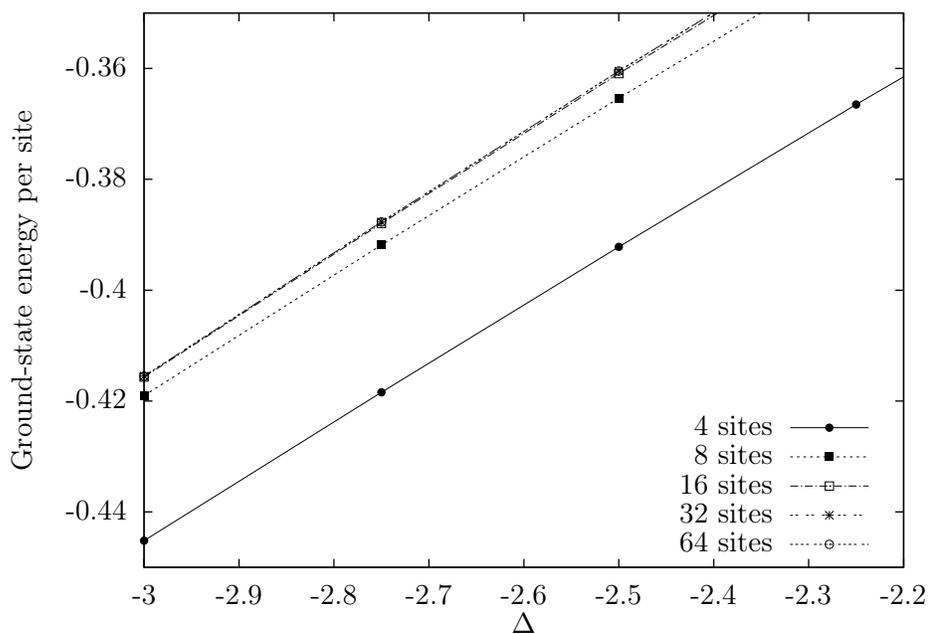


Figura 4.27. Detalle de la figura 4.22. Se puede ver cómo la energía por sitio converge asintóticamente cuando el número de sitios se incrementa. Fuente: elaboración propia.

4.2.2. Entropía de entrelazamiento

Con el fin de validar los resultados de la entropía de entrelazamiento que obtuvimos utilizando el método DMRG, los comparamos con los resultados dados de la Teoría de Campos Conformes (CFT). CFT es una teoría cuántica de campos que es invariante bajo transformaciones conformes, es decir, transformaciones que preservan los ángulos localmente. Para un sistema con condiciones de contorno periódicas, la entropía para un bloque de tamaño x en un sistema grande es

$$S(x) \approx \frac{c}{3} \log(x). \quad (4.15)$$

Cuando el sistema no es lo suficientemente grande, resulta que aparecen *efectos de tamaño finito*. Por lo tanto, tenemos que usar

$$S(x) \approx \frac{c}{3} \log \left(\frac{N}{\pi} \sin \left(\pi \frac{x}{N} \right) \right) + c', \quad (4.16)$$

donde N es el tamaño del sistema, c es la carga central de la CFT asociada al modelo de Heisenberg y c' no es una constante no universal. Para eliminar la contribución de la función senoidal, elegimos un bloque de tamaño $x = N/2$. Por lo tanto

$$S(x) \approx \frac{c}{3} \log \left(\frac{N}{\pi} \right) + c'. \quad (4.17)$$

Para el modelo de Heisenberg $c = 1$, estos resultados son válidos únicamente en vecindad del punto crítico. Se puede encontrar más información sobre el tema en [2], [5], [10] y [22]. El ajuste de la entropía entrelazamiento de un bloque de tamaño mitad de cadena, $S(N/2)$, en términos de número de sitios, N , debe ser de la forma funcional dada por la CFT (4.17). Por lo tanto, se propone el siguiente modelo

$$f(N) = \frac{a}{3} * \log \left(\frac{N}{\pi} \right) + b, \quad (4.18)$$

donde a y b son constantes que deben ser determinadas. Los resultados de los respectivos ajustes se resumen en la tabla 4.13. En las figuras 4.28 y 4.29, puede verse que los resultados de la entropía de entrelazamiento están cerca de los valores propuestos por CFT. Pero estos no son lo suficientemente precisos, ya que los rangos de incertidumbre en la mayoría de los casos, no contienen a los valores predichos por la CFT. Esto no significa que el método DMRG no funcione, el problema es que necesitamos un mayor número de sitios para obtener valores precisos. Es importante mencionar que no obtuvimos buenos resultados con el método DMRG cerca del

punto crítico, como se puede ver en la gráfica 4.29. Esto sucedió porque cerca de este punto, la implementación del DMRG requería más recursos computacionales, como mencionamos antes, y por lo tanto redujimos la tolerancia para ahorrar tiempo de ejecución de código en el servidor. En la mayoría de los casos, era imposible obtener resultados para el estado fundamental en el punto crítico porque requería demasiadas horas dependiendo de la cadena de la cadena, incluso días, para calcular sólo un punto.

Observamos que los valores de la entropía no dependen de J en los modelos XX y XXX. Sin embargo, este no fue el caso en las cadenas de spin XXZ, ver figura 4.30. A partir de esta figura, se puede ver que a medida que el tamaño del sistema N aumenta, la gráfica de $S(N/2)$ tiene un comportamiento no continuo cuando Δ toma valores negativos. No podemos discernir la naturaleza de los efectos que están causando tal comportamiento, por lo que no podemos concluir si corresponde a efectos físicos, ya que actualmente todos los resultados sobre los temas se han obtenido cerca del punto crítico. Este comportamiento de la entropía de entrelazamiento en XXZ también permitió darnos cuenta de que puesto a que los resultados de la CFT son válidos sólo cerca del punto crítico, se tiene que el comportamiento $S(N/2)$ en función de N es un indicador de la proximidad de una transición de fase. En la figura 4.29, se puede ver que cuando $\Delta = 2$, las predicciones de CFT fallan.

Queremos recalcar que en la mayoría de los casos la entropía de entrelazamiento tiene un valor distinto de cero, ver figuras 4.28 y 4.29. Esto ocurre cuando hay un estado no factorizable, y en nuestro caso esto corresponde a una fase antiferromagnética. Este comportamiento coincide con los diagramas de fases que hemos bosquejado en las secciones anteriores. Es importante mencionar que, aunque en el caso de las cadenas de espín XXX hay una coexistencia de fases cuando $J > 0$, solo obtuvimos resultados para la fase antiferromagnética. Esta es la razón por la que la entropía en esta región tiene un valor distinto de cero. En el caso de las cadenas XXZ, podemos observar que la entropía de entrelazamiento desaparece cuando $\Delta > 1$.

Tabla 4.13. Resultados de los ajustes de la entropía de entrelazamiento de un bloque del tamaño mitad de la cadena como función del número de sitios para el modelo de Heisenberg XX, XXX y XXZ. Fuente: elaboración propia.

Heisenberg XX	c	c'	$\tilde{\chi}^2$
$J < 0$	0.95 ± 0.01	0.754 ± 0.007	$6.32906e-05$
$J > 0$	0.95 ± 0.01	0.754 ± 0.007	$6.32906e-05$
Heisenberg XXX	c	c'	$\tilde{\chi}^2$
$J < 0$	0.979 ± 0.008	0.752 ± 0.005	$3.12169e-05$
$J > 0$	1.26 ± 0.06	0.77 ± 0.04	0.00340245
Heisenberg XXZ	c	c'	$\tilde{\chi}^2$
$\Delta < 1 (\Delta = 0.75)$	0.96 ± 0.02	0.77 ± 0.01	$4.35169e-05$
$\Delta = \Delta_c = 1$	1.26 ± 0.05	0.76 ± 0.02	0.000298398
$\Delta > 1$	0	0	0

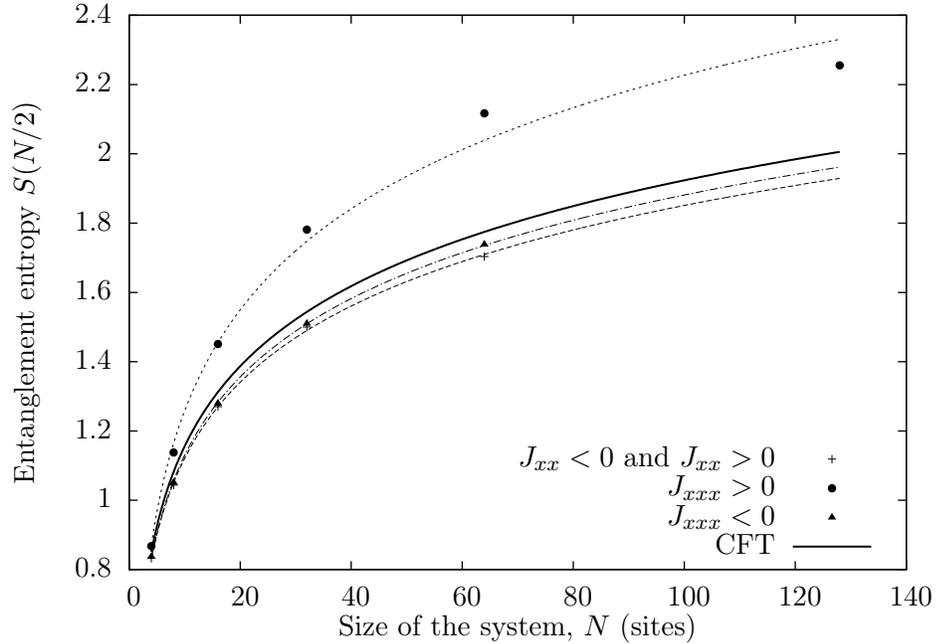


Figura 4.28. Entropía de entrelazamiento para un bloque de tamaño mitad de cadena, $S(N/2)$ como función del número de sitios N para los modelos de Heisenberg XX y XXX. Fuente: elaboración propia.

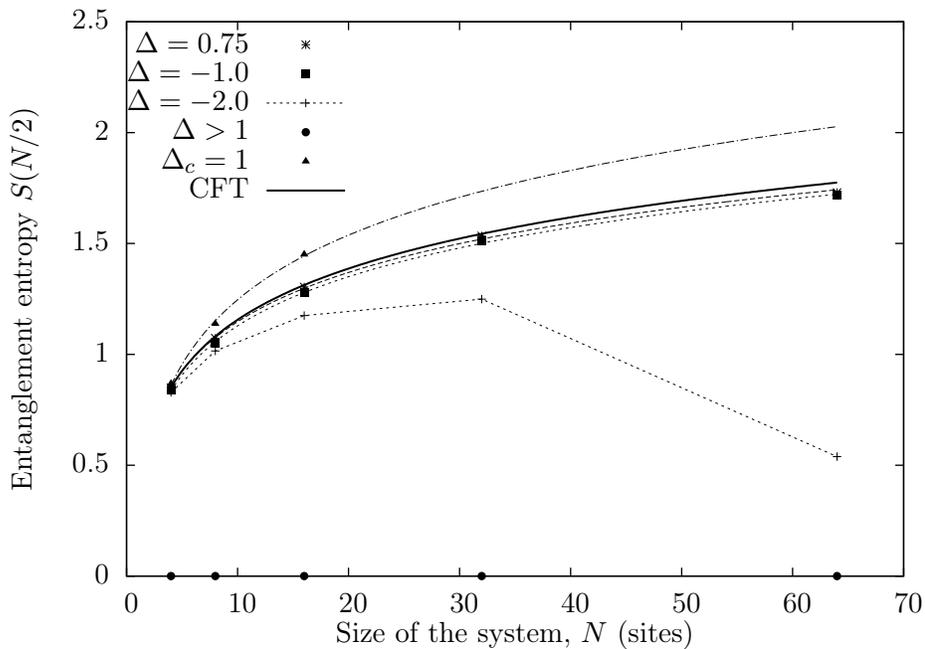


Figura 4.29. Entropía de entrelazamiento para un bloque de tamaño mitad de cadena, $S(N/2)$ en función del número de sitios N para el modelo XXZ. No fue posible hacer en ajuste con los datos de $\Delta = -2$ la línea segmentada en la figura es una guía visual. Fuente: elaboración propia.

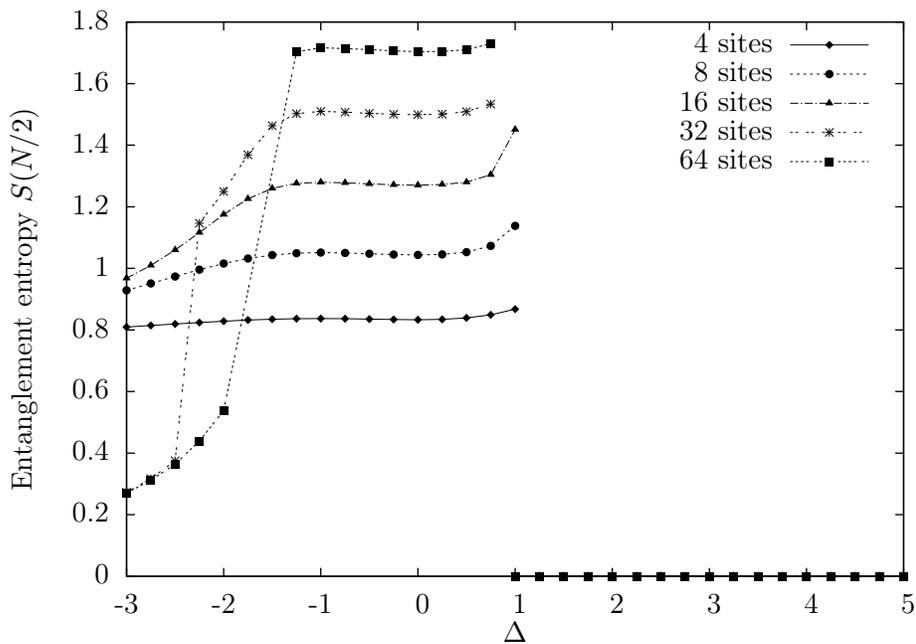


Figura 4.30. Entropía de entrelazamiento para un bloque de tamaño mitad de cadena, $S(N/2)$ en función de Δ para el modelo XXZ. Fuente: elaboración propia.

CONCLUSIONES

1. La técnica de cruce de niveles aplicada a las soluciones analíticas y numéricas fue suficiente para encontrar los puntos críticos y, por lo tanto, las transiciones de fase cuánticas en sistemas cuya dinámica está descrita por las variantes XX, XX y XXZ del modelo de Heisenberg.
2. Un modelo Heisenberg simplificado que incluye la interacción de intercambio de próximos vecinos en un sistema cuántico 1D de spin $1/2$ con condiciones de contorno periódicas nos permitió caracterizar dos fases magnéticas diferentes: antiferromagnética y ferromagnética.
3. La magnetización por sitio puede usarse como parámetro de orden para caracterizar fases antiferromagnéticas y ferromagnéticas.
4. Las tres variantes del modelo de Heisenberg que se analizaron se comportaron de manera diferente entre sí. El modelo XX no presenta ninguna transición de fase. El modelo XXX presenta transiciones de fase y coexistencia de fases al mismo tiempo. Y el XXZ muestra transiciones de fase sin coexistencia de fases.
5. Con la medición del consumo de recursos computacionales confirmó que estos tienen un comportamiento exponencial en función del tamaño del sistema debido al crecimiento exponencial del hamiltoniano.
6. El método DMRG confirma que la energía por sitio del estado fundamental de las cadenas de espín descritas por las variantes XX, XXX y XXZ del modelo de Heisenberg converge asintóticamente al valor en el límite termodinámico.
7. Los resultados de la entropía de entrelazamiento confirman la naturaleza de las fases implicadas en los diagramas de fase. Si la entropía es finita, la fase es antiferromagnética y si es cero, la fase es ferromagnética.

8. El resultado de la entropía de entrelazamiento para un bloque de tamaño de la mitad sistema es consistente, a precisión de la máquina, con los resultados dados por la CFT asociada al modelo de Heisenberg. Dado que los resultados de CFT son válidos cerca del punto crítico, el comportamiento de la entropía de entrelazamiento es un indicador de la proximidad de una transición de fase.

RECOMENDACIONES

1. Validar los resultados obtenidos por el método DMRG comparando la energía del estado fundamental con los valores obtenidos por diagonalización exacta, antes de calcular las propiedades de los estados de baja energía de sistemas de tamaños mayores.
2. Utilizar el método DMRG para explorar estados excitados en cadenas XX, XXX y XXZ de Heisenberg para caracterizar otras propiedades de estos sistemas.
3. Programar horarios para obtener más tiempo y más recursos del clúster de la Escuela, y de ese modo poder simular sistemas más grandes para mejorar la precisión de los resultados. Así como para determinar la relación entre el DMRG y la entropía de entrelazamiento.
4. Realizar un trabajo de investigación sobre los efectos que podrían causar el comportamiento observado en la entropía de entrelazamiento en cadenas XXZ, usando el código y el protocolo desarrollado para este trabajo.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms). Consulted on June 8th. <http://www.netlib.org/blas/>.
- [2] P. Calabrese and J. Cardy. Phys. A: Math. Theor. 42 504005, 2009.
- [3] J. Cardy. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. University of Oxford, Cambridge University Press, Great Britain, 1996.
- [4] P. Delcompare and G. Ramírez. *Physics of 1D Lattice Quantum Systems*. Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de San Carlos de Guatemala. Guatemala, 2017.
- [5] M. Fagotti, P. Calabrese and J. Moore. Phys. Rev. B 83 045110, 2011.
- [6] R. Feymann. *Statistical Mechanics, a set of Lectures*. 2nd Edition, California Institute of Technology, Addison Wesley, 1972.
- [7] A. Feiguin. *The Density Matrix Renormalization Group*. Strongly Correlated Systems, Springer Series in Solid-State Sciences, Volume 176. Edited by A. Avella and F. Mancini, 2013.
- [8] N. Goldenfeld. *Lectures on Phase Transitions and The Renormalization Group*. University of Illinois, Perseus Books, 1992.
- [9] G. Golub, Van Loan and F. Charles. *Matrix Computations*, 3rd edition, Johns Hopkins, 1996.
- [10] C. Holzhey, F. Larsen and F. Wilczek. Nucl. Phys. B 424 443, 1994.
- [11] K. Huang. *Statistical Mechanics*. 2nd Edition, Massachusetts Institute of Technology, John Wiley and Sons, 1987.
- [12] HVB library. Consulted on June 8th. <https://github.com/jvrlag/hvb>.

- [13] LAPACK. Consulted on June 8th. <http://www.netlib.org/lapack/>.
- [14] R. I. Nepomechie, *Int. J. Mod. Phys. B*, 13, 2973, 1999.
- [15] J. B. Parkinson and D. J. Farnell. *An Introduction to Quantum Spin Systems*. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2010.
- [16] G. Ramírez García. *Quantum Entanglement in Random and Inhomogeneous Spin Chains*. Instituto de Física Teórica, Universidad Autónoma de Madrid, 2015.
- [17] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Yale University, Cambridge University Press, 1998.
- [18] J.J. Sakurai and J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. 2nd Edition, Addison-Wesley, San Francisco CA, 1994.
- [19] A. Sandvik. *Computational Studies of Quantum Spin Systems*. Department of Physics, Boston University, Massachusetts, 2010.
- [20] F. Schwabl. *Quantum Mechanics*. 4th Edition, Physik-Department Technische Universität München, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2007.
- [21] F. Schwabl. *Statistical Mechanics*. 3rd Edition, Physik-Department Technische Universität München, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2006.
- [22] G. Vidal G, J. Latorre, E. Rico and A. Kitaev. *Phys. Rev. Lett.* 90 227902, 2003.
- [23] N. Yang and P. Yang. *Phys. Rev.* 150, 321, 1966.
- [24] N. Yang and P. Yang. *Phys. Rev.* 150, 327, 1966.
- [25] N. Yang and P. Yang. *Phys. Rev.* 151, 258, 1966.

A. APÉNDICE

A.1. Archivo de encabezado: ‘heisenberg.h’

```
/ heisenberg.h provide headers for the simulations of the Heisenberg model
// using the hvb library
//
// Copyright (C) 2017
// P. Delcompare (paoladelcompare@gmail.com)
// G. Ramirez Garcia (ramirez@ecfm.usac.edu.gt)
//
// This program is free software: you can redistribute it and/or
// modify it under the terms of the GNU General Public License as
// published by the Free Software Foundation, either version 3 of
// the License, or (at your option) any later version.
//
// This program is distributed in the hope that it will be useful,
// but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of
// MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU
// General Public License for more details.
//
// You should have received a copy of the GNU General Public License
// along with this program. If not, see
// <http://www.gnu.org/licenses/>.
//

#include "model.h"

// Function to apply the Exact Diagonalization method to solve small one
// dimensional systems. The library does not limit the size of the system
```

```

// then, even for large systems it try to create the matrices and the OS will
// use the swap of the system.

double ExactDiagonalization(const Model &, long);
// OUTPUT: none, all data must be printed or stored in files during the
// execution of the function
// INPUT: a Model object, which is part of the model library, the selected sector

// Function to define the XX model
void XX(Model &, long, double);
// OUTPUT: none, all data must be printed or stored in Model
// INPUT: Model object defined in model, long for the size of the system, double for the

// Function to define the XXX model
void XXX(Model &, long, double);
// OUTPUT: none, all data must be printed or stored in Model
// INPUT: Model object defined in model, long for the size of the system, double for the

// Function to define the XXZ model
void XXZ(Model &, long, double);
// OUTPUT: none, all data must be printed or stored in Model
// INPUT: Model object defined in model, long for the size of the system, double for the

```

A.2. Implementación del método DMRG

A.2.1. Modelo de Heisenberg XX

```

// DMRG implementation for the Heisenberg model
// Copyright (C) 2017
// P. Delcompare (paoladelcompare@gmail.com)
// G. Ramirez Garcia (ramirez@ecfm.usac.edu.gt)
//
// This program is free software: you can redistribute it and/or
// modify it under the terms of the GNU General Public License as
// published by the Free Software Foundation, either version 3 of

```

```

// the License, or (at your option) any later version.
//
// This program is distributed in the hope that it will be useful,
// but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of
// MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU
// General Public License for more details.
//
// You should have received a copy of the GNU General Public License
// along with this program. If not, see
// <http://www.gnu.org/licenses/>.

#include "dmrgsystem.h"
#include "heisenberg.h"
#include <fstream>

// DMRG solving routine
double * DMRG_Solve(Model &H, double Tol);

int main(int argc, char* argv[])
{
    ofstream res1, res2;
    res1.open("res1xx.txt");
    res2.open("res2xx.txt");

    if (argc<2)
merror("Syntaxis: L\n");

    long L=(long)atoi(argv[1]);
    double Tol=1e-5;
    double *b;

    for(double J=-4.00; J<0.0; J=J+0.25){
        Model H;
        XX(H,L,J);
        b=DMRG_Solve(H,Tol);
        res1 << J << "\t" << *b << "\t" << *(b+1) << "\t" << *(b+2) << "\n";
    }
}

```

```

    }

    for(double J=0.25; J<=4.00; J=J+0.25){
        Model H;
        XX(H,L,J);
        b=DMRG_Solve(H,Tol);
        res2 << J << "\t" << *b << "\t" << *(b+1) << "\t" << *(b+2) << "\n";
    }

    res1.close();
    res2.close();
    return 0;
}

// DMRG solving routine
double * DMRG_Solve(Model &H, double Tol) {
    long L=H.G.N;
    double a[3];
    double m=0;
    List P;
    P=List_Interval(1,L);
    bool save_to_disk=false;
    long nsweep=6;
    System S(H,P,L/2,Tol,save_to_disk);
    //para otros modelos y heisenberg xxz <1 -----> sector L/2
    S.nosweep=nsweep;
    S.Warmup();
    double old_energy;
    do {
        old_energy=S.E0;
        S.Sweep();
        // printf("Energy: %g (%g)\n",S.E0,old_energy);
    } while(fabs(S.E0-old_energy)>1e-10);

    // printf("Singlet: %16.12g\n",S.E0);
    a[0]=S.E0;

```

```

-
// printf("** Entanglement (DMRG):\n");
//para otros modelos y heisenberg XXZ<1, sector L/2
Vector Ent=Flatten(S.RhoSpectra[L/2]);
Ent.Order(-1);
printf("Spectrum: ");

for (long k=1;k<=MIN(Ent.N,10);k++) {
    m++;
    printf("%g ",Ent(k));
}
printf("Sum: %g",Ent.Sum());
printf("\n");
double SvN=Von_Neumann(Ent);
//printf("Von Neumann: %g\n",SvN);

a[1]=SvN;
a[2]=m;
return a;
}

```

A.2.2. Modelo de Heisenberg XXX

```

// DMRG implementation for the Heisenberg model
// Copyright (C) 2017
// P. Delcompare (paoladelcompare@gmail.com)
// G. Ramirez Garcia (ramirez@ecfm.usac.edu.gt)
//
// This program is free software: you can redistribute it and/or
// modify it under the terms of the GNU General Public License as
// published by the Free Software Foundation, either version 3 of
// the License, or (at your option) any later version.
//
// This program is distributed in the hope that it will be useful,
// but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of

```

```

//  MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.  See the GNU
//  General Public License for more details.
//
//  You should have received a copy of the GNU General Public License
//  along with this program.  If not, see
//  <http://www.gnu.org/licenses/>.
#include "dmrgsystem.h"
#include "heisenberg.h"
#include <fstream>

// DMRG solving routine
double * DMRG_Solve(Model &H, double Tol);

int main(int argc, char* argv[])
{
    ofstream res1, res2;
    res1.open("res1xxx.txt");
    res2.open("res2xxx.txt");

    if (argc<2)
        merror("Syntaxis: L\n");

    long L=(long)atoi(argv[1]);
    double Tol=1e-5;
    double *b;

    for(double J=-4.00; J<0.0; J=J+0.25){
        Model H;
        XXX(H,L,J);
        b=DMRG_Solve(H,Tol);
        res1 << J << "\t" << *b << "\t" << *(b+1) << "\t" << *(b+2) << "\n";
    }
    for(double J=0.25; J<=4.00; J=J+0.25){
        Model H;
        XXX(H,L,J);

```

```

        b=DMRG_Solve(H,Tol);
        res2 << J << "\t" << *b << "\t" << *(b+1) << "\t" << *(b+2) << "\n";
    }
    res1.close();
    res2.close();
    return 0;
}

```

```

// DMRG solving routine
double * DMRG_Solve(Model &H, double Tol) {
    long L=H.G.N;
    double a[3];
    double m=0;
    List P;
    P=List_Interval(1,L);
    bool save_to_disk=false;
    long nsweep=6;
    System S(H,P,L/2,Tol,save_to_disk);
    //para otros modelos y heisenberg xxz <1 -----> sector L/2
    S.n sweep=nsweep;
    S.Warmup();
    double old_energy;
    do {
        old_energy=S.E0;
        S.Sweep();
        // printf("Energy: %g (%g)\n",S.E0,old_energy);
    } while(fabs(S.E0-old_energy)>1e-10);

    // printf("Singlet: %16.12g\n",S.E0);
    a[0]=S.E0;

    // printf("** Entanglement (DMRG):\n");
    //para otros modelos y heisenberg XXZ<1, sector L/2
    Vector Ent=Flatten(S.RhoSpectra[L/2]);
    Ent.Order(-1);
    printf("Spectrum: ");
}

```

```

for (long k=1;k<=MIN(Ent.N,10);k++) {
    m++;
    printf("%g ",Ent(k));
}

    printf("Sum: %g",Ent.Sum());
printf("\n");
double SvN=Von_Neumann(Ent);
//printf("Von Neumann: %g\n",SvN);

a[1]=SvN;
a[2]=m;
return a;
}

```

A.2.3. Modelo de Heisenberg XXZ

```

// DMRG implementation for the Heisenberg model
// Copyright (C) 2017
// P. Delcompare (paoladelcompare@gmail.com)
// G. Ramirez Garcia (ramirez@ecfm.usac.edu.gt)
//
// This program is free software: you can redistribute it and/or
// modify it under the terms of the GNU General Public License as
// published by the Free Software Foundation, either version 3 of
// the License, or (at your option) any later version.
//
// This program is distributed in the hope that it will be useful,
// but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of
// MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU
// General Public License for more details.
//
// You should have received a copy of the GNU General Public License

```

```

//    along with this program.  If not, see
//    <http://www.gnu.org/licenses/>.
#include "dmrgsystem.h"
#include "heisenberg.h"
#include <fstream>

double * DMRG_Solve(Model &H, double Tol, int sectorx2);

int main(int argc, char* argv[])
{
    ofstream res1, res2;
    res1.open("res1xxz.txt");
    res2.open("res2xxz.txt");
    if (argc<2)
        merror("Syntaxis: L\n");

    long L=(long)atoi(argv[1]);
    double Tol=1e-5;
    double *b;

    for(double J=-3.00; J<1.00; J=J+0.25){
        Model H;
        XXZ(H,L,J);
        b=DMRG_Solve(H,Tol,1);
        res1 << J << "\t" << *b << "\t" << *(b+1) << "\t" << *(b+2) << "\n";
    }
    for(double J=1.00; J<=5.00; J=J+0.25){
        Model H;
        XXZ(H,L,J);
        b=DMRG_Solve(H,Tol,2);
        res2 << J << "\t" << *b << "\t" << *(b+1) << "\t" << *(b+2) << "\n";
    }
    res1.close();
    res2.close();
    return 0;
}

```

```

// DMRG solving routine
double * DMRG_Solve(Model &H, double Tol, int sectorx2) {
    long L=H.G.N;
    double a[3];
    double m=0;
    List P;
    P=List_Interval(1,L);
    bool save_to_disk=false;
    long nsweep=6;
    System S(H,P,L/2*sectorx2,Tol,save_to_disk);
    //para otros modelos y heisenberg xxz <1 -----> sector L/2
    S.nosweep=nsweep;
    S.Warmup();
    double old_energy;
    do {
        old_energy=S.E0;
        S.Sweep();
        // printf("Energy: %g (%g)\n",S.E0,old_energy);
    } while(fabs(S.E0-old_energy)>1e-10);

    // printf("Singlet: %16.12g\n",S.E0);
    a[0]=S.E0;

    // printf("** Entanglement (DMRG):\n");
    //para otros modelos y heisenberg XXZ<1, sector L/2
    Vector Ent=Flatten(S.RhoSpectra[L/2]);
    Ent.Order(-1);
    printf("Spectrum: ");

    for (long k=1;k<=MIN(Ent.N,10);k++) {
        m++;
        printf("%g ",Ent(k));
    }
}

```

```
printf("Sum: %g",Ent.Sum());
printf("\n");
double SvN=Von_Neumann(Ent);
//printf("Von Neumann: %g\n",SvN);

a[1]=SvN;
a[2]=m;
return a;
}
```