

**Universidad del Valle de Guatemala**  
FACULTAD DE CIENCIAS Y HUMANIDADES  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA



**EQUIVALENCIAS ENTRE MODELOS DE MECÁNICA  
ESTADÍSTICA Y MECÁNICA CUÁNTICA DE  
MUCHOS CUERPOS**

TRABAJO DE GRADUACIÓN PRESENTADO POR  
**PEDRO JULIO VALDÉS HERNÁNDEZ**  
PARA OPTAR AL GRADO ACADÉMICO  
DE LICENCIADO EN FÍSICA

GUATEMALA  
2020



**EQUIVALENCIA ENTRE MODELOS DE MECÁNICA  
ESTADÍSTICA Y MECÁNICA CUÁNTICA DE  
MUCHOS CUERPOS**

**Universidad del Valle de Guatemala**  
FACULTAD DE CIENCIAS Y HUMANIDADES  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA



**EQUIVALENCIAS ENTRE MODELOS DE MECÁNICA  
ESTADÍSTICA Y MECÁNICA CUÁNTICA DE  
MUCHOS CUERPOS**

TRABAJO DE GRADUACIÓN PRESENTADO POR  
**PEDRO JULIO VALDÉS HERNÁNDEZ**  
PARA OPTAR AL GRADO ACADÉMICO  
DE LICENCIADO EN FÍSICA

GUATEMALA  
2020

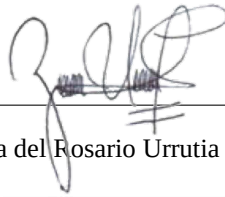
Vo.Bo.:



---

MSc. Juan Diego Chang

Tribunal Examinador:



---

MSc. Zaida del Rosario Urrutia del Cid



---

MSc. Juan Diego Chang



---

Dr. Giovanni Ramírez García

Fecha de aprobación:

Guatemala, Junio de 2020

# Prefacio

Desde mis inicios en el estudio de física, he considerado que la explicación a muchos fenómenos puede ser encontrada detalladamente si se conoce el comportamiento y la interacción de los componentes del sistema que se desea estudiar. Al conocer la mecánica estadística y la mecánica cuántica comprendí que no soy el único en pensar de esa forma y que existen ramas de la física que desean explicar estas interacciones de forma teórica. Añadido a esta idea, surgió la oportunidad de hacer mis prácticas profesionales con el MSc. Juan Diego Chang, a quien agradezco por darme la oportunidad de adentrarme en el mundo de la materia condensada y mostrarme que con la unión de estas ramas de la física es posible dar un paso más al entendimiento de la materia.

Asimismo, otro especial agradecimiento al MSc. Juan Diego Chang por apoyarme en el asesoramiento y revisión de este trabajo de graduación, quién a pesar de sus compromisos estuvo dispuesto a apoyarme y hacer tiempo cuando era necesario. Agregado a esto, el envío del código de programación que usé como base para uno de los resultados obtenidos. También, agradezco a PhD Giovanni Ramirez por estar a disposición cuando lo necesitara.

También agradezco a mis catedráticos de la Universidad del Valle de Guatemala quienes han sido parte de mi formación profesional e impulsores de mi participación en la ciencia.

Agradezco a mis padres por su apoyo incondicional, los ánimos dados y la atención que me han dado, tanto en mi vida universitaria como en lo personal. A mi hermana, porque sin las risas y su apoyo en momentos difíciles no habría podido superarme.

Agradezco a mis amigos que me acompañaron durante la carrera, por su apoyo y amistad, por pasar buenos momentos y estar allí en los malos también.



# Índice general

|  |            |
|--|------------|
| <b>Lista de figuras</b>                                  | <b>VI</b>  |
| <b>Lista de cuadros</b>                                  | <b>VII</b> |
| <b>Lista de simbolos</b>                                 | <b>IX</b>  |
| <b>Resumen</b>   | <b>XI</b>  |
| <b>1. Introducción</b>                                   | <b>1</b>   |
| <b>2. Objetivos</b>                                      | <b>3</b>   |
| 2.1. General . . . . .                                   | 3          |
| 2.2. Específicos . . . . .                               | 3          |
| <b>3. Mecánica estadística</b>                           | <b>5</b>   |
| 3.1. Introducción . . . . .                              | 5          |
| 3.2. Transiciones de fase y puntos críticos . . . . .    | 5          |
| 3.2.1. Transiciones de fase termodinámicas . . . . .     | 6          |
| 3.2.2. Transiciones de fase cuánticas . . . . .          | 6          |
| 3.2.3. Transiciones de fase magnéticas . . . . .         | 7          |
| 3.3. Función de partición . . . . .                      | 8          |
| <b>4. Modelo de Ising clásico</b>                        | <b>11</b>  |
| 4.1. Introducción . . . . .                              | 11         |
| 4.2. Energía libre y magnetización . . . . .             | 12         |
| 4.3. Modelo de Ising para el sitio más cercano . . . . . | 13         |
| 4.4. Modelo de Ising en una dimensión . . . . .          | 14         |
| <b>5. Modelo de seis vértices</b>                        | <b>21</b>  |
| 5.1. Introducción . . . . .                              | 21         |
| 5.2. Modelos tipo hielo . . . . .                        | 21         |
| 5.3. Matriz de transferencia . . . . .                   | 24         |
| 5.4. Fases ferroeléctricas . . . . .                     | 31         |
| 5.4.1. Fase ferroelectrica: $\Delta_{6V} > 1$ . . . . .  | 31         |

|   |           |
|---|-----------|
| 5.4.2. Fase desordenada: $-1 < \Delta_{6V} < 1$ . . . . .                             | 32        |
| 5.4.3. Fase anti-ferroeléctrica: $\Delta_{6V} < -1$ . . . . .                         | 32        |
| <b>6. Modelo de Heisenberg</b>  | <b>35</b> |
| 6.1. Introducción . . . . .   | 35        |
| 6.2. Modelo XXX . . . . .   | 36        |
| 6.2.1. Caso $r = 0$ y $r = 1$ . . . . .   | 37        |
| 6.2.2. Caso $r = 2$ . . . . .   | 38        |
| 6.3. Modelo XXZ . . . . .   | 41        |
| 6.3.1. Caso $r = 0$ y $r = 1$ . . . . .   | 41        |
| 6.3.2. Caso $r = 2$ . . . . .   | 42        |
| 6.3.3. Caso $r = 3$ . . . . .   | 44        |
| 6.3.4. Ansatz de Bethe . . . . .  | 46        |
| <b>7. Equivalencia entre el modelo de seis vértices y el modelo de Heisenberg</b>     | <b>57</b> |
| 7.1. Equivalencia del modelo de seis vértices y el modelo de Heisenberg . . . . .     | 57        |
| 7.2. Propiedades físicas . . . . .  | 58        |
| <b>8. Conclusiones</b>  | <b>61</b> |
| <b>9 Bibliografía</b>   | <b>63</b> |
| <b>10. Anexos</b>   | <b>65</b> |
| 10.1. Código para la magnetización del modelo de Ising . . . . .                      | 65        |
| 10.2. Código de las ecuaciones de Yang-Baxter en el modelo de seis vértices . . . . . | 65        |
| 10.3. Código para graficar el diagrama de fase del modelo de seis vértices . . . . .  | 68        |
| 10.4. Código para el modelo de Heisenberg . . . . .                                   | 68        |

# Índice de figuras

|   |    |
|---|----|
| 3.1. Gráfica de la magnetización de una barra de hierro en función del campo magnético aplicado. . . . .  | 8  |
| 4.1. Ejemplo de una cadena con 9 sitios para el modelo de Ising. . . . .  | 14 |
| 4.2. Ejemplo de una cadena con 9 sitios con condiciones de frontera periódicas. . . . .   | 14 |
| 4.3. Gráfica de la magnetización en función de la temperatura de una cadena en el modelo de Ising para el sitio más cercano con condiciones de frontera periódicas tomando $J = k_b = h = 1$ . . . . .  | 18 |
| 4.4. Gráfica de la primera derivada respecto a la temperatura de la magnetización por sitio de una cadena en el modelo de Ising para el sitio más cercano con condiciones de frontera periódicas tomando $J = k_b = h = 1$ . . . . .  | 19 |
| 4.5. Gráfica de magnetización en función del campo magnético externo de una cadena en el modelo de Ising para el sitio más cercano con condiciones de frontera periódicas tomando $J = k_b = 1$ . . . . .   | 19 |
| 5.1. Representación de las configuraciones permitidas en el modelo de seis vértices. . . . .  | 22 |
| 5.2. Orden anti-ferroeléctrico del modelo de seis vértices. . . . .   | 33 |
| 5.3. Diagrama de fase para el modelo de seis vértices en función de los pesos de Boltzman. La región blanca representa la fase desordenada del modelo; la región roja y amarilla, indica que el modelo pasa por una fase ferroeléctrica ordenada; y, la región azul, muestra los valores en los cuales el sistema tiene una fase anti-ferroeléctrica. . . . . | 34 |
| 5.4. Diagrama de fase del modelo de seis vértices con el parámetro $\Delta_{6VM}$ . . . . .   | 34 |
| 6.1. Gráfica de la magnetización en función de $\Delta$ para una cadena de 4 espines bajo un campo magnético nulo. . . . .  | 52 |
| 6.2. Gráfica de la magnetización en función de $\Delta$ para una cadena de 4 espines bajo un campo magnético con valor $h = 2$ . . . . .  | 53 |
| 6.3. Gráfica de la magnetización en función del campo magnético externo para una cadena de cuatro espines con $\Delta = -2$ . . . . .   | 54 |
| 6.4. Gráfica de la magnetización en función del campo magnético externo para una cadena de cuatro espines con $\Delta = 2$ . . . . .  | 54 |

6.5. Diagrama de fase de una cadena XXZ en el modelo de Heisenberg. La región celeste muestra los valores en los cuales el sistema pasa por la fase antiferromagnética; la región morada y verde, fase paramagnética; y la región roja, una fase ferromagnética. 55

# Índice de cuadros

|   |    |
|---|----|
| 7.1. Equivalencias de las propiedades ferroeléctricas y ferromagnéticas del modelo de seis vértices y el modelo de Heisenberg, respectivamente. . . . . | 60 |
|---|----|



# Lista de símbolos

|                   |  |
|-------------------|--|
| $h$               | Campo magnético  |
| $M$               | Magnetización promedio por sitio                         |
| $k_B$             | Constante de Boltzman                                    |
| $Z$               | Función de partición                                     |
| $H$               | Hamiltoniano   |
| $J$               | Constante de acoplamiento en el modelo de Heisenberg     |
| $\sigma_i^\alpha$ | Operadores de Pauli                                      |
| $\Delta$          | Constante de anisotropía en el modelo de Heisenberg      |
| $r$               | Cantidad de espines volteados en el modelo de Heisenberg |
| $\mathbf{T}$      | Matriz de transferencia para el modelo de seis vértices  |
| $\Delta_{6V}$     | Constante de conmutación en el modelo de seis vértices   |



# Resumen

Las propiedades magnéticas y eléctricas de los materiales han sido objeto de estudio para la física teórica, tanto desde un punto de vista microscópico como desde la perspectiva de la mecánica cuántica. Entre los modelos desarrollados para este estudio se encuentra el modelo de Heisenberg para una cadena de espines como modelo cuántico y magnético, y el modelo de seis vértices para una red cristalina, como un modelo clásico de mecánica estadística y modelo eléctrico. Aparentemente estos modelos son completamente distintos, sin embargo el objetivo de este trabajo de graduación es estudiar una equivalencia entre ambos modelos, así como estudiar la analogía que existen entre distintos materiales con propiedades eléctricas y magnéticas. Para ello, se toma un diferencial de la matriz de transferencia del modelo de seis vértices y se encuentra una relación con el hamiltoniano del modelo de Heisenberg para una cadena XXZ. Esta relación vincula la constante de acoplamiento en el modelo de Heisenberg con los pesos de Boltzman en el modelo de seis vértices. Para así analizar las implicaciones de una fase ferroeléctrica del modelo clásico sobre las fases ferromagnéticas del modelo cuántico. Con ello se obtuvo que una fase ferroeléctrica ordenada en el modelo de seis vértices tiene como análogo magnético dos fases diferentes en el modelo de Heisenberg: una fase con un orden ferromagnético, y otra fase en la cual el sistema es susceptible al cambio de campo magnético externo. Finalmente, se concluye que el diagrama de fase del modelo de seis vértices equivale al diagrama de fase de una cadena de Heisenberg.



# 1 Introducción

En este trabajo de graduación se presentan dos modelos de física estadística. Uno de ellos cuántico: el modelo de Heisenberg para una cadena de espines; y el otro, desde la perspectiva microscópica de un material cristalino: el modelo de seis vértices. Se comienza introduciendo conceptos clave de mecánica estadística. Entre ellos, una definición de transiciones de fase, tanto termodinámicas como cuánticas.

Seguidamente, se estudia el modelo de Ising para ilustrar la interacción de partículas en una malla. El estudio de este modelo permite explicar el uso de la matriz de transferencia como técnica analítica para diagonalizar de forma exacta el hamiltoniano y encontrar las propiedades físicas del sistema junto con la función de partición. Al encontrar la función de magnetización para una cadena unidimensional, se ejemplifica el concepto de transiciones de fase magnéticas.

La siguiente parte consta de la definición del modelo de seis vértices y la definición de la matriz de transferencia para este modelo. Se trabaja la matriz de transferencia con el fin de encontrar una condición en la cual dos matrices con distintos parámetros conmuten y así demostrar la existencia de una base común para toda matriz de transferencia. Finalmente, se demuestra la acción de dicha matriz sobre el sistema con condiciones de frontera periódicas. Para este modelo se hace una clasificación de las fases ferroeléctricas según la constante encontrada como condición de conmutatividad entre dos matrices.

Luego, se presenta el modelo de Heisenberg para una cadena unidimensional como un modelo ferromagnético, empezando por el estudio del modelo XXX por simplicidad, para luego extenderse al modelo XXZ. En ambos modelos se analiza la aplicación del Ansatz de Bethe para casos específicos y se concluye con la aplicación del Ansatz en el modelo XXZ. Además, se clasifica el modelo en fases ferromagnéticas según la anisotropía del modelo  $\Delta$ , en la definición del hamiltoniano. Junto con esta clasificación, se muestran gráficas de la magnetización por sitio en función de esta anisotropía y del campo magnético externo, así como el diagrama de fase para este modelo.

Finalmente, la última sección parte de la definición de la matriz de transferencia del modelo de seis vértices y se muestra una relación con el modelo XXZ. Dentro de la construcción de la equivalencia se encuentra una relación entre la anisotropía del modelo de Heisenberg con los pesos

de Boltzman en el modelo de seis vértices. De esta forma se presentan las implicaciones físicas del modelo de Heisenberg al variar los pesos de Boltzman. En esta sección se encuentran resultados numéricos del estado base y la magnetización del modelo XXZ variando el campo magnético externo  $h$  del hamiltoniano y el número de partículas en la cadena.

## 2 Objetivos

### 2.1. General

Estudiar una equivalencia matemática entre dos modelos físicos, uno de mecánica estadística y otro de mecánica cuántica, así como estudiar la analogía que existe entre distintos materiales con propiedades eléctricas y magnéticas.

### 2.2. Específicos

- Estudiar el modelo de seis vértices y las transiciones de fase ferroeléctricas.
- Estudiar el modelo de Heisenberg para una cadena XXZ y las transiciones de fase ferromagnéticas.
- Encontrar una relación matemática entre los modelos estudiados y sus respectivos diagramas de fase.



# 3 Mecánica estadística

## 3.1. Introducción

Uno de los objetivos del estudio de la física es la explicación de las propiedades de la materia. A nivel microscópico, un objeto se puede modelar como un sistema compuesto por grandes cantidades de moléculas cuyas propiedades son conocidas. Sin embargo, el estudio de las propiedades de cada componente no es tarea fácil, no solo por la gran cantidad de componentes, sino por los estados posibles de cada una y la interacción con otras moléculas en el sistema. Es por ello que se hace uso de la mecánica estadística, en donde las propiedades del sistema completo se obtienen a partir de la probabilidad de encontrar cada molécula individual en un estado determinado. De esta forma, es posible predecir propiedades macroscópicas del sistema a partir del conocimiento de propiedades microscópicas medibles tales como el espín de una partícula, la carga de un electrón o los enlaces entre moléculas; propiedades que no son notorias a simple vista. Un ejemplo de su utilidad es determinar la magnetización de un material si se conocen los posibles estados cuánticos de espines que lo conforman, o las propiedades de un vaso de agua según la distribución de sus moléculas y la fuerza de enlace entre los átomos de hidrógeno y oxígeno (Pathria y Bale, 2011). A continuación, se presentarán algunos conceptos útiles de mecánica estadística para una mejor comprensión de los modelos que se trabajarán posteriormente.

## 3.2. Transiciones de fase y puntos críticos

Para varios fenómenos físicos, el formalismo de la mecánica estadística se puede dividir en dos categorías. En la primera, las funciones termodinámicas de un sistema microscópico se pueden obtener a partir de solo los niveles de energía de los componentes individuales. En este caso, las funciones termodinámicas obtenidas son continuas y suaves.

Por otro lado, en la segunda categoría las funciones termodinámicas que describen el sistema poseen discontinuidades analíticas o singularidades. Estas singularidades corresponden a la ocurrencia de transiciones de fase. (Pathria y Bale, 2011)

Las transiciones de fase son el resultado que las propiedades de un sistema en equilibrio cambian cuantitativamente de forma abrupta. Estos cambios se ven en los potenciales termodinámicos en función de los parámetros de orden. Los parámetros de orden son observables, generalmente,

definidos en todo punto del espacio; un ejemplo de estos parámetros es la densidad, en sistemas clásicos; y, la magnetización, en materiales ferromagnéticos. Con esto, el sistema es inestable durante una transición de fase por lo que un pequeño cambio a los parámetros de orden produce un cambio en las funciones de estado. Esta inestabilidad es lo que proporciona el comportamiento no analítico de las funciones termodinámicas. (Vojta, 2015)

Además, las transiciones de fase se pueden clasificar en transiciones de primer orden o transiciones continuas. En el caso de las transiciones de fase de primer orden, el parámetro de orden cambia de una forma no continua durante la transición de fase. Es decir, la discontinuidad del potencial termodinámico se da en la función. En este caso, las dos fases coexisten al mismo tiempo durante la transición de fase. Por ejemplo, el agua líquida y el hielo coexisten cuando la temperatura es  $T = 0^\circ C$ , así como el agua y el vapor de agua a  $T = 100^\circ C$ ; ambos casos ejemplifican transiciones de fase de primer orden. (Vojta, 2003)

Por otro lado, en las transiciones de fase continuas o de segundo orden, los parámetros de orden varían continuamente durante la transición. De esta forma la función del potencial termodinámico no posee discontinuidades pero la primera derivada sí. Un ejemplo de ello es la transición ferromagnética de un hierro, donde la magnetización reduce continuamente al variar el campo magnético externo. (Vojta, 2003)

### **3.2.1. Transiciones de fase termodinámicas**

Las transiciones de fase termodinámicas ocurren al variar la temperatura del sistema. Por lo general, estas transiciones de fase van de una fase ordenada de baja temperatura, a una fase más desordenada a una temperatura mayor. En este escenario, el orden del sistema es destruido por fluctuaciones térmicas. (Vojta, 2015)

### **3.2.2. Transiciones de fase cuánticas**

Las transiciones de fase cuánticas son transiciones de fase a temperatura  $T = 0$ , las cuales pueden ocurrir variando un parámetro no térmico de las funciones, tales como la presión, el campo magnético o la composición química del sistema. Como el proceso ocurre a temperatura nula, las transiciones de fase cuánticas implican un comportamiento no analítico en las funciones termodinámicas en el estado de menor energía producidas por fluctuaciones cuánticas. (Vojta, 2015)

Finalmente, una característica importante de estos sistemas es que la interacción ente partícu-

las no puede ser removida por algún cambio de coordenadas. Esto indica que los niveles de energía del sistema completo no se pueden relacionar directamente con la energía de los componentes individuales. En vez de ello, se estudian condiciones en las cuales la mayoría de los componentes microscópicos del sistema actúen de tal forma que se observe una interacción entre ellos y se forme una tendencia cooperativa entre partículas. Al estudiar la fuerza con la que actúan los componentes, la interacción cooperativa toma relevancia a nivel macroscópico a cierta temperatura  $T_c$ , llamado punto crítico. (Pathria y Bale, 2011)

### 3.2.3. Transiciones de fase magnéticas

Para ejemplificar el concepto de transición de fase, se considera una barra de hierro bajo un campo magnético fuerte  $h$  paralelo a uno de sus ejes. Bajo este campo magnético, la barra está completamente magnetizada en dirección del campo aplicado; así, la magnetización promedio por sitio es  $M = 1$ . Ahora, si se remueve el campo magnético externo,  $h = 0$ , la magnetización de la barra decrecerá pero no completamente hasta cero sino que tendrá un valor menor al medido bajo la existencia del campo magnético. Es decir, ahora el campo magnético nulo genera una magnetización espontánea  $M_0$  en la barra metálica.

Por otro lado se espera que, al tener un campo magnético en dirección opuesta,  $-h$ , la magnetización por sitio se revierta con igual magnitud,  $M = -1$ . Para que esto se cumpla,  $M$  tiene que ser una función impar de  $h$  con una discontinuidad en  $h = 0$ . Esta discontinuidad representa la transición de fase magnética en  $h = 0$ . En la figura (3.1) se observa la gráfica de magnetización en función del campo magnético externo, aquí la transición de fase se entiende como la pendiente infinita en el punto  $h = 0$ . (Baxter, 1989)

En este escenario, se supone que la temperatura incrementa poco a poco. Con ello, se encuentra que  $M_0$  decrece hasta que la temperatura llega a un valor crítico  $T_c$  y  $M_0 = 0$ .

Con ello se tiene que la barra de hierro pasa por una transición de fase magnética al cambiar un campo magnético negativo a uno positivo. (Baxter, 1989)

Esto se estudiará más a detalle en el modelo de Heisenberg XXZ, ya que este presenta transiciones de fase magnéticas, las cuales luego se compararán con las transiciones de fase eléctricas que presenta el modelo de seis vértices.

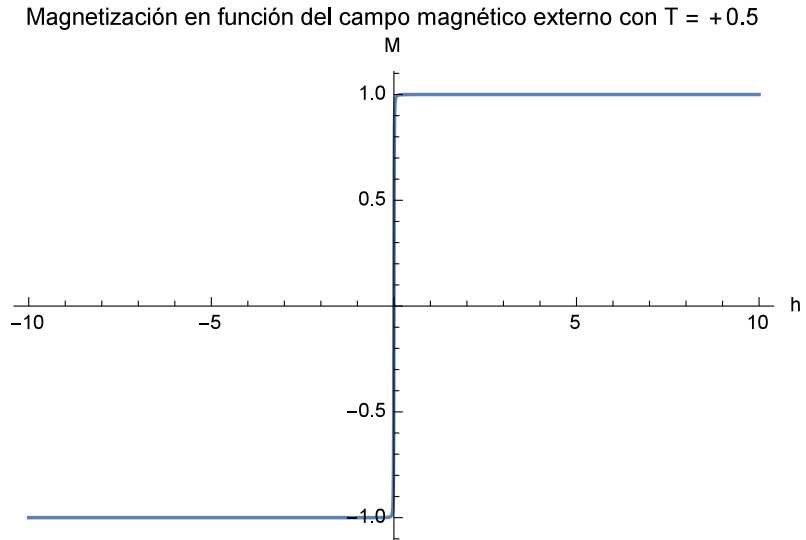


Figura 3.1: Gráfica de la magnetización de una barra de hierro en función del campo magnético aplicado.

Fuente: Elaboración propia

### 3.3. Función de partición

En mecánica estadística, la función de partición es un funcional de un sistema en equilibrio. Asimismo, la descripción de los estados de un sistema en el equilibrio térmico se obtiene cuando la entropía es máxima. (Callen, 1985:43)

La entropía es una función de la cual se obtiene una medida del número posible de microestados de un sistema. Así, la entropía de Gibbs se define como

$$S = -k_B \sum_i P_i \ln P_i. \quad (3.1)$$

En particular, para un ensemble canónico, se desea maximizar la entropía con la energía como restricción. Entonces, las restricciones para un ensemble canónico son,

$$\sum_i P_i = 1 \quad (3.2)$$

$$\langle E \rangle = \sum_i P_i E_i = U, \quad (3.3)$$

donde  $P_i$  es la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado  $i$ ;  $E_i$ , la energía del  $i$ -ésimo estado; y  $U$ , la energía esperada del sistema.

Para maximizar la entropía se utilizan multiplicadores de Lagrange, de esta forma las restricciones a las que está sujeta la función se traducen en estos multiplicadores. Así, el funcional a maximizar es,

$$L = S - \lambda_1 \left( \sum_i P_i - 1 \right) - \lambda_2 \left( \sum_i P_i E_i - U \right). \quad (3.4)$$

Entonces, para un estado  $j$ , se satisface que

$$\frac{\partial L}{\partial P_j} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda_1} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda_2} = 0. \quad (3.5)$$

Con estas condiciones, y desarrollando la entropía, se obtiene que la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado  $j$  es

$$P_j = \frac{e^{-\beta E_j}}{Z}. \quad (3.6)$$

con

$$Z = \sum_j e^{-\beta E_j}, \quad (3.7)$$

la función de partición para un ensemble canónico, donde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  y  $k_B$  es la constante de Boltzmann.

En este caso particular, se maximizó la entropía para un ensemble canónico por lo que la restricción es solo sobre la energía. De esta forma se obtiene un único multiplicador de Lagrange relevante,  $\lambda_2 = \frac{1}{T}$ .

Por otro lado, de la probabilidad  $P_j$ , si  $X$  es un observable del sistema, el valor esperado termodinámico es

$$\langle X \rangle = Z^{-1} \sum_s X(s) e^{-E(s)/kT}. \quad (3.8)$$

En particular, la energía interna se calcula como

$$\begin{aligned} U &= Z^{-1} \sum_s H(s) e^{-H(s)/kT} \\ &= Z^{-1} \sum_s \frac{\partial [e^{-H(s)/kT}]}{\partial T} T^2 k \\ U &= kT^2 Z^{-1} \frac{\partial Z}{\partial T}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Pero, si  $x(y)$ ,  $\frac{d}{dy} \ln x = \frac{1}{x} \frac{dx}{dy}$ . Entonces,

$$U = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z. \quad (3.10)$$

De esta forma, la función de partición es relevante en el estudio de mecánica estadística ya que con ella es posible caracterizar el sistema completo si se conoce su forma.

En general, la construcción de la función de partición se puede realizar con otras variables termodinámicas según las condiciones que el sistema requiera.

## 4 Modelo de Ising clásico

El modelo de Ising es un modelo físico con solución exacta, con el cual se puede ejemplificar el uso de la función de partición y la matriz de transferencia. Este modelo se utiliza como un modelo ejemplo para comprender las técnicas que se van a utilizar en el modelo de seis vértices.

### 4.1. Introducción

Se define el modelo de Ising como un modelo ferromagnético con dipolos restringidos en una malla. La interacción entre cada dipolo puede causar cambios en la energía de otros dipolos, produciendo un cambio en la energía total del sistema. De esta forma, la alineación de cada dipolo, y en consecuencia la magnetización del sistema, depende de dicha interacción. Cada dipolo tiene una orientación de magnetización preferente. Asimismo, el modelo de Ising es isotrópico, por lo que usualmente se elige el eje  $z$  como eje de magnetización de cada dipolo. Con ello, cada dipolo tiene dos posibles configuraciones:  $+1$  (espín arriba) o  $-1$  (espín abajo). Cada espín se denota por  $\sigma_i$ , donde  $i = 1, 2, \dots, N$  es el sitio en la malla con  $N$  vértices. El sistema descrito es entonces

$$\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}. \quad (4.1)$$

Como hay dos posibles configuraciones por cada espín en la malla, hay  $2^N$  posibles valores de  $\sigma$ . (Baxter, 1989)

Asimismo, se define la energía del sistema como una función del conjunto de espín,  $E = E(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ , dada por la contribución de dos funciones separadas.

$$E(\sigma) = E_0(\sigma) + E_1(\sigma). \quad (4.2)$$

donde  $E_0$  es la energía debido a las fuerzas intermoleculares entre cada dipolo, así como la energía responsable de la naturaleza ferromagnética del modelo; y,  $E_1$  es la energía resultante de la interacción entre los espines y un campo magnético externo (Baxter, 1989)

Debido a que  $\sigma_i$  es el momento magnético de cada dipolo  $i$ , la energía de interacción,  $E_1(\sigma)$ , se escribe como

$$E_1(\sigma) = -h \sum_i \sigma_i, \quad (4.3)$$

donde  $h$  es proporcional a la componente del campo magnético en la dirección del eje de magnetización.

Entonces, la función de partición del modelo de Ising es

$$Z_N(h, T) = \sum_{\sigma} e^{-\beta[E_0(\sigma) - h \sum_i \sigma_i]}. \quad (4.4)$$

donde  $\beta = 1/kT$  y la suma es sobre los posibles estados  $\sigma$ .

Esta función de partición se puede entender como la normalización del sistema en función de la energía que aporta cada espín.

## 4.2. Energía libre y magnetización

El estudio del modelo de Ising toma relevancia en el límite termodinámico, en donde las fluctuaciones de las variables termodinámicas son despreciables. En este caso, el límite termodinámico se alcanza para una gran cantidad de partículas. Es por ello que se espera que las funciones de estado estén definidas para grandes cantidades de dipolos en la malla. En este escenario, se define la energía libre por sitio como

$$f(h, T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_N(h, T). \quad (4.5)$$

Asimismo, la energía interna por sitio

$$u(h, T) = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} [f(h, T)/T], \quad (4.6)$$

y la magnetización, como el promedio del momento magnético en cada sitio,

$$\begin{aligned} M(h, T) &= N^{-1} \langle \sigma_1 + \dots + \sigma_N \rangle \\ M(h, T) &= N^{-1} Z_N^{-1} \sum_{\sigma} (\sigma_1 + \dots + \sigma_N) e^{-\beta[E_0(\sigma) - H \sum_i \sigma_i]}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

(Baxter, 1989)

Con estas definiciones se tiene que, derivando  $Z_N(H, T)$  respecto a  $h$

$$\frac{\partial Z_N(h, T)}{\partial h} = \left( \sum_{\sigma} e^{-\beta E_0(\sigma)} \right) \left( \beta \sum_i \sigma_i \times e^{\beta h \sum_i \sigma_i} \right). \quad (4.8)$$

Además, derivando la ecuación de energía libre por sitio (4.5) respecto a  $h$  se tiene

$$\frac{\partial f(h, T)}{\partial h} = N^{-1} Z_N^{-1} \sum_{\sigma} (\sigma_1 + \dots + \sigma_N) e^{-\beta E_0(\sigma) - h \sum_i \sigma_i}. \quad (4.9)$$

De modo que la magnetización se escribe en función de la energía libre por sitio,

$$M(h, T) = -\frac{\partial}{\partial h} f(h, T). \quad (4.10)$$

Encontrar esta magnetización es relevante en el modelo de Ising ya que es el parámetro que se utiliza para estudiar las transiciones de fase del modelo.

### 4.3. Modelo de Ising para el sitio más cercano

La forma más simple del modelo de Ising es cuando la interacción se da solo entre las partículas más cercanas. El hamiltoniano, que es el operador de energía, de esta interacción se expresa como

$$H_0(\sigma) = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j, \quad (4.11)$$

donde la suma es sobre los pares vecinos más cercanos en la malla y  $J$  es una constante de energía. Si  $J$  es positivo, el estado con menor energía se logra cuando todos los espines están alineados hacia la misma dirección en consecuencia de la interacción de cada espín con su vecino más cercano. Esta alineación establece un modelo ferromagnético. Por el contrario, si  $J$  es negativo, en el estado con menor energía se tiene una alineación antiferromagnética. Esta alineación corresponde al estado en el cual el valor de cada espín en la malla es opuesto a sus vecinos más cercanos.

Con este hamiltoniano, la función de partición es

$$Z_N = \sum_{\sigma} \exp \left[ \beta J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j + \beta h \sum_i \sigma_i \right]. \quad (4.12)$$

De las ecuaciones de magnetización (4.10) y energía libre por sitio (4.5)

$$M = \frac{\partial}{\partial(\beta h)} \left[ \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_N(h, J) \right]. \quad (4.13)$$

## 4.4. Modelo de Ising en una dimensión

Simplificando aún más el modelo, se toma el modelo de Ising sobre una cadena unidimensional con  $N$  sitios consecutivos, en la cual la interacción se da entre los vecinos más cercanos. Para este modelo, se supone que la cadena tiene condiciones de frontera periódicas, es decir que  $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ . Un ejemplo de esto es tener una cadena como en la Figura (4.1), donde cada flecha hacia arriba representa un espín arriba (+1) y una flecha hacia abajo, un espín abajo (-1). Este es uno de los posibles estados del sistema con 9 posiciones en la cadena. (Baxter, 1989)

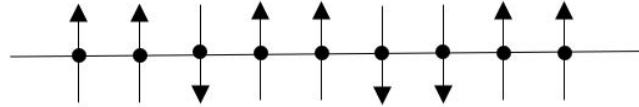


Figura 4.1: Ejemplo de una cadena con 9 sitios para el modelo de Ising.

Gráficamente, las condiciones de frontera periódicas se pueden entender como en la Figura (4.2).

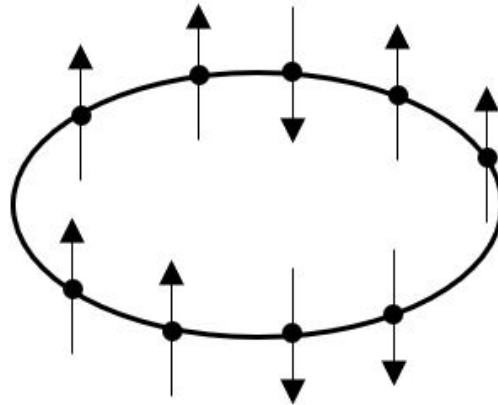


Figura 4.2: Ejemplo de una cadena con 9 sitios con condiciones de frontera periódicas.

Bajo estas condiciones, el hamiltoniano del sistema es

$$H(\sigma) = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (4.14)$$

Por las condiciones de frontera, se asegura que el sistema sea invariante ante traslaciones dando una simetría al sistema. De esta forma, será más sencillo encontrar una solución analítica al problema.

El valor esperado de espín es el mismo en cada sitio

$$\langle \sigma_1 \rangle = \cdots = \langle \sigma_N \rangle. \quad (4.15)$$

Por lo que la magnetización por sitio es

$$M(h, T) = \langle \sigma_1 \rangle, \quad (4.16)$$

donde  $\sigma_1$  es un sitio cualquiera sobre la cadena.

Con el hamiltoniano definido, la función de partición es

$$Z_N = \sum_{\sigma} \exp \left[ \beta J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta h \sum_{i=1}^N \sigma_i \right]. \quad (4.17)$$

En este punto, se define un vector  $V$  como

$$V(\sigma, \sigma') = \exp \left[ \beta J \sigma \sigma' + \frac{1}{2} \beta h (\sigma + \sigma') \right] = V(\sigma', \sigma). \quad (4.18)$$

Con este vector y las condiciones de frontera, se reescribe la función de partición como

$$Z_N = \sum_{\sigma} \prod_i^N V(\sigma_i, \sigma_{i+1}), \quad (4.19)$$

donde la suma es sobre los posibles estados de cada espín en la cadena; es decir,  $\sigma = \pm 1$  en cada sitio. (Baxter, 1989).

Estos vectores  $V(\sigma, \sigma')$  se consideran como elementos de una matriz de  $2 \times 2$ .

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} V(+, +) & V(+, -) \\ V(-, +) & V(-, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta h} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta h} \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

De esta forma, la sumatoria sobre  $\sigma_i$  de la ecuación (4.19) es una multiplicación de matrices. Al realizar el producto se obtiene una matriz diagonal, por lo que la sumatoria sobre  $\sigma_1$  es la traza de la matriz resultante

$$Z_N = \text{Tr}(\mathbf{V}^N). \quad (4.21)$$

Aquí  $\mathbf{V}$  es la matriz de transferencia para el modelo de Ising en una dimensión (Baxter, 1989).

Para simplificar la función de partición, se considera  $\mathbf{x}_1$  y  $\mathbf{x}_2$  autovectores de  $\mathbf{V}$  y  $\lambda_1, \lambda_2$  los autovalores correspondientes. Entonces, se tiene la ecuación de autovalores

$$\mathbf{V}\mathbf{x}_i = \lambda_i\mathbf{x}_i. \quad (4.22)$$

con  $i = 1, 2$ .

De esta forma, se define a  $\mathbf{P}$  como la matriz con vectores columna  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ . Así,

$$\mathbf{VP} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

Por la elección de  $\mathbf{P}$ , esta matriz tiene inversa. Por lo que es posible expresar  $\mathbf{V}$  como

$$\mathbf{V} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \mathbf{P}^{-1} \quad (4.24)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación (4.21),

$$Z_N = \text{Tr} \left( \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \right)^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N. \quad (4.25)$$

Esta expresión es equivalente a la ecuación (4.21) ya que la traza de un operador es invariante ante cambios de base.

Ahora, si  $\lambda_1$  es el autovalor más grande y se reescribe la ecuación anterior como

$$\begin{aligned} N^{-1} \ln Z_N &= N^{-1} \ln (\lambda_1^N + \lambda_2^N) \\ &= N^{-1} \ln \{ \lambda_1^N [1 + (\lambda_2/\lambda_1)^N] \} \\ &= N^{-1} \ln \lambda_1^N + N^{-1} \ln [1 + (\lambda_2/\lambda_1)^N] \\ N^{-1} \ln Z_N &= \ln \lambda_1 + N^{-1} \ln [1 + (\lambda_2/\lambda_1)^N], \end{aligned} \quad (4.26)$$

y, como  $|\lambda_2/\lambda_1| < 1$ , el segundo termino tiende a cero cuando  $N \rightarrow \infty$ . Entonces, de la ecuación (4.5), la energía libre por sitio es

$$\begin{aligned} f(h, T) &= -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_N \\ f(h, T) &= -kT \ln \lambda_1, \end{aligned} \quad (4.27)$$

donde  $\lambda_i$  se encuentra al resolver la ecuación de autovalores

$$\mathbf{P}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}. \quad (4.28)$$

Resolviendo,

$$\det(\mathbf{P} - I\lambda)\mathbf{x} = 0. \quad (4.29)$$

Como esta ecuación es válida para todo  $\mathbf{x}$ , y sustituyendo de forma explícita la matriz  $\mathbf{P}$ , se tiene que

$$\det \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} - \lambda \end{pmatrix} = 0. \quad (4.30)$$

$$(e^{\beta(J+h)} - \lambda)(e^{\beta(J-h)} - \lambda) - e^{-2\beta J} = 0 \quad (4.31)$$

$$\lambda^2 - \lambda(e^{\beta(J+h)} + e^{\beta(J-h)}) + (e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}) = 0. \quad (4.32)$$

$$\lambda = \frac{e^{\beta(J+h)} + e^{\beta(J-h)}}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}[e^{2\beta J}(2^{2\beta h} + e^{-2\beta h}) - 2e^{2\beta J} + 4e^{-2\beta J}]} \quad (4.33)$$

$$\lambda = e^{\beta J} \cosh \beta h \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2 h + e^{-2\beta J}}.$$

Entonces, sustituyendo  $\lambda_1$  en la ecuación

$$f(h, T) = -kT \ln [e^{\beta J} \cosh \beta h + (e^{2\beta J} \sinh^2 h + e^{-2\beta J})^{1/2}]. \quad (4.34)$$

Derivando esta ecuación respecto a  $h$ ,

$$M(h, T) = \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h}{[e^{2\beta J} \sinh^2 h + e^{-2\beta J}]^{1/2}}. \quad (4.35)$$

La magnetización  $M(h, T)$  es una función analítica de  $h$  para todo real positivo  $T$ .

De la gráfica (4.3), cuando la temperatura es  $T = 0$ , la magnetización por sitio es  $M = 1$ , lo cual significa que todos los espines de la cadena están completamente alineados. En términos de los valores que puede tomar cada sitio,  $\sigma = (+1, +1, +1, +1, \dots)$  o  $\sigma = (-1, -1, -1, -1, \dots)$ . Por el contrario, cuando la temperatura  $T \rightarrow \infty$ , la magnetización por sitio  $M \rightarrow 0$ . Esto indica que el valor del dipolo en cada sitio va alternando; es decir,  $\sigma = (+1, -1, +1, -1, \dots)$ .

Asimismo, si  $h \rightarrow 0$ , entonces  $M(h, T) \rightarrow 0$  para todo  $K$  finito. En las gráficas de la Figura

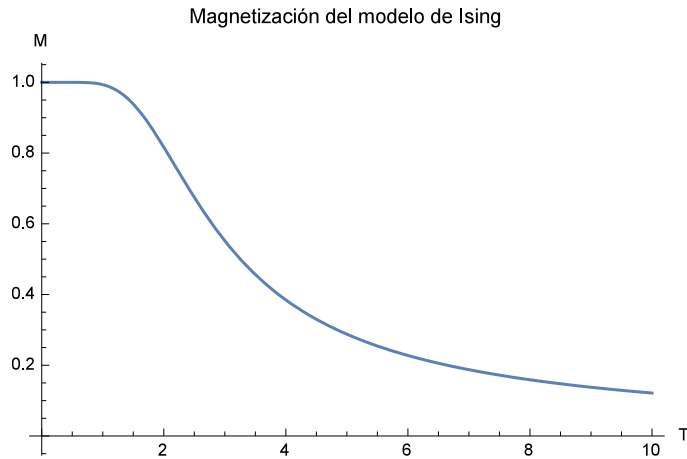


Figura 4.3: Gráfica de la magnetización en función de la temperatura de una cadena en el modelo de Ising para el sitio más cercano con condiciones de frontera periódicas tomando  $J = k_b = h = 1$ .

Fuente: Elaboración propia

(4.5) se muestra la magnetización en función de un campo magnético externo aplicado sobre el sistema con diferentes valores de temperatura. Se observa que a distintas temperaturas, la función de magnetización es suave y continua para todo valor de temperatura por lo que no se observan transiciones de fase de primer orden.

Por otro lado, en la Figura (4.4) se muestra la gráfica de la primera derivada respecto a la temperatura de la magnetización por sitio del modelo de Ising. De igual manera, esta gráfica representa una función suave por lo que tampoco hay transiciones de fase continuas para el modelo de Ising en una dimensión.

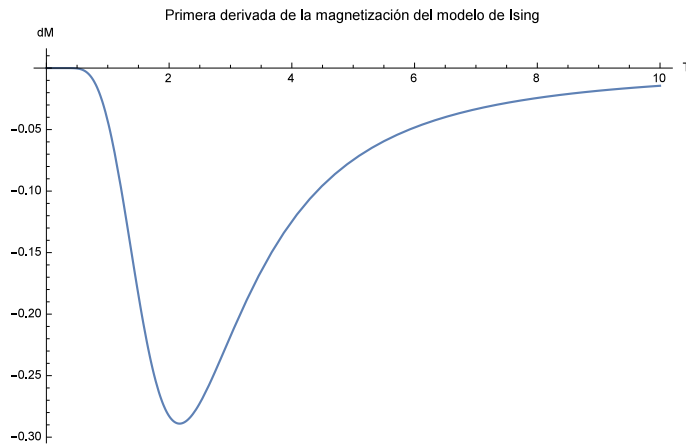


Figura 4.4: Gráfica de la primera derivada respecto a la temperatura de la magnetización por sitio de una cadena en el modelo de Ising para el sitio más cercano con condiciones de frontera periódicas tomando  $J = k_b = h = 1$ .

Fuente: Elaboración propia

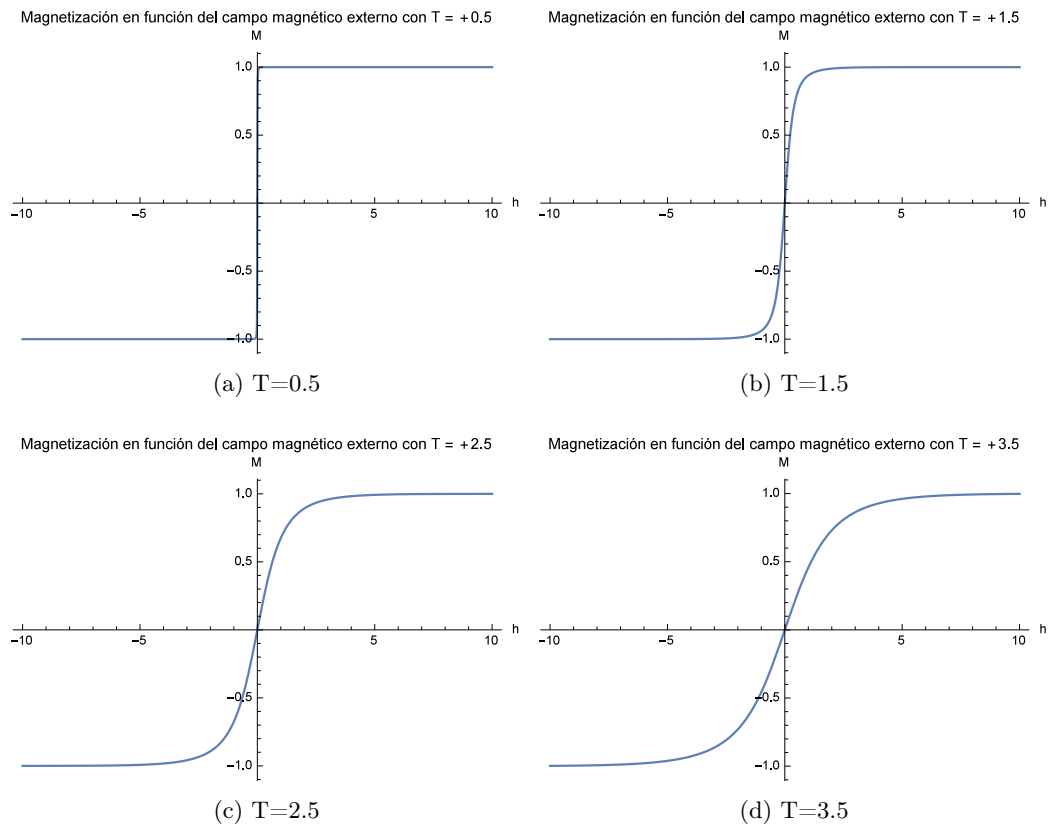


Figura 4.5: Gráfica de magnetización en función del campo magnético externo de una cadena en el modelo de Ising para el sitio más cercano con condiciones de frontera periódicas tomando  $J = k_b = 1$ .

Fuente: Elaboración propia



# 5 Modelo de seis vértices

En esta sección se estudia un modelo de mecánica estadística para una red cristalina. Se estudian las transiciones de fase ferroeléctricas para un modelo clásico al cuál se le encontrará una analogía cuántica posteriormente. Para ello se estudia primero la matriz de transferencia del modelo, que luego se comparará con el hamiltoniano del modelo de Heisenberg XXZ.

## 5.1. Introducción

En sistemas clásicos de muchas partículas, un modelo en dos dimensiones es el modelo de seis vértices o modelos tipo hielo. Este modelo toma en consideración una malla bidimensional con  $M$  sitios horizontales y  $N$  verticales, en la cual se cumplen condiciones de frontera periódicas en ambas direcciones.

En este capítulo se construye la matriz de transferencia  $\mathbf{T}$ ; similar al caso del modelo de Ising clásico. Asimismo, se demuestra como actúa esta matriz sobre la malla.

De manera general, si se conoce la matriz de transferencia para un modelo dado, la función de partición se puede expresar en términos de ésta,

$$Z = \text{Tr } \mathbf{T}^M, \tag{5.1}$$

por lo que basta con estudiar la matriz de transferencia para encontrar propiedades físicas del sistema. (Franchini, 2017)

En este caso en particular, la construcción de la matriz de transferencia se realiza con la intención de estudiar condiciones en las cuales dos matrices de transferencia con diferentes parámetros conmuten.

## 5.2. Modelos tipo hielo

Como su nombre lo indica, los modelos tipo hielo son modelos que describen sistemas similares a cristales formados por átomos de oxígeno y átomos de hidrógeno, donde cada átomo de oxígeno

forma enlaces iónicos con cuatro átomos de hidrógeno. Esta configuración es válida si dos átomos de hidrógeno están cerca del oxígeno y otros dos más alejados. (Baxter, 1989)

El sistema se modela como una malla bidimensional, donde cada sitio es ocupado por un átomo de oxígeno, y cada unión con un átomo de hidrógeno se representa con una flecha entrando o saliendo del vértice indicando si el átomo de hidrógeno esta cercano o lejano del átomo de oxígeno, respectivamente. De esta forma, cada unión representa un dipolo eléctrico que puede asumir dos valores  $(+, -)$ . Con esta consideración, para que el modelo sea válido es necesario que dos flechas apunten en dirección hacia el vértice y dos flechas saliendo de éste. Esta restricción limita el número de posibles configuraciones a seis, como se muestra en la figura (5.1). Finalmente, se pide que el sistema satisfaga condiciones de frontera periódicas. Esto para mayor facilidad de encontrar soluciones analíticas aprovechando la simetría del sistema. (Franchini, 2017)

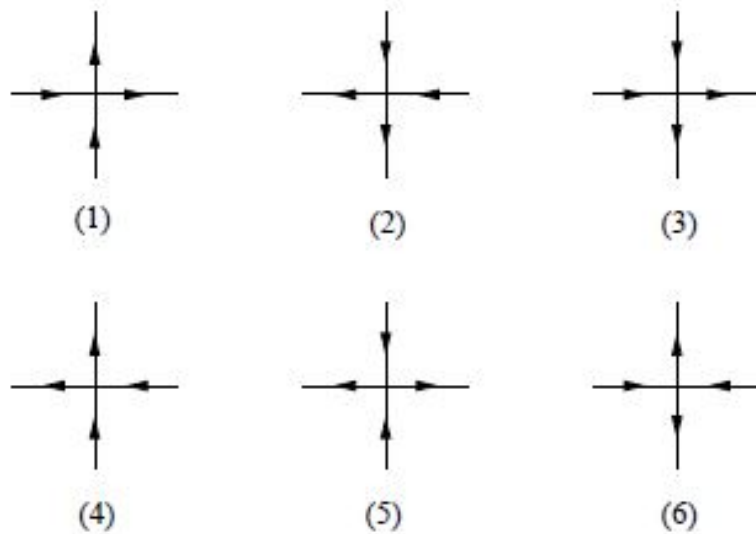


Figura 5.1: Representación de las configuraciones permitidas en el modelo de seis vértices.

Fuente: Franchini, 2011

El modelo de seis vértices se define por los factores de Boltzmann asignados a cada vertice

$$\omega_j = e^{-\beta\epsilon_j}, \quad j = 1, \dots, 6, \quad (5.2)$$

donde  $\beta = 1/k_B T$ .

La función de partición está dada por la suma sobre las posibles configuraciones del sistema

$$Z = \sum_{\{n_l\}} e^{-\beta \sum_i n_i \epsilon_i}, \quad (5.3)$$

donde  $\{n_l\}$  es la cantidad de vértices de tipo  $l$  en el sistema. (Franchini, 2017)

El modelo se puede simplificar si se toman en consideración algunas condiciones propias del sistema. Por las condiciones de frontera, hay tantas fuentes como sumideros. Es decir, el sistema tiene la misma cantidad de vértices tipo (5) que vértices tipo (6). Asimismo, se supone que el sistema es invariante al invertir simultáneamente todas las flechas. De esta forma  $n_1 = n_2$ ,  $n_3 = n_4$  y  $n_5 = n_6$ . Por otro lado, lo esperado al no tener un campo magnético es  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_a$ ,  $\epsilon_3 = \epsilon_4 = \epsilon_b$  y  $\epsilon_5 = \epsilon_6 = \epsilon_c$ ; por lo que la función de partición se reduce a

$$Z = \sum_{\{n_l\}} e^{-2\beta(n_1 \epsilon_a + n_3 \epsilon_b + n_5 \epsilon_c)}. \quad (5.4)$$

(Franchini, 2017)

Si la malla tiene  $M$  filas y  $N$  columnas, se escribe la función de partición como la suma de la contribución de las  $M$  filas

$$Z = \sum_{r=1}^M \sum_{\{m_l^r\}} a^{m_1+m_2} b^{m_3+m_4} c^{m_5+m_6}, \quad (5.5)$$

donde  $\{m_l^r\}$  es el número de vértices de tipo  $l$  en la fila  $r$ ; y los parámetros  $a, b, c$  son los pesos de Boltzmann en el caso de un campo magnético nulo

$$a \equiv \omega_1 = \omega_2, \quad b \equiv \omega_3 = \omega_4, \quad c \equiv \omega_5 = \omega_6. \quad (5.6)$$

Ahora, la contribución de cada fila, tomando en cuenta la configuración de cada vértice, se denota como

$$\{\gamma^r\} = \{\gamma_1^r, \gamma_2^r, \dots, \gamma_N^r\}, \quad (5.7)$$

donde  $\gamma_i^r$  es la contribución del  $i$ -ésimo vértice en la fila  $r$ . Como cada flecha puede asumir dos valores  $(+, -)$ , para cada fila se tienen  $2^N$  posibles configuraciones generadas por  $\{\gamma^r\}$ . (Franchini, 2017)

Con ello, se tiene que la función de partición se puede expresar en términos de la matriz de transferencia  $\mathbf{T}_{\gamma^j}^{\gamma^{j+1}}$  como

$$Z = \sum_{\gamma^1} \sum_{\gamma^2} \dots \sum_{\gamma^M} \mathbf{T}_{\gamma^1}^{\gamma^2} \mathbf{T}_{\gamma^2}^{\gamma^3} \dots \mathbf{T}_{\gamma^{M-1}}^{\gamma^M} \mathbf{T}_{\gamma^M}^{\gamma^1} \quad (5.8)$$

$$Z = \text{tr}(\mathbf{T})^M.$$

Aquí,  $\mathbf{T}$  es una matriz  $2^N \times 2^N$  cuyos elementos son

$$\mathbf{T}_{\gamma}^{\gamma'} = \langle \gamma | \mathbf{T} | \gamma' \rangle = \sum a^{m_1+m_2} b^{m_3+m_4} c^{m_5+m_6}. \quad (5.9)$$

La suma es sobre todas las posibles configuraciones de flechas horizontales en las  $N$  fronteras de la fila. (Vijay, 2014)

### 5.3. Matriz de transferencia

Se considera ahora una configuración donde las flechas debajo de una fila son dadas por  $\gamma = \{\gamma_1, \dots, \gamma_N\}$ , y las flechas arriba de la fila por  $\gamma' = \{\gamma'_1, \dots, \gamma'_N\}$ . Una flecha hacia arriba se denota con  $\gamma_i = +1$  y una flecha hacia abajo como  $\gamma_i = -1$ . Asimismo, las flechas horizontales se denotan con  $\alpha = \{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}$ , donde  $\alpha_i = +1$  corresponde a la flecha apuntando hacia la derecha. De esta forma, cada flecha se refiere a variables de espín arriba o espín abajo dependiendo del signo asignado. (Franchini, 2017)

Con esta notación, la matriz de transferencia se puede construir a partir del operador de transferencia para un solo vértice. Dicho operador se puede representar como una matriz  $4 \times 4$ , cuyas entradas están dadas por los pesos de Boltzman. Este operador satisface las condiciones

$$\mathcal{L}_{+++}^{+++} = \mathcal{L}_{--}^{--} = a \quad (5.10)$$

$$\mathcal{L}_{+-}^{+-} = \mathcal{L}_{-+}^{-+} = b \quad (5.11)$$

$$\mathcal{L}_{+-}^{-+} = \mathcal{L}_{-+}^{+-} = c. \quad (5.12)$$

donde los pesos de Boltzmann  $a, b, c$  son los pesos probabilísticos de cada configuración del vértice. (Franchini, 2017)

De esta forma, es posible escribir el operador  $\mathcal{L}$  en su representación matricial como

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & b & 0 \\ 0 & b & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Esta matriz, a su vez, se puede representar en función de los operadores de Pauli y los operadores escalera.

$$\mathcal{L}_{i,i+1} = \frac{a}{2}(1 + \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z) + \frac{b}{2}(1 - \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z) + c(\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+), \quad (5.14)$$

donde los subíndices indican la posición del vértice en el que actúa el operador. (Fendley, 2018)

Con esta definición, la matriz de transferencia es una multiplicación de operadores  $\mathcal{L}_{i,i+1}$ .

$$\mathbf{T}(\text{abierto}) = (\mathcal{L}_{1,2} \mathcal{L}_{2,3} \cdots \mathcal{L}_{N,N+1})_{ab}. \quad (5.15)$$

Donde se ha dejado abierto las condiciones de frontera  $ab$ ; con  $a, b$  el estado final del espín izquierdo y derecho respectivamente.

Imponiendo las condiciones de frontera periódicas

$$\mathbf{T}_\gamma^{\gamma'} = \sum_{\alpha_1} \cdots \sum_{\alpha_N} \mathcal{L}_{\alpha_1 \gamma_1}^{\alpha_2 \gamma'_1} \mathcal{L}_{\alpha_2 \gamma_2}^{\alpha_3 \gamma'_2} \cdots \mathcal{L}_{\alpha_N \gamma_N}^{\alpha_1 \gamma'_N}. \quad (5.16)$$

Lo cual es equivalente a calcular la traza parcial sobre el espacio  $\alpha$ ,

$$\mathbf{T} = \text{Tr}(\mathcal{L}_{1,2} \mathcal{L}_{2,3} \mathcal{L}_{3,4} \cdots \mathcal{L}_{N,N+1}). \quad (5.17)$$

(Rodríguez-Plaza, 2005)

A partir de la definición de la matriz de transferencia (5.16), se busca encontrar las condiciones en las cuales la matriz de transferencia conmuta con otra con diferentes parámetros. Para ello se introduce una segunda matriz de transferencia  $\mathbf{T}'$  con pesos de Boltzman  $a', b', c'$  definida como en (5.16) pero con variables de espín horizontales diferentes,  $\beta_i$ .

De esta forma,

$$(\mathbf{T}\mathbf{T}')^{\gamma'} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \prod_{j=1}^N \mathcal{S}_{\alpha_j \beta_j | \gamma_j}^{\alpha_{j+1} \beta_{j+1} | \gamma'_j}, \quad (5.18)$$

donde

$$\mathcal{S}_{\alpha\beta|\gamma}^{\alpha'\beta'|\gamma'} \equiv \sum_{\gamma''} \mathcal{L}_{\alpha\gamma}^{\alpha'\gamma''} \mathcal{L}_{\beta\gamma''}^{\beta'\gamma'}, \quad (5.19)$$

es el operador que propaga la información por dos filas con diferentes factores de Boltzman. (Franchini, 2017)

Si se fijan los índices verticales, se obtiene una matriz  $4 \times 4$  con  $\gamma, \gamma'$  como variables,

$$\mathcal{S}_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'}(\gamma, \gamma') = \mathcal{S}_{\alpha\beta|\gamma}^{\alpha'\beta'|\gamma'}. \quad (5.20)$$

De esta forma, la suma en el producto de las matrices de transferencia es la traza del producto de las matrices  $\mathcal{S}$

$$(\mathbf{T}\mathbf{T}')^{\gamma'} = \text{tr}(\mathcal{S}(\gamma_1, \gamma'_1) \mathcal{S}(\gamma_2, \gamma'_2) \dots \mathcal{S}(\gamma_N, \gamma'_N)). \quad (5.21)$$

De la misma manera, es posible expresar el producto permutando las matrices

$$(\mathbf{T}'\mathbf{T})^{\gamma'} = \text{tr}\{\mathcal{S}'(\gamma_1, \gamma'_1) \mathcal{S}'(\gamma_2, \gamma'_2) \dots \mathcal{S}'(\gamma_N, \gamma'_N)\}, \quad (5.22)$$

donde

$$\mathcal{S}'_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'}(\gamma, \gamma') = \sum_{\gamma''} \mathcal{L}'_{\alpha\gamma}^{\alpha'\gamma''} \mathcal{L}'_{\beta\gamma''}^{\beta'\gamma'}. \quad (5.23)$$

Una condición suficiente para que las matrices de transferencia conmuten es que exista una matriz  $\mathcal{R}$  invertible tal que

$$\mathcal{S}(\gamma, \gamma') = \mathcal{R} \mathcal{S}'(\gamma, \gamma') \mathcal{R}^{-1}. \quad (5.24)$$

(Franchini, 2017)

En efecto, sustituyendo esta relación en la ecuación (5.21) se tiene que

$$\begin{aligned}
(\mathbf{T}'\mathbf{T}')_{\gamma'} &= \text{tr}\{\mathcal{S}(\gamma_1, \gamma'_1)\mathcal{S}(\gamma_2, \gamma'_2)\dots\mathcal{S}(\gamma_N, \gamma'_N)\} \\
&= \text{tr}\{\mathcal{R}\mathcal{S}(\gamma_1, \gamma'_1)\mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}\mathcal{S}(\gamma_2, \gamma'_2)\mathcal{R}^{-1}\dots\mathcal{R}\mathcal{S}(\gamma_N, \gamma'_N)\mathcal{R}^{-1}\} \\
&= \text{tr}\{\mathcal{S}'(\gamma_1, \gamma'_1)\mathcal{S}'(\gamma_2, \gamma'_2)\dots\mathcal{S}'(\gamma_N, \gamma'_N)\} \\
&= (\mathbf{T}'\mathbf{T}')_{\gamma'}.
\end{aligned} \tag{5.25}$$

La condición de la existencia de la matriz  $\mathcal{R}$  escrita de forma explicita es

$$\sum_{\alpha'', \beta'', \gamma''} \mathcal{L}_{\alpha\gamma}^{\alpha''\gamma''} \mathcal{L}_{\beta\gamma''}^{\beta''\gamma'} \mathcal{R}_{\alpha''\beta''}^{\alpha'\beta'} = \sum_{\alpha'', \beta'', \gamma''} \mathcal{R}_{\alpha\beta}^{\alpha''\beta''} \mathcal{L}_{\alpha''\gamma}^{\alpha'\gamma''} \mathcal{L}_{\beta''\gamma''}^{\beta'\gamma'}. \tag{5.26}$$

Ésta es la ecuación de Yang-Baxter para las matrices  $\mathcal{L}$ . En este caso, la matriz  $\mathcal{R}$  actúa como una conexión entre las matrices  $\mathcal{L}$  y los espines horizontales. (Perk y Au-Yang, 2006)

Tomando en cuenta todas las combinaciones posibles de las variables de espín, la ecuación (5.26) genera un sistema de 64 ecuaciones. Para encontrar las soluciones al sistema de ecuaciones, se supone  $a, b, c$  dados y se buscan condiciones en las cuales  $a', b', c'$  y  $a'', b'', c''$  satisfagan la ecuación de Yang-Baxter para las matrices  $\mathcal{L}$ .

Al buscar soluciones a la ecuación, se observa que  $\mathcal{L} = 0$  al menos que  $\alpha + \gamma = \alpha' + \gamma'$ . Esto significa que ambos lados de la ecuación (5.26) no se anulan cuando  $\alpha + \beta + \gamma = \alpha' + \beta' + \gamma'$ ; con lo cual el sistema se reduce a 20 ecuaciones no triviales.

Asimismo, como se espera que, a falta de campo magnético, los pesos de Boltzman sean iguales al negar todos los espines, se obtienen 10 pares de ecuaciones iguales.

Finalmente, la simetría de la ecuación (5.26) al revertir los espines deja tres ecuaciones. (Franchini, 2017)

$$ac'a'' = bc'c'' + ca'b'' \tag{5.27}$$

$$ab'b'' = ba'b'' + cc'c'' \tag{5.28}$$

$$cb'a'' = ca'c'' + bc'b''. \tag{5.29}$$

Para comprobar matemáticamente estas condiciones se realizó un código en el programa *Mathematica*. En este código se obtienen las 64 ecuaciones resultantes de la ecuación de Yang-Baxter y se simplifica hasta obtener las 3 ecuaciones esperadas.

Con estas tres ecuaciones se puede simplificar de forma que

$$ac''a'' - bc'c'' + ca'b'' = 0 \quad (5.30)$$

$$cc'c'' - (ab' - ba')b'' = 0 \quad (5.31)$$

$$cb'a'' - ca'c'' - bc'b'' = 0. \quad (5.32)$$

O de forma matricial,

$$\begin{pmatrix} ac' & -ca' & -bc' \\ 0 & ab' - ba' & -cc' \\ cb' & -bc' & -ca' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a'' \\ b'' \\ c'' \end{pmatrix} = 0. \quad (5.33)$$

Al resolver el sistema de ecuaciones se desea que no existan soluciones triviales, para ello el determinante de la matriz debe ser igual a cero,

$$\det \begin{pmatrix} ac' & -ca' & -bc' \\ 0 & ab' - ba' & cc' \\ cb' & -bc' & -ca' \end{pmatrix} = 0, \quad (5.34)$$

es decir

$$cc'(-a^2a'b' + a'b'(-b^2 + c^2) + ab(a'^2 + b'^2 - c'^2)) = 0 \quad (5.35)$$

$$ab(a'^2 + b'^2 - c'^2) = a'b'(a^2 + b^2 - c^2) \quad (5.36)$$

$$\frac{a^2 + b^2 - c^2}{ab} = \frac{a'^2 + b'^2 - c'^2}{a'b'}. \quad (5.37)$$

De esta forma, se observa que se puede asociar una cantidad constante a las matrices  $\mathcal{L}$ ,

$$\Delta_{6V} = \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab}. \quad (5.38)$$

Con esta constante asociada, se busca una parametrización para los pesos de tal forma que se siga satisfaciendo la ecuación (5.37). Franchini (2017) propone

$$a = a \quad b = ax \quad c = a\sqrt{1 - 2\Delta_{6V}x + x^2}. \quad (5.39)$$

Con esta parametrización se pierde información de  $c$  debido a la raíz cuadrada; sin embargo, al introducir otro parámetro  $t$  se resuelve el problema,

$$t = \sqrt{\frac{x - x_1}{x - x_2}}, \quad (5.40)$$

donde  $x_1, x_2$  son los ceros de  $c$ , es decir

$$\Delta_{6V} = \frac{1}{2}(x_1 + x_2) \quad x_2 = \frac{1}{x_1}. \quad (5.41)$$

Despejando para  $x$ , se obtiene que

$$x = \frac{x_1 - t^2 x_2}{1 - t^2}, \quad (5.42)$$

del tal forma que,

$$\sqrt{1 - 2\Delta_{6V}x + x^2} = (x_1 - x_2) \frac{1}{1 - t^2}. \quad (5.43)$$

Por lo que la parametrización antes propuesta resulta ser

$$a = a \quad b = \frac{a(x_1^2 - t^2)}{x_1(1 - t^2)} \quad c = \frac{a}{x_1^2}(x_1^2 - 1) \frac{t}{1 - t^2}. \quad (5.44)$$

Sin embargo, es factible cambiar variables y utilizar parámetros en términos de funciones hiperbólicas, si

$$x_1 = e^\phi \quad t = e^{\lambda + \phi} \quad \Lambda = \cosh \phi. \quad (5.45)$$

(Franchini, 2017)

De esta parametrización se observa que se tiene una normalización sobre el factor  $a$ . De esta forma, se reescriben los parámetros quitando el denominador

$$a = \rho \sinh(\lambda + \phi) \quad b = \rho \sinh \lambda \quad c = \rho \sinh \phi. \quad (5.46)$$

Debido a que no se alteró la estructura de la matriz, esta parametrización satisface la condición (5.37) y las matrices de transferencia bajo ésta condición conmutan.

Asimismo,  $\rho$  es una constante de normalización y se asume que  $\phi$  es constante para todas las matrices  $\mathcal{L}$ . Por lo que el factor que determina la conmutatividad de las matrices es el parámetro  $\lambda$ . De esta forma, las matrices que conmutan con un mismo  $\lambda$  pertenece a una misma familia denotada como  $\mathbf{T}(\lambda)$ . (Franchini, 2017)

Por otro lado, se definió a la matriz  $\mathcal{R}$  de la misma forma que las matrices  $\mathcal{L}$ , por lo que la parametrización propuesta también es válida para estos operadores.

Asimismo, de las ecuaciones de Yang-Baxter (5.29) y la parametrización propuesta, la tercera condición implica

$$\lambda'' = \lambda' - \lambda. \quad (5.47)$$

Lo que significa que se tiene una familia de matrices que satisfacen las ecuaciones de Yang-Baxter,

$$\mathcal{L}_n(\lambda)\mathcal{L}_n(\lambda')\mathcal{R}(\lambda' - \lambda) = \mathcal{R}(\lambda' - \lambda)\mathcal{L}_n(\lambda')\mathcal{L}_n(\lambda), \quad (5.48)$$

donde  $n$  es el sitio en la fila en la que actúa la matriz. (Franchini, 2017)

Por otro lado, se define la matriz de monodromía  $\mathcal{T}_j(\lambda)$  como el operador que actúa sobre la fila  $j$ ,

$$\mathcal{T}_j(\lambda) = \mathcal{L}_N\mathcal{L}_{N-1}\dots\mathcal{L}_1. \quad (5.49)$$

Esta matriz tiene un grado de libertad más que la matriz de transferencia debido a que no tiene condiciones de frontera.

Si se consideran dos matrices de monodromía, como se define anteriormente, actuando sobre diferentes filas y con parámetros espectrales  $(\lambda)$ , se tiene

$$\mathcal{T}_j(\lambda)\mathcal{T}_i(\lambda')\mathcal{R}_{jl}(\lambda' - \lambda) = \mathcal{R}_{jl}(\lambda' - \lambda)\mathcal{T}_i(\lambda')\mathcal{T}_j(\lambda), \quad (5.50)$$

la ecuación de Yang-Baxter para matrices de monodromía. (Franchini, 2017)

Al imponer las condiciones de frontera periódicas, se recupera la matriz de transferencia. Es decir,  $tr(\mathcal{T}_j(\lambda)) = \mathbf{T}_j(\lambda)$ , por lo tanto las matrices de transferencia con distintos parámetros espectrales conmutan, i.e,  $[\mathbf{T}_j(\lambda), \mathbf{T}_l(\lambda')] = 0$ .

La conmutatividad de las matrices de transferencia con distintos parámetros espectrales implica existe una base de autovectores para cualquier parámetro  $\lambda$ . (Fendley, 2018)

Para ver la acción de la matriz de transferencia se considera  $\lambda = 0$ . De la definición de la matriz  $\mathcal{L}$  y la parametrización (5.46),

$$\mathcal{L}_{\alpha\gamma}^{\alpha'\gamma'}(\lambda = 0) = \rho \sinh \phi \delta_{\alpha\gamma'} \delta_{\alpha'\gamma}. \quad (5.51)$$

Este resultado significa que el operador  $\mathcal{L}$  cambia el estado entrante de un espín horizontal hacia el estado saliente de un espín vertical, así como también cambia el estado entrante de un espín vertical hacia el estado saliente de un espín horizontal. Al actuar sucesivamente este operador sobre el sistema  $N$  veces, se cambia un estado entrante de una columna a un estado saliente en la columna siguiente. Finalmente, al imponer las condiciones de frontera periódicas, el resultado es que la columna sobre la que actúo la matriz de transferencia es movida un sitio.

$$\mathbf{T}(0) = \rho^N \sinh^N \phi e^{i\hat{P}}, \quad (5.52)$$

donde  $\hat{P}$  es el operador de momento en la malla. (Franchini, 2017)

## 5.4. Fases ferroeléctricas

En el análisis de la matriz de transferencia del modelo de seis vértices se encontró una constante  $\Delta_{6V}$  como condición para que dos matrices de transferencia definidas con distintos pesos de Boltzman conmuten, ecuación (5.38). En esta sección se clasifican las fases del sistema en función de esta constante.

### 5.4.1. Fase ferroelectrica: $\Delta_{6V} > 1$

En esta fase hay que considerar dos casos: cuando  $a > b + c$ , y  $b > a + c$ .

#### 5.4.1.1. Caso $a > b + c$

Esta condición, en términos de las energías de cada vértice, es  $\epsilon_1 < \epsilon_3, \epsilon_5$ . De esta forma, en esta fase, el estado con menor energía es aquel en el cual todos los vértices son de tipo 1 o todos de tipo 2. Es decir, todas las flechas apuntan hacia arriba y hacia la derecha o todas las flechas apuntan hacia abajo y hacia la izquierda. (Syljuasen y Zvonarev, 2018)

#### 5.4.1.2. Caso $b > a + c$

Aquí  $\epsilon_3 < \epsilon_1, \epsilon_5$ , por lo que el estado con menor energía se logra al tener todos los vértices de tipo 3 o de tipo 4. Se tiene un orden ferroeléctrico ya que todas las flechas apuntan hacia arriba y hacia la izquierda o hacia abajo y hacia la derecha. (Syljuasen y Zvonarev, 2018)

#### 5.4.2. Fase desordenada: $-1 < \Delta_{6V} < 1$

En términos de los pesos de Boltzman,  $a, b, c < \frac{1}{2}(a + b + c)$ . Con estos valores, el sistema tiene una fase desordenada; es decir, los vértices en la malla pueden ser de cualquier tipo de las configuraciones permitidas. (Baxter, 1989)

Esta región en el espacio de fase incluye el caso  $a = b = c = 1$ . Con estos valores de los pesos de Boltzman, la temperatura debe ser infinita.

#### 5.4.3. Fase anti-ferroeléctrica: $\Delta_{6V} < -1$

Equivalentemente, el sistema pasa por esta fase anti-ferroeléctrica cuando  $c > a + b$ , lo cual significa que la energía  $\epsilon_5 < \epsilon_1, \epsilon_3$ . En este caso, los vértices dominantes serían los vértices tipo 5 o tipo 6. Sin embargo, una configuración con sólo estos vértices no cumple con las condiciones impuestas de la regla del hielo. Es por ello que el estado con menor energía se logra con un ordenamiento como el de la figura (5.2), en donde las flechas de cada fila alternan entre espín arriba y espín abajo; lo mismo sucede con las flechas de cada columna, siendo este el orden que permite la mayor cantidad de vértices de tipo 5 o de tipo 6. (Syljuasen y Zvonarev, 2018)

Por último, se realiza el diagrama de fase para el modelo de seis vértices como en la figura (5.3). En este diagrama se muestran las fases ferroeléctricas del sistema en función de los pesos de Boltzman.

Sin embargo, para tener un punto de comparación con el diagrama de fase del modelo de Heisenberg XXZ, se realiza un diagrama de fase mostrando las mismas regiones que en el diagrama anterior, pero con el parámetro  $\Delta_{6VM}$ . En este diagrama se observa de mejor manera las transiciones de fase al variar la constante  $\Delta_{6VM}$ .

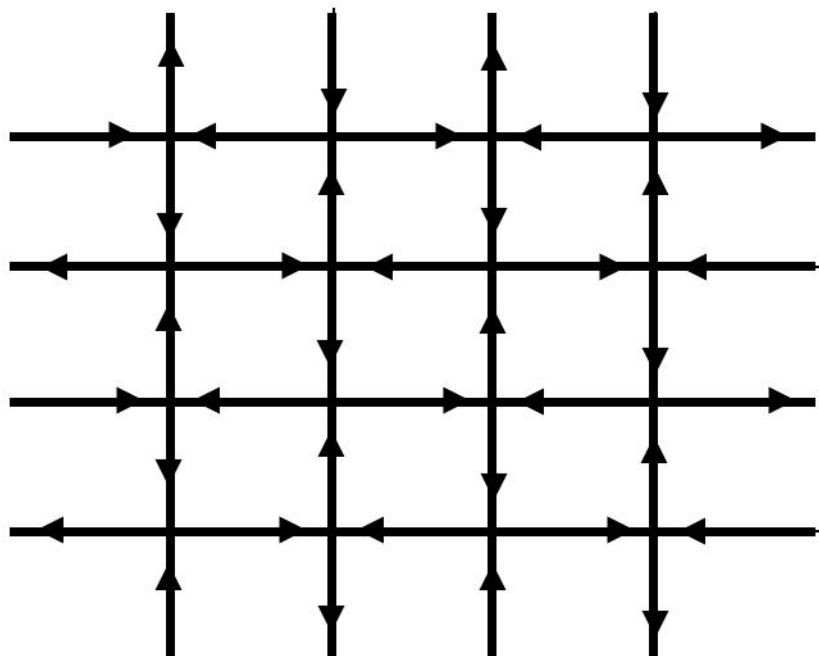


Figura 5.2: Orden anti-ferroeléctrico del modelo de seis vértices.

Fuente: Elaboración propia

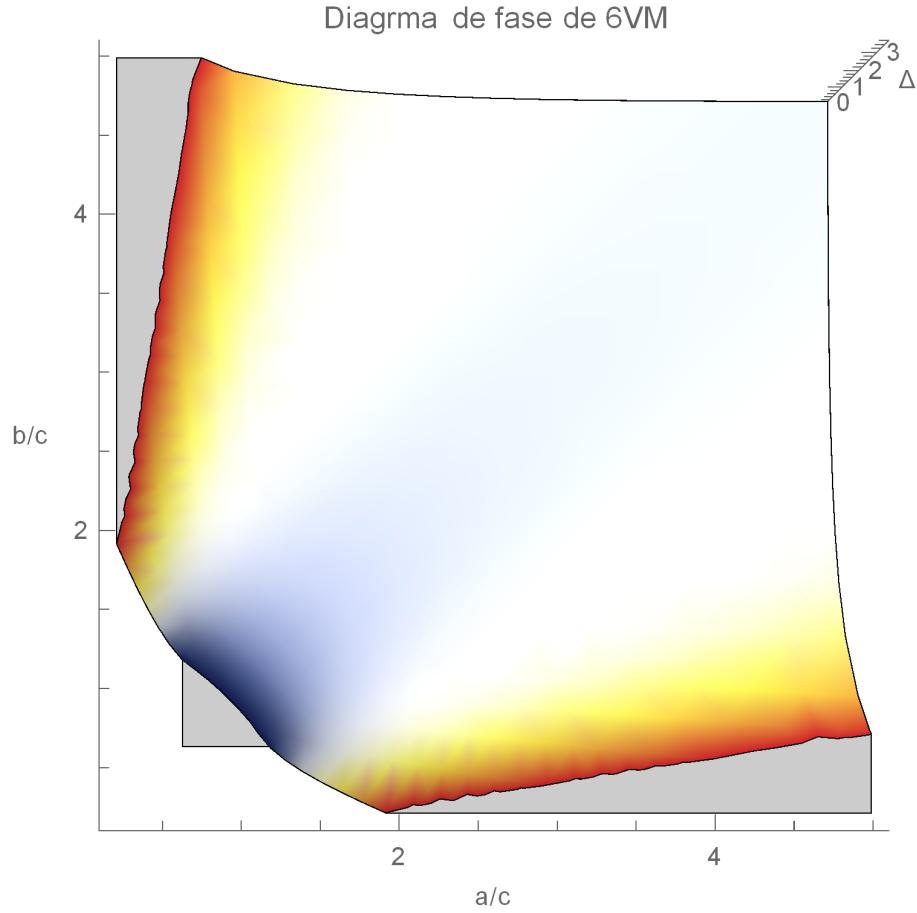


Figura 5.3: Diagrama de fase para el modelo de seis vértices en función de los pesos de Boltzman. La región blanca representa la fase desordenada del modelo; la región roja y amarilla, indica que el modelo pasa por una fase ferroeléctrica ordenada; y, la región azul, muestra los valores en los cuales el sistema tiene una fase anti-ferroeléctrica.

Fuente: Elaboración propia

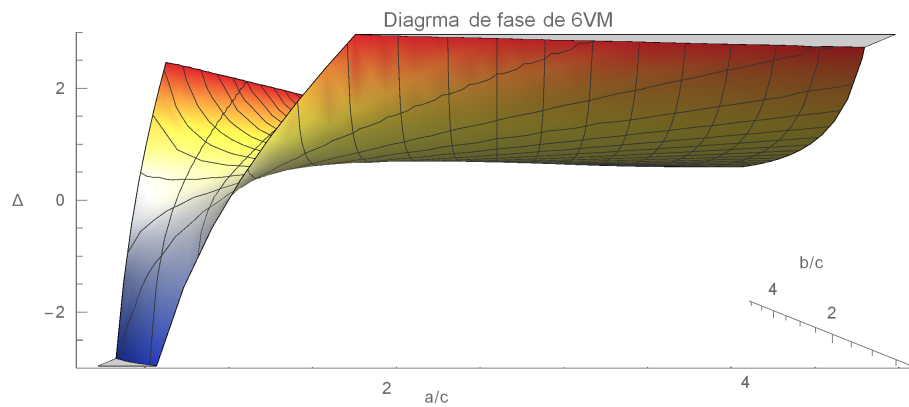


Figura 5.4: Diagrama de fase del modelo de seis vértices con el parámetro  $\Delta_{6VM}$ .

Fuente: Elaboración propia

# 6 Modelo de Heisenberg

Ahora se estudiará un modelo cuántico magnético al que se le encontrará una analogía clásica desde las propiedades eléctricas de otros materiales. Para llegar a esa analogía, se estudiarán las transiciones de fase de este modelo para luego poder comparar con el modelo clásico.

## 6.1. Introducción

Similar al modelo de Ising, la cadena de Heisenberg estudia el acoplamiento de dipolos magnéticos, los cuales pueden causar cambios de energía en los dipolos cercanos. La diferencia con el modelo de Ising radica en el uso de operadores en el hamiltoniano, no números como en el caso anterior. Este modelo toma en cuenta la interacción cuántica de partículas con espín  $1/2$  con su vecino más cercano en una rejilla. En el caso particular de una dimensión, una cadena con  $n = 1, 2, \dots, N$  sitios con un dipolo en cada posición. (Franchini, 2017)

Para un sistema homogéneo, la forma más general del hamiltoniano se escribe como

$$H = - \sum_{n=1}^N [J_x S_n^x S_{n+1}^x + J_y S_n^y S_{n+1}^y + J_z S_n^z S_{n+1}^z] \quad (6.1)$$

donde  $J_x$ ,  $J_y$  y  $J_z$  son constantes de acoplamiento y  $S_n^\alpha = \frac{1}{2}\sigma_n^\alpha$ , siendo  $\sigma_i^\alpha$  los operadores de Pauli actuando en el espacio  $i$ , y  $\alpha = x, y, z$  los ejes coordenados del espacio euclidiano en tres dimensiones. El modelo cumple con condiciones de frontera periódicas, es decir  $\sigma_{n+j} = \sigma_j$ , donde  $\sigma_i$  es el espín en la posición  $i$  de la cadena. De esta forma, el sistema es invariante ante traslaciones. Además, como cada vértice tiene dos posibles valores de espín, el hamiltoniano  $H$  actúa en el espacio de Hilbert de dimensión  $2^N$  generado por la base  $|\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle$ , donde  $\sigma_n = \uparrow$  representa un espín arriba y  $\sigma_n = \downarrow$  un espín abajo en la posición  $n$ . (Franchini, 2011)

Para el modelo de Heisenberg existen tres posibles constantes de acoplamiento:

- $J_x = J_y = J_z$ : XXX
- $J_x = J_y \neq J_z$ : XXZ
- $J_x \neq J_y \neq J_z$ : XYZ

Se trabajará el modelo XXX como parte introductoria al Ansatz de Bethe con el objetivo de generalizar el problema en el modelo XXZ.

## 6.2. Modelo XXX

El hamiltoniano para el modelo XXX es

$$\begin{aligned}
H &= -J \sum_{n=1}^N [S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + S_n^z S_{n+1}^z] \\
&= -J \sum_{n=1}^N \left[ \frac{1}{2} (2S_n^x S_{n+1}^x + 2S_n^y S_{n+1}^y + iS_n^x S_{n+1}^y - iS_n^x S_{n+1}^y + iS_n^y S_{n+1}^x - S_n^y S_{n+1}^x) + S_n^z S_{n+1}^z \right] \\
H &= -J \sum_{n=1}^N \left[ \frac{1}{2} [(S_n^x - iS_n^y)(S_{n+1}^x + iS_{n+1}^y) + (S_n^x + iS_n^y)(S_{n+1}^x - iS_{n+1}^y)] + S_n^z S_{n+1}^z \right].
\end{aligned} \tag{6.2}$$

Definiendo operadores escalera para espín,  $S_n^\pm \equiv S_n^x \pm iS_n^y$ , el hamiltoniano se reescribe como

$$H = -J \sum_{n=1}^N \left[ \frac{1}{2} (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) + S_n^z S_{n+1}^z \right]. \tag{6.3}$$

Con esta definición, y utilizando  $\hbar = 1$ , se tienen las relaciones de conmutación

$$\begin{aligned}
[\sigma_n^z, \sigma_{n'}^\pm] &= \sigma_n^z (\sigma_{n'}^x \pm i\sigma_{n'}^y) - (\sigma_{n'}^x \pm i\sigma_{n'}^y) \sigma_n^z \\
&= \sigma_n^z \sigma_{n'}^x \pm i\sigma_n^z \sigma_{n'}^y - \sigma_{n'}^x \sigma_n^z \mp i\sigma_{n'}^y \sigma_n^z \\
[\sigma_n^z, \sigma_{n'}^\pm] &= \pm 2\sigma_{n'}^x \delta_{nn'} + 2i\sigma_{n'}^y \delta_{nn'}.
\end{aligned} \tag{6.4}$$

y

$$\begin{aligned}
[\sigma_n^+, \sigma_{n'}^-] &= (\sigma_n^x + i\sigma_n^y)(\sigma_{n'}^x - i\sigma_{n'}^y) - (\sigma_{n'}^x - i\sigma_{n'}^y)(\sigma_n^x + i\sigma_n^y) \\
&= \sigma_n^x \sigma_{n'}^x - i\sigma_n^x \sigma_{n'}^y + i\sigma_n^y \sigma_{n'}^x + \sigma_n^y \sigma_{n'}^y - \sigma_{n'}^x \sigma_n^x - i\sigma_{n'}^x \sigma_n^y + i\sigma_{n'}^y \sigma_n^x - \sigma_{n'}^y \sigma_n^y \\
&= 2\sigma_n^z \delta_{nn'} + 2\sigma_n^z \delta_{nn'} \\
[\sigma_n^+, \sigma_{n'}^-] &= 4\sigma_n^z \delta_{nn'}.
\end{aligned} \tag{6.5}$$

La constante de acoplamiento  $J$  escala la energía, por lo que el hamiltoniano tiene los mismos autoestados independientemente de  $J$ . Sin embargo, al igual que en el modelo de Ising, el signo de  $J$  afecta la alineación de los dipolos.

- $J > 0$  favorece alineación ferromagnética
- $J < 0$  favorece una alineación antiferromagnética

Por otro lado, la componente en  $z$  del espín total  $S^z = \sum_{n=1}^N S_n^z$  se conserva ya que,

$$\begin{aligned}
[S^z, H] &= -J \sum_{n'=1}^N \sum_{n=1}^N \left[ S_{n'}^z, \frac{1}{2} (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) + S_n^z S_{n+1}^z \right] \\
&= -\frac{J}{2} \sum_{n'=1}^N \sum_{n=1}^N [S_{n'}^z, S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+] \\
&= -\frac{J}{2} \sum_{n'=1}^N \sum_{n=1}^N [S_{n'}^z, S_n^+] S_{n+1}^- + S_n^+ [S_{n'}^z, S_{n+1}^-] + [S_{n'}^z, S_n^-] S_{n+1}^+ + S_n^- [S_{n'}^z, S_{n+1}^+] \quad (6.6) \\
&= -\frac{J}{2} \sum_{n'=1}^N \sum_{n=1}^N [(S_{n'}^+ S_{n+1}^- - S_{n'}^- S_{n+1}^+) \delta_{n'n} + (S_n^- S_{n'}^+ - S_n^+ S_{n'}^-) \delta_{n'(n+1)}] \\
&= -\frac{J}{2} \sum_{n=1}^N [S_n^+ S_{n+1}^- - S_n^- S_{n+1}^+ + S_n^- S_{n+1}^+ - S_n^+ S_{n+1}^-] \\
[Sz, H] &= 0.
\end{aligned}$$

Como la magnetización se conserva, es posible separar la cadena en sectores con  $r$  espines volteados definidos por números cuánticos  $S^z = N/2 - r$ . (Franchini, 2011)

Teniendo estos subespacios definidos, se estudian casos para distintos  $r$  con el fin de entender la aplicación del Ansatz de Bethe en la cadena y, así desarrollar intuición y comprender la generalización para un  $r$  cualquiera.

### 6.2.1. Caso $r = 0$ y $r = 1$

El caso en el que todos los espines estén alineados en la misma dirección, el sistema es un único vector  $|0\rangle = |\uparrow, \dots, \uparrow\rangle$ . Este vector es un autoestado  $H|0\rangle = E_0|0\rangle$  con energía  $E_0 = -JN/2$ .

Por otra parte, el vector de la base para el subespacio con  $r = 1$  se denota con un espín abajo en la posición  $n$

$$|n\rangle = S_n^- |0\rangle. \quad (6.7)$$

Estos estados no son autoestados de  $H$ , pero se pueden construir  $N$  combinaciones lineales aprovechando la simetría de traslación del sistema. Estos vectores de la base se pueden construir como

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} |n\rangle, \quad (6.8)$$

donde  $k = 2\pi m/N$  son números de onda con  $m = 0, \dots, N - 1$ . Estos vectores  $|\psi\rangle$  son autoestados de  $H$  con autovalores

$$E - E_0 = 2J(1 - \cos k). \quad (6.9)$$

Los vectores  $|\psi\rangle$  representan las excitaciones de un magnón; es decir, la completa alineación del estado base ferromagnético  $|0\rangle$  es perturbada periódicamente por una "onda" de espín con longitud de onda  $\lambda = 2\pi/k$ . (Franchini, 2011)

De esta definición, si  $k = 0$  se tiene que  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N |n\rangle$  es un estado con autovalor

$$E_1 - E_0 = 2J(1 - \cos 0) = 0 \Rightarrow E_1 = E_0. \quad (6.10)$$

Este estado es degenerado con el autoestado  $|0\rangle$ .

### 6.2.2.Caso $r = 2$

Para el caso  $r = 2$ , se propone que un autoestado sea una resultado de una superposición de dos magnones

$$|\psi\rangle = \sum_{1 \leq n_1 \leq n_2 \leq N} f(n_1, n_2) |n_1, n_2\rangle \quad (6.11)$$

donde  $|n_1, n_2\rangle \equiv S_{n_1}^- S_{n_2}^- |0\rangle$  son los vectores base en el subespacio de dimensión  $N(N - 1)/2$ . (Franchini, 2011)

Al superponer ondas de espín, es necesario que dos espines volteados estén en sitios diferentes en la cadena. Con esto, la ecuación de autovalores se convierte en

$$2[E - E_0]f(n_1, n_2) = J[4f(n_1, n_2) - f(n_1 - 1, n_2) - f(n_1 + 1, n_2) - f(n_1, n_2 - 1) - f(n_1, n_2 + 1)], \quad n_2 > n_1 + 1, \quad (6.12)$$

y

$$2[E - E_0]f(n_1, n_2) = J[2f(n_1, n_2) - f(n_1 - 1, n_2) - f(n_1, n_2 + 1)], \quad n_2 = n_1 + 1. \quad (6.13)$$

La ecuación (6.12) se satisface con  $f(n_1, n_2)$  en forma de ondas planas como

$$f(n_1, n_2) = A \exp\{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)\} + A' \exp\{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)\}. \quad (6.14)$$

Con este Ansatz de Bethe preliminar, la energía es

$$E - E_0 = J \sum_{j=1,2} (1 - \cos k_j). \quad (6.15)$$

Ahora, si se restan las ecuaciones (6.13) y (6.12) con  $n_2 = n_1 + 1$  en (6.12)

$$\begin{aligned} 2f(n_1, n_2) - f(n_1 - 1, n_2) - f(n_1, n_2 + 1) &= 4f(n_1, n_2) - f(n_1 - 1, n_2) \\ &- f(n_2, n_2) - f(n_1, n_1) - f(n_1, n_2 + 1). \end{aligned} \quad (6.16)$$

Esto implica que

$$2f(n_1, n_1 + 1) = f(n_1, n_1) + f(n_1 + 1, n_1 + 1). \quad (6.17)$$

Con estas condiciones se encuentra una relación entre las amplitudes

$$\begin{aligned} 2 \left[ A e^{i[k_1 n_1 + k_2 (n_2 + 1)]} + A' e^{i[k_1 (n_2 + 1) + k_2 n_1]} \right] &= A e^{i[k_1 n_1 + k_2 n_2]} + A' e^{i[k_1 n_1 + k_2 n_1]} \\ &+ A e^{i[k_1 (n_1 + 1) + k_2 (n_2 + 1)]} + A' e^{i[k_1 (n_1 + 1) + k_2 (n_1 + 1)]}. \\ \Rightarrow A e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_1)} [2e^{ik_2} - 1 - e^{i(k_1 + k_2)}] &= A' e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_1)} [1 + e^{i(k_1 + k_2)} - 2e^{ik_1}] \\ \Rightarrow \frac{A}{A'} = e^{i\theta} = \frac{-e^{i(k_1 + k_2)} + 1 - 2e^{ik_1}}{e^{i(k_1 + k_2)} + 1 - 2e^{ik_2}}. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Esta relación se puede incorporar al Ansatz (6.14) como un factor extra

$$f(n_1, n_2) = e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2 + \frac{1}{2}\theta_{12})} + e^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1 + \frac{1}{2}\theta_{21})}, \quad (6.19)$$

donde  $\theta_{12} = -\theta_{21} \equiv \theta$  es el ángulo de desfase que depende de  $k_1, k_2$  por (6.18) o con

$$2 \cot \frac{\theta}{2} = \cot \frac{k_1}{2} - \cot \frac{k_2}{2}. \quad (6.20)$$

(Franchini, 2011)

Los momenta  $k_1, k_2$  del ansatz pueden ser determinados aprovechando la invarianza traslacional, es decir  $f(n_1, n_2) = f(n_2, n_1 + N)$ .

Esta condición se satisface si

$$e^{ik_1N} = e^{i\theta} \quad (6.21)$$

$$e^{ik_2N} = e^{-i\theta}, \quad (6.22)$$

lo cual equivale a

$$Nk_1 = 2\pi I_1 + \theta \quad (6.23)$$

$$Nk_2 = 2\pi I_2 - \theta, \quad (6.24)$$

donde  $I_j \in 1, \dots, N - 1$  son números cuánticos. (Samaj)

La interacción de los magnones se ve en el cambio de fase  $\theta$  y en la variación de los números de onda  $k_1$  y  $k_2$ . Esto se produce debido a que los magnones se dispersan no dependiendo unos de otros. (Franchini, 2011).

Ahora, si  $I_1 = 0$  entonces  $k_1 = 0$ ,  $\theta = 0$  y  $k_2 = 2\pi I_2/N$  con  $I_2 = 0, 1, \dots, N - 1$ . Estos estados son degenerados con el estado de un único magnon ( $K = k_2$ ) y les corresponde el mismo conjunto.

Si se considera que el momentum total del estado está cuantizado,  $K = 2\pi n/N$ , se puede determinar  $k_1$  y  $k_2$  para diferentes  $n$ . (Franchini, 2011).

El problema que se desea analizar es cuando  $N$  es muy grande. En este caso, los estados pueden ser estudiados como una simple superposición de dos magnones debido a que los cuasi-momenta difieren en

$$k_{1,2} = \frac{2\pi}{N} I_{1,2} + O\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (6.25)$$

Por lo que en el límite cuando  $N \rightarrow \infty$ , los autoestados del sistema están dados por

$$E - E_0 = 2J \left( 1 \pm \cos \frac{K}{2} \right). \quad (6.26)$$

### 6.3. Modelo XXZ

Al igual que en el modelo XXX, se estudian casos particulares con  $r$  espines volteados en el modelo XXZ para posteriormente entender claramente el efecto del Ansatz de Bethe de manera general.

Se define el hamiltoniano del modelo XXZ tomando en cuenta la interacción de los dipolos más cercanos y una constante de energía en el eje  $z$ ,  $J_z$ , diferente a las constantes de acoplamiento en el eje  $x$  y  $y$ . Es posible factorizar las constantes de acoplamiento, con lo que el hamiltoniano resultante es

$$H = -J \sum_{j=1}^N [S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z] - 2h \sum_{j=1}^N S_j^z, \quad (6.27)$$

donde  $\Delta = J_z/J$  es la anisotropía del modelo. Este sistema cumple con condiciones de frontera periódicas  $\sigma_{j+N}^\alpha = \sigma_j^\alpha$ , donde  $\sigma_j^\alpha$  se construyen a partir de las matrices de Pauli  $\sigma^\alpha$  como

$$\sigma_j^\alpha = 1 \otimes \dots \otimes 1 \otimes \sigma^\alpha \otimes 1 \otimes \dots \otimes 1, \quad (6.28)$$

donde  $\sigma^\alpha$  está en la posición  $j$ . (Samaj)

Del hamiltoniano,  $J$  escala la energía del sistema por lo que sólo el signo importa. Con  $J > 0$  la cadena tiene un orden ferromagnético, es decir, el estado con menor energía se obtiene al tener todos los espines de la cadena apuntando hacia el mismo sentido. Por el contrario, con  $J < 0$ , la alineación de los espines genera un orden antiferromagnético, los espines en la cadena intercalan valores. El parámetro  $\Delta$  establece la fuerza en el eje  $z$  con la cual el sistema se opone al campo magnético externo  $h$ . (Franchini, 2011)

Por otro lado, la magnetización total en el eje  $z$ ,  $S^z = \sum_j S_j^z$  se conserva. De esta forma, la magnetización máxima  $S^z = N/2$  se obtiene cuando todos los espines están alineados a la misma dirección. Asimismo, como  $[H, S^z] = 0$ , es posible dividir el espacio en sectores con magnetización  $S^z \equiv N/2 - r$  y considerar subespacios por separado. Donde  $r$  es la cantidad de espines volteados en la cadena. (Franchini, 2017)

#### 6.3.1. Caso $r = 0$ y $r = 1$

El espacio con  $r = 0$  tiene el vector  $|0\rangle$  con todos los espines hacia arriba como un autoestado del hamiltoniano. Actuando sobre el hamiltoniano  $H|0\rangle = E_0|0\rangle$  se obtiene la energía como

$$E_0 = -\left(\frac{J}{2}\Delta + h\right)N.$$

Con  $r = 1$  se propone el Anzats de Bethe como una ecuación de onda plana

$$f(n) = A \exp(ikn). \quad (6.29)$$

De tal forma que

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N A e^{ikn} |n\rangle \quad (6.30)$$

sea un autoestado del hamiltoniano. (Samaj)

El número de onda  $k$  está cuantizado y cumple con que  $f(n) = f(n + N)$ , entonces

$$e^{ikN} = 1. \quad (6.31)$$

Con esto se obtiene que la energía es

$$E = E_0 + 2(h + J\Delta) - 2J \cos k, \quad (6.32)$$

donde  $k = \frac{2\pi I}{N}$  es el número de onda del magnón que excita la cadena. (Franchini, 2011)

### 6.3.2. Caso $r = 2$

Cuando dos espines están volteados se tienen dos casos:

a )  $n_2 \neq n_1 + 1$ .

b )  $n_2 = n_1 + 1$ .

En el primer caso, los espines volteados no son vecinos próximos mientras en el segundo caso, sí lo son. En ambos casos se asume que  $n_1$  es menor que  $n_2$ .

En el primer caso, se tiene que

$$\begin{aligned} (E - E_0)f(n_1, n_2) = & J[4\Delta f(n_1, n_2) - f(n_1 - 1, n_2) \\ & - f(n_1 + 1, n_2) - f(n_1, n_2 - 1) \\ & - f(n_1, n_2 + 1)]. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Condición que se satisface con una función en forma de ondas planas

$$f(n_1, n_2) = A_{12}e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + A_{21}e^{i(k_2 n_1 + k_1 n_2)}. \quad (6.34)$$

Dando como solución a la ecuación de autovalores

$$E = E_0 + 2(2J\Delta + 2h) - 2J(\cos k_1 + \cos k_2). \quad (6.35)$$

(Samaj)

Por otro lado, en el segundo caso, cuando  $n_2 = n_1 + 1$

$$(E - E_0)f(n_1, n_2) = 2\Delta f(n_1, n_2) - f(n_1 - 1, n_2) - f(n_1, n_2 + 1). \quad (6.36)$$

En este caso el Ansatz propuesto no satisface con la condición anterior por lo que requiere de un trabajo más detallado.

Por eso, se desea encontrar una relación entre  $A_{12}$  y  $A_{21}$ . Para ello se toma  $n_1 = n_2 + 1$  en la definición de la ecuación (6.33). Al sustituir esta condición en la ecuación, se obtiene

$$\begin{aligned} (E - E_0)f(n_1, n_2) = & 4\Delta f(n_1, n_2) - f(n_1 - 1, n_2) \\ & - f(n_2, n_2) - f(n_1, n_1) - f(n_1, n_2 + 1). \end{aligned} \quad (6.37)$$

Por definición, las ecuaciones (6.33) y (6.37) son equivalentes por lo que se cumple que

$$f(n + 1, n + 1) - 2\Delta f(n, n + 1) + f(n, n) = 0. \quad (6.38)$$

Al sustituir la solución propuesta (6.34) en la esta ecuación se obtienen la siguiente relación

$$\frac{A_{12}}{A_{21}} = -\frac{e^{i(k_1 + k_2)} - 2\Delta e^{ik_1} + 1}{e^{i(k_1 + k_2)} - 2\Delta e^{ik_2} + 1} = e^{i\theta_{12}}. \quad (6.39)$$

(Samaj)

Es importante resaltar que el ángulo de fase es antisimétrico con respecto al cambio de índices,

$$\theta_{12} = -\theta_{21}. \quad (6.40)$$

Los números de onda  $k_1$  y  $k_2$  están cuantizados y cumplen con las condiciones de frontera  $f(n_1, n_2) = f(n_2, n_1 + N)$ , lo que implica que

$$\begin{aligned}
A_{12} &= A_{21}e^{ik_1N} \\
A_{21} &= A_{12}e^{ik_2N}.
\end{aligned}
\tag{6.41}$$

Estas relaciones pueden ser escritas en una forma más conveniente como

$$\begin{aligned}
Nk_1 &= 2\pi I_1 + \theta_{12} \\
Nk_2 &= 2\pi I_2 + \theta_{21}
\end{aligned}
\tag{6.42}$$

donde  $I_1$  e  $I_2$  son secuencias de  $N$  enteros consecutivos tal que  $k_1 \neq k_2$ . (Samaj)

### 6.3.3.Caso $r = 3$

Para el sector con tres espines volteados, es necesario considerar todas las posibles posiciones de cada espín, ordenados  $n_1 < n_2 < n_3$

- a )  $n_2 \neq n_1 + 1, n_3 \neq n_2 + 1.$
- b )  $n_2 = n_1 + 1, n_3 \neq n_2 + 1.$
- c )  $n_2 \neq n_1 + 1, n_3 = n_2 + 1.$
- d )  $n_2 = n_1 + 1, n_3 = n_2 + 1.$

El primer caso corresponde a espines en posiciones no consecutivas de la cadena; el segundo caso es en el cual el segundo espín volteado es próximo al primero pero el tercer espín volteado no lo es; en el tercer caso se tiene que el segundo espín volteado no es próximo al primero pero el tercer espín volteado de la cadena se encuentra en la posición siguiente al segundo espín volteado; y en el último caso, los tres espines volteados se encuentran en posiciones consecutivas de la cadena.

En el primer caso, con ningún espín volteado cercano

$$\begin{aligned}
(E - E_0)f(n_1, n_2, n_3) &= 6\Delta f(n_1, n_2, n_3) - f(n_1 - 1, n_2, n_3) \\
&\quad - f(n_1 + 1, n_2, n_3) - f(n_1, n_2 - 1, n_3) - f(n_1, n_2 + 1, n_3) \\
&\quad - f(n_1, n_2, n_3 - 1) - f(n_1, n_2, n_3 + 1),
\end{aligned}
\tag{6.43}$$

donde

$$\begin{aligned}
f(n_1, n_2, n_3) = & A_{123}e^{i(k_1n_1+k_2n_2+k_3n_3)} + A_{132}e^{i(k_1n_1+k_3n_2+k_2n_3)} \\
& + A_{213}e^{i(k_2n_1+k_1n_2+k_3n_3)} + A_{231}e^{i(k_2n_1+k_3n_2+k_1n_3)} \\
& + A_{312}e^{i(k_3n_1+k_1n_2+k_2n_3)} + A_{321}e^{i(k_3n_1+k_2n_2+k_1n_3)}.
\end{aligned} \tag{6.44}$$

Al sustituir y simplificar, se encuentra que, sin campo magnético

$$\begin{aligned}
E - E_0 = & 2J(\Delta - \cos k_1) + 2J(\Delta - \cos k_2) + 2J(\Delta - \cos k_3) \\
E = E_0 + & 2J \sum_{i=1}^3 (\Delta - \cos k_i).
\end{aligned} \tag{6.45}$$

(Samaj)

Para el caso con dos espines volteados en sitios consecutivos, se pueden usar relaciones similares a los obtenidos para el sector  $r = 1$ .

El segundo caso implica

$$\frac{A_{123}}{A_{213}} = e^{i\theta_{12}} \quad \frac{A_{132}}{A_{312}} = e^{i\theta_{13}} \quad \frac{A_{231}}{A_{321}} = e^{i\theta_{23}}. \tag{6.46}$$

Y el tercer caso

$$\frac{A_{123}}{A_{132}} = e^{i\theta_{23}} \quad \frac{A_{213}}{A_{231}} = e^{i\theta_{13}} \quad \frac{A_{312}}{A_{321}} = e^{i\theta_{12}}, \tag{6.47}$$

donde  $\theta_{\alpha,\beta}$  con  $\alpha, \beta = 1, 2, 3$  es la generalización del caso  $r = 2$ . (Samaj)

Ahora, en el cuarto caso se utiliza la simetría  $\theta_{\alpha,\beta} = -\theta_{\beta,\alpha}$ . Resolviendo el sistema de ecuaciones del tercer y cuarto caso, se obtiene que

$$\begin{aligned}
A_{123} &= \exp \left[ \frac{i}{2}(\theta_{12} + \theta_{13} + \theta_{23}) \right] \\
A_{132} &= \exp \left[ \frac{i}{2}(\theta_{13} + \theta_{12} + \theta_{32}) \right] \\
A_{213} &= \exp \left[ \frac{i}{2}(\theta_{21} + \theta_{23} + \theta_{13}) \right] \\
A_{231} &= \exp \left[ \frac{i}{2}(\theta_{23} + \theta_{21} + \theta_{31}) \right] \\
A_{312} &= \exp \left[ \frac{i}{2}(\theta_{31} + \theta_{32} + \theta_{12}) \right] \\
A_{321} &= \exp \left[ \frac{i}{2}(\theta_{32} + \theta_{31} + \theta_{21}) \right].
\end{aligned} \tag{6.48}$$

Por las condiciones de frontera  $f(n_1, n_2, n_3) = f(n_2, n_3, n_1 + N)$

$$\begin{aligned}
A_{123} &= A_{231} e^{ik_1 N} \\
A_{213} &= A_{132} e^{ik_2 N} \\
A_{312} &= A_{123} e^{ik_3 N}.
\end{aligned} \tag{6.49}$$

Los números de onda  $k_1, k_2, k_3$  están cuantizados de tal forma que

$$\begin{aligned}
Nk_1 &= 2\pi I_1 + \theta_{12} + \theta_{13} \\
Nk_2 &= 2\pi I_2 + \theta_{21} + \theta_{23} \\
Nk_3 &= 2\pi I_3 + \theta_{31} + \theta_{32}
\end{aligned}$$

donde  $I_1, I_2, I_3$  es una secuencia de  $N$  enteros consecutivos. (Samaj)

### 6.3.4. Ansatz de Bethe

Entendiendo las permutaciones realizadas en los casos anteriores, ahora se considera el caso general en el cual se tienen  $r$  espines volteados. La dimensión del subespacio de estados con magnetización  $S^z = N/2 - r$  incrementa exponencialmente. (Franchini, 2011).

El estado general con  $r$  espines volteados se escribe como

$$|\psi\rangle = \sum_{\{n_l\}} f(n_1, n_2, \dots, n_r) |n_1, n_2, \dots, n_r\rangle, \quad (6.50)$$

donde la suma es sobre los  $r$  sitios con espines volteados y

$$|n_1, n_2, \dots, n_r\rangle \equiv S_{n_1}^- S_{n_2}^- \dots S_{n_r}^- |0\rangle, \quad (6.51)$$

es el estado con  $r$  espines volteados en los sitios  $\{n_l\}$ . Este estado tiene magnetización  $S^z = N/2 - r$ . Con esto se observa que, para  $N$  par, es posible tener magnetización  $S^z = 0$ . (Franchini, 2017)

La ecuación de autovalores para el hamiltoniano usando la función de onda es,

$$\begin{aligned} (H - E)\psi = & \\ & - \frac{J}{2} \sum_{j=1}^r (1 - \delta_{n_j+1, n_{j+1}}) [f(n_1, \dots, n_j + 1, n_{j+1}, \dots, n_r) \\ & + f(n_1, \dots, n_j, n_{j+1} - 1, \dots, n_r)] \\ & + [E_0 - E + (J\Delta + 2h)r - J\Delta \sum_{j=1}^r \delta_{n_j+1, n_{j+1}}] f(n_1, n_2, \dots, n_r) = 0. \end{aligned} \quad (6.52)$$

Con esto, se plantea el Ansatz de Bethe suponiendo una superposición de ondas planas

$$\begin{aligned} f(n_1, n_2, \dots, n_r) = & \sum_P^{r!} A[P] e^{i \sum_{j=1}^r k P_j n_j} \\ = & \sum_P^{r!} \exp \left\{ i \sum_{j=1}^r k P_j n_j + \frac{i}{2} \sum_{j < l}^r \tilde{\Theta}(k P_j, k P_l) \right\}, \end{aligned} \quad (6.53)$$

donde  $P$  es una permutación de  $1, 2, \dots, r$ . (Franchini, 2011).

Sustituyendo el Ansatz en la ecuación de autovalores (6.52) se encuentra

$$\begin{aligned} E = E_0 + \sum_{l=1}^r [2J(\Delta - \cos k_l) + 2h] \\ E = E_0 + (2J\Delta + 2h)r - 2J \sum_{l=1}^r \cos k_l. \end{aligned} \quad (6.54)$$

Esta relación se cumple si

$$\begin{aligned}
& A[P](e^{ikPj} + e^{ikP(j+1)} - 2\Delta)e^{ikP(j+1)} + \\
& + A[P(j, j+1)](e^{ikP(j+1)} + e^{-ikPj} - 2\Delta)e^{ikPj} = 0.
\end{aligned} \tag{6.55}$$

(Franchini, 2017)

Asimismo, relacionando los ángulos de fase con los cuasimomenta

$$e^{i\tilde{\Theta}(k, k')} = -\frac{e^{i(k+k')} + 1 - 2\Delta e^{ik}}{e^{i(k+k')} + 1 - 2\Delta e^{ik'}}, \tag{6.56}$$

con  $\Theta(k, k') \equiv \Theta(\tilde{k}, k') - \pi$ . De esto, se obtiene que

$$\Theta(k, k') = 2 \arctan \frac{\Delta \sin \frac{1}{2}(k - k')}{\cos \frac{1}{2}(k + k') - \Delta \cos \frac{1}{2}(k - k')}. \tag{6.57}$$

Por las condiciones de frontera

$$\begin{aligned}
e^{ikN} &= \prod_{j \neq l} e^{i\tilde{\Theta}(k_j, k_l)} \\
&= (-1)^{r-1} \prod_{j \neq l} \frac{e^{i(k_j+k_l)} + 1 - 2\Delta e^{ik_j}}{e^{i(k_j+k_l)} + 1 - 2\Delta e^{ik_l}}.
\end{aligned} \tag{6.58}$$

Al aplicar el logaritmo en ambos lados de la ecuación se obtienen las ecuaciones de Bethe

$$k_j N = 2\pi \tilde{I}_j - \sum_{l=1}^r \Theta(k_j, k_l), \tag{6.59}$$

donde  $\{\tilde{I}_j\}$  son números cuánticos enteros que definen el estado. (Franchini, 2017)

El ángulo de fase de la ecuación (6.57) no es invariante ante traslaciones para cambios de momenta ( $k_j$ ), lo cual complica mostrar factorizaciones de la matriz de dispersión. De esta forma, se reparametriza los cuasimomenta al cambiar variable  $k_j \rightarrow \lambda_j$  con

$$e^{ik_j} = \frac{\sin \frac{\phi}{2}(\lambda_j + i)}{\sin \frac{\phi}{2}(\lambda_j - i)} \tag{6.60}$$

donde  $\lambda_j$  son rapidezces propias y  $\phi$  es un parámetro que se definirá posteriormente. (Franchini, 2017)

Estos nuevos parámetros introducen una nueva base para la expansión del Ansatz de Bethe de la ecuación (6.53). En términos de las nuevas variables, uno de los términos del producto de la

ecuación (6.58) se convierte en

$$\frac{e^{i(k_j+k_l)} + 1 - 2\Delta e^{ik_j}}{e^{i(k_j+k_l)} + 1 - 2\Delta e^{ik_l}} = \frac{\cos\frac{\phi}{2}(\lambda_j+\lambda_l)(\cosh\phi - \Delta) + \{\Delta \cos[\frac{\phi}{2}(\lambda_j - \lambda_l + 2i)] - \cos[\frac{\phi}{2}(\lambda_j - \lambda_l)]\}}{\cos\frac{\phi}{2}(\lambda_j+\lambda_l)(\cosh\phi - \Delta) + \{\Delta \cos[\frac{\phi}{2}(\lambda_l - \lambda_j + 2i)] - \cos[\frac{\phi}{2}(\lambda_j - \lambda_l)]\}}. \quad (6.61)$$

(Franchini, 2017)

Ahora, si  $\cosh\phi \equiv \Delta$

$$\begin{aligned} \frac{e^{i(k_j+k_l)} + 1 - 2\Delta e^{ik_j}}{e^{i(k_j+k_l)} + 1 - 2\Delta e^{ik_l}} &= \\ &= \frac{\Delta \cos[\frac{\phi}{2}(\lambda_j - \lambda_l + 2i)] - \cos[\frac{\phi}{2}(\lambda_j - \lambda_l)]}{\Delta \cos[\frac{\phi}{2}(\lambda_l - \lambda_j + 2i)] - \cos[\frac{\phi}{2}(\lambda_j - \lambda_l)]} \\ &= \frac{\sin[\frac{\phi}{2}(\lambda_j - \lambda_l + 2i)]}{\sin[\frac{\phi}{2}(\lambda_l - \lambda_j + 2i)]}. \end{aligned} \quad (6.62)$$

Por otro lado, la ecuación (6.60) se puede expresar como

$$\cot \frac{k_j}{2} = \coth \frac{\phi}{2} \tan\left(\frac{\phi\lambda_j}{2}\right). \quad (6.63)$$

Con lo cual las ecuaciones de Bethe (6.59) son

$$N\theta_1(\lambda_j) = 2\pi I_j + \sum_{l \neq j} \theta_2(\lambda_j - \lambda_l), \quad j = 1, \dots, r, \quad (6.64)$$

donde

$$\theta_n = 2 \arctan \left[ \coth\left(\frac{n\phi}{2}\right) \tan\left(\frac{\phi\lambda}{2}\right) \right], \quad (6.65)$$

tal que  $\theta_1(\lambda_j)$  es el cuasimomentum original  $k_j$ . Entonces

$$p(\lambda_j) \equiv \theta_1(\lambda_j) = k_j. \quad (6.66)$$

Asimismo, en términos de las rapideces, la energía y el momentum están dados por

$$E = E_0 + 2hr + \sum_{j=1}^M \epsilon(\lambda_j), \quad (6.67)$$

$$K = 2 \sum_{j=1}^M \cot^{-1} \frac{\tan(\phi\lambda_j/2)}{\tanh(\phi/2)}, \quad (6.68)$$

con

$$\epsilon(\lambda) = \frac{J \sinh^2 \phi}{\cosh \phi - \cos(\phi\lambda)}, \quad (6.69)$$

la energía de la cuasipartícula. (Franchini, 2017)

Finalmente, se presentan los resultados de los valores de energía obtenidas por Franchini y se hace una breve descripción de las fases de la cadena XXZ en función del valor de  $\Delta$ .

#### 6.3.4.1. Caso $\Delta > 1$

El estado base para una cadena bajo un campo magnético  $h \geq 0$  es un estado completamente polarizado. Entonces, los estados con menor energía están dados por la energía de magnones. Se obtienen estas excitaciones caracterizadas por su momentum y su energía en función de sus rapidez de onda como

$$p_r(\lambda_r) = \frac{1}{i} \ln \frac{\sin \frac{1}{2}[\lambda_r + i(2r+1)\phi]}{\sin \frac{1}{2}[\lambda_r - i(2r+1)\phi]}, \quad (6.70)$$

y

$$\epsilon_r(\lambda_r) = J \frac{\sinh \phi \sinh [(2r+1)\phi]}{\cosh [(2r+1)\phi] - \cosh \lambda_r}. \quad (6.71)$$

Combinando estas ecuaciones

$$\epsilon_r(p_r) = J \frac{\sinh \phi}{\sinh [(2r+1)\phi]} [\cosh [(2r+1)\phi] - \cos \lambda_r]. \quad (6.72)$$

De esta ecuación, la menor energía ocurre cuando  $\epsilon_r(0) = J \sinh \phi \tanh [(2r+1)\phi/2]$ , así como cuando no se tiene excitaciones de magnones,  $r = 0$ , resultando la energía como  $\epsilon_r = 2J \sinh^2 (\phi/2)$ . (Franchini, 2017)

Con este resultado, el estado con menor energía cuando  $\Delta > 1$  es el estado base; donde todos los espines están alineados unos con otros. Este ordenamiento produce un orden ferromagnético en la cadena. Al añadir un campo magnético externo, este no tiene consecuencia alguna en el orden de los espines de la cadena, simplemente aumenta la energía del estado base. Asimismo, por la simetría de la cadena ante un campo magnético, dos estados pueden ser los estados con menor energía, el estado con todos los espines arriba o el estado con todos los espines abajo. Estos estados

son degenerados en el caso de un campo magnético externo nulo,  $h = 0$ .

#### 6.3.4.2. Caso $\Delta < -1$

En esta fase, cuando el campo magnético es nulo,  $h = 0$ , el estado base tiene magnetización cero y está dado por  $N/2$  magnones que satisfacen la ecuación de Bethe. En el límite  $\Delta \rightarrow \infty$  los estados que generan el estado base son una combinación antisimétrica de los estados  $|\uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow, \dots\rangle \pm |\downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow, \dots\rangle$ . Estos estados generan un orden anti-ferromagnético en la cadena. (Franchini, 2017)

Al añadir un campo magnético externo a la alineación antiferromagnética, se determina el campo magnético mínimo  $h_c$  necesario para inducir una magnetización en el estado base, siendo esta

$$h_c = J \frac{\sinh \phi}{\pi} \sqrt{1 - k^2} I(k), \quad (6.73)$$

$$\text{donde } I(k) \equiv \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}.$$

Con esto, para  $h_c < h < h_s$  se entra a la fase paramagnética, con la magnetización del estado base aumentando con  $h$  hasta llegar a una saturación  $h_s$ . Para  $h > h_s$  el estado base está completamente polarizado y la fase es ferromagnética. (Franchini, 2017)

#### 6.3.4.3. Caso $|\Delta| < 1$

Con esta condición, la cadena tiene fase paramagnética. Es decir, los espines en la cadena son susceptibles al campo magnético externo  $h$ , el cual produce una alineación de los espines hacia la dirección del campo magnético aplicado. Durante esta fase se recupera la cadena XX del modelo de Heisenberg. (Franchini, 2017)

Para resumir las fases antes mencionadas se realizan gráficas variando los parámetros  $\Delta$  y  $h$  para una cadena de  $N = 4$  espines.

En la figura (6.1) se observa que la magnetización por sitio de una cadena de espines, sin campo magnético externo ( $h = 0$ ) y cuando  $\Delta > 1$ , es  $M = 1$ , lo cual indica que los espines están completamente alineados (orden ferromagnético). Asimismo, para  $\Delta < 1$ , la magnetización por sitio es  $M = 0$ , generando un orden anti-ferromagnético.

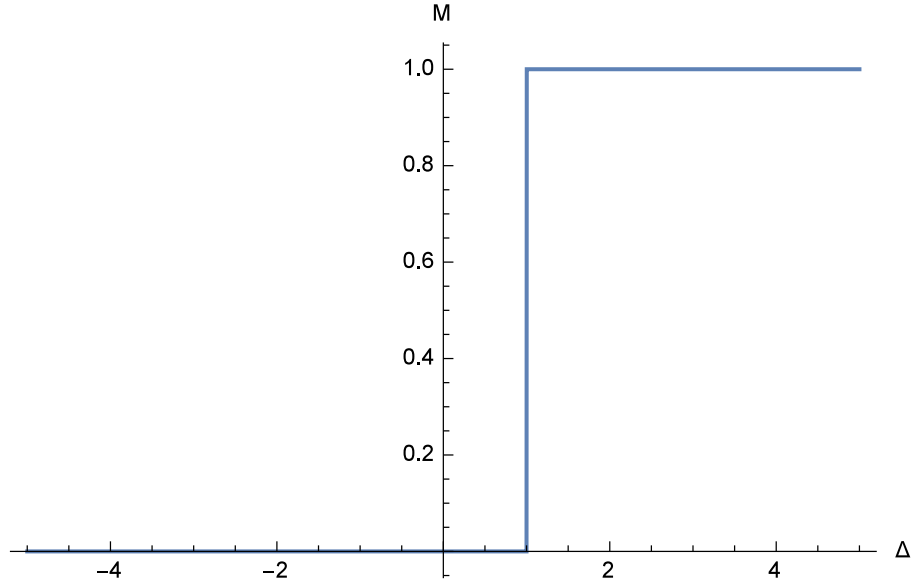


Figura 6.1: Gráfica de la magnetización en función de  $\Delta$  para una cadena de 4 espines bajo un campo magnético nulo.

Fuente: Elaboración propia

Ahora, al agregar un campo magnético, se obtiene una gráfica como la Figura (6.2). En esta gráfica, el orden ferromagnético continua en la fase  $\Delta > 1$ . Sin embargo, para  $\Delta < 1$ , se observa una magnetización en una región del espacio. En este punto se recupera la fase ferromagnética mencionada anteriormente. De igual forma, en el intervalo  $-1 \leq \Delta \leq 1$ , el orden es paramagnético y la magnetización es diferente de cero debido a la fuerza del campo magnético externo actuando sobre la cadena.

Este fenómeno se puede observar de mejor manera en el plano  $M-h$  como en las figuras (6.3) y (6.4). En estas gráficas se observa como la magnetización en función del campo magnético cambia al variar el parámetro  $\Delta$ . En la primera,  $\Delta = -2$ , la magnetización va de un orden antiferromagnético y aumenta a un orden ferromagnético a medida que el campo magnético incrementa en el intervalo  $h \geq 0$ . Por otro lado, en el segundo caso, la magnetización solo depende del signo del campo magnético; como se espera.

Finalmente, se realiza la gráfica del campo magnético en función de la anisotropía del modelo  $\Delta$  y se obtiene que el diagrama de fase para una cadena XXZ es como el de la Figura (6.5).

En este diagrama, la región celeste muestra los valores en los cuales el sistema pasa por la fase antiferromagnética; la región morada y verde, fase paramagnética; y la región roja, una fase ferromagnética. Finalmente, en esta figura se pueden ver fronteras irregulares entre cada fase. Esto

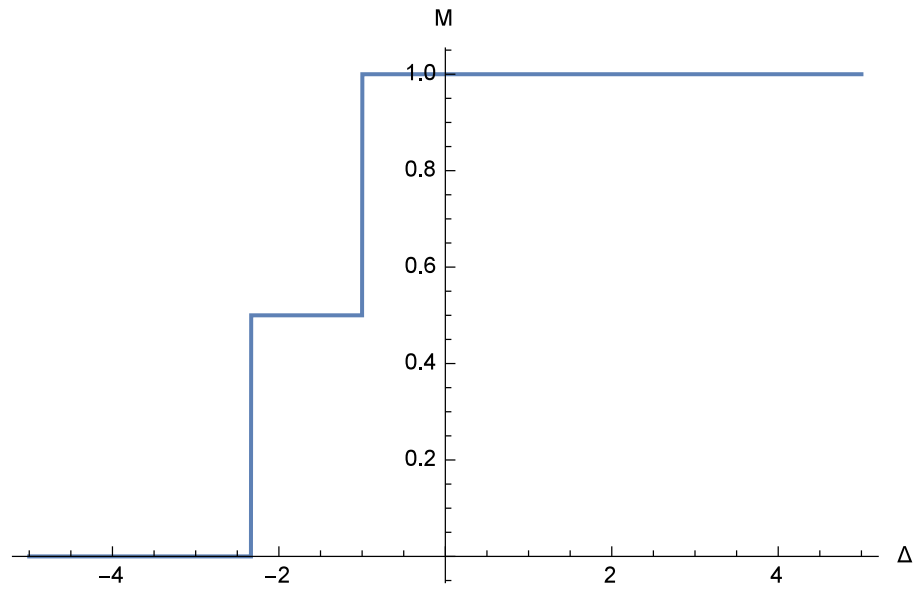


Figura 6.2: Gráfica de la magnetización en función de  $\Delta$  para una cadena de 4 espines bajo un campo magnético con valor  $h = 2$ .

Fuente: Elaboración propia

se debe a que el diagrama es una proyección de una gráfica en tres dimensiones que se obtuvo numéricamente, por lo que los valores en las fronteras son sensibles a los parámetros elegidos. Sin embargo, estas pequeñas irregularidades no afectan la distinción de las fases representadas en el diagrama.

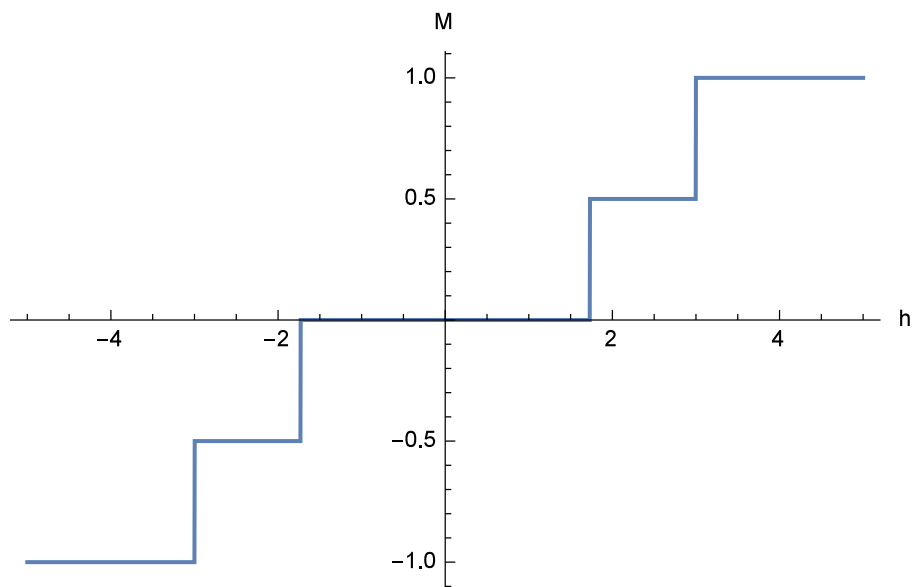


Figura 6.3: Gráfica de la magnetización en función del campo magnético externo para una cadena de cuatro espines con  $\Delta = -2$ .

Fuente: Elaboración propia

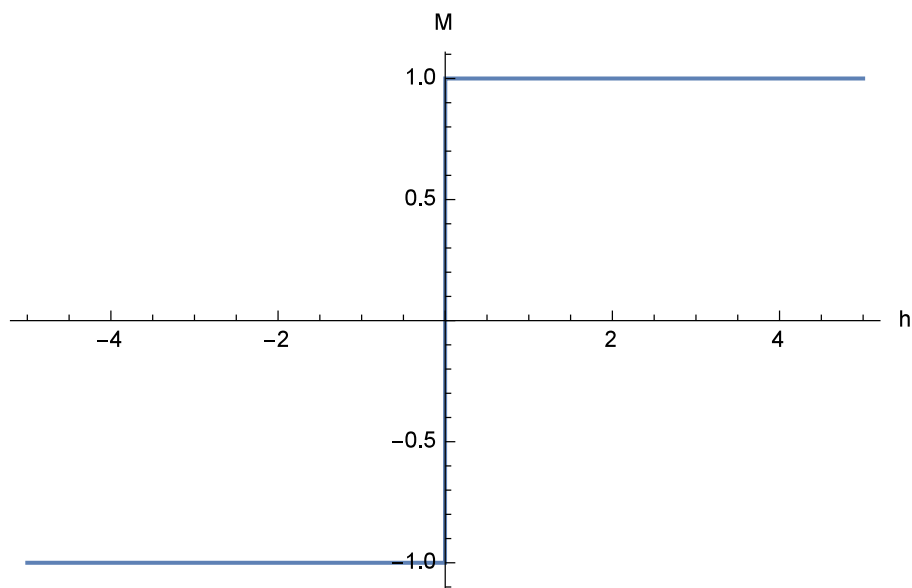


Figura 6.4: Gráfica de la magnetización en función del campo magnético externo para una cadena de cuatro espines con  $\Delta = 2$ .

Fuente: Elaboración propia

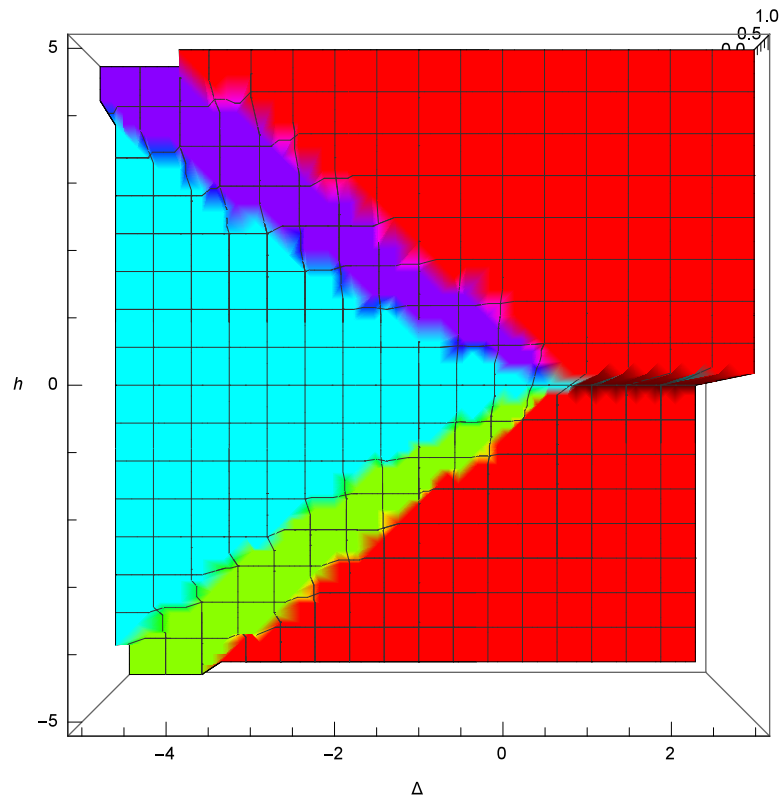


Figura 6.5: Diagrama de fase de una cadena XXZ en el modelo de Heisenberg. La región celeste muestra los valores en los cuales el sistema pasa por la fase antiferromagnética; la región morada y verde, fase paramagnética; y la región roja, una fase ferromagnética.

Fuente: Elaboración propia



# 7 Equivalencia entre el modelo de seis vértices y el modelo de Heisenberg

Hasta ahora se han presentado el modelo de Heisenberg y el modelo de seis vértices como dos modelos físicos diferentes; un modelo cuántico y uno clásico de muchas partículas, respectivamente. Ahora se mostrará una equivalencia matemática entre ambos modelos y se estudiarán las implicaciones físicas en ambos casos. Asimismo, se muestran los vectores del estado base y la magnetización de la cadena de Heisenberg con  $n = 4$  espines, obtenidos numéricamente con el programa Mathematica.

## 7.1. Equivalencia del modelo de seis vértices y el modelo de Heisenberg

Partiendo de la definición de la matriz de transferencia del modelo de seis vértices y la expresión de la matriz para un solo vértice en función de los operadores de Pauli,

$$\mathbf{T} = \mathcal{L}_{1,2}\mathcal{L}_{2,3}\mathcal{L}_{3,4}\cdots\mathcal{L}_{N,N+1},$$

con

$$\mathcal{L}_{i,i+1} = \frac{a}{2}(1 + \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z) + \frac{b}{2}(1 - \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z) + c(\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+).$$

De esta definición, la matriz  $\mathcal{L}$  es cercana a la matriz identidad si

$$a \rightarrow 1 + \delta a \qquad b \rightarrow 1 + \delta b \qquad c \rightarrow \delta c. \qquad (7.1)$$

(Fendley, 2018)

Entonces,  $\delta\mathcal{L}$  se escribe como

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{L} &= \frac{1+\delta a}{2}(1+\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z) + \frac{1+\delta b}{2}(1-\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z) + \delta c(\sigma_i^+\sigma_{i+1}^- + \sigma_{i+1}^+\sigma_i^-) \\
&= \frac{1}{2} + \frac{\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z}{2} + \frac{\delta a}{2} + \frac{\delta a}{2}\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z + \frac{1}{2} - \frac{\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z}{2} + \frac{\delta b}{2} - \frac{\delta b}{2}\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z + \delta c(\sigma_i^+\sigma_{i+1}^- + \sigma_i^-\sigma_{i+1}^+) \\
\delta\mathcal{L} &= \mathbb{1} + \frac{\delta a - \delta b}{2}\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z + \delta c(\sigma_i^+\sigma_{i+1}^- + \sigma_i^-\sigma_{i+1}^+) + \frac{\delta a + \delta b}{2}.
\end{aligned} \tag{7.2}$$

Al multiplicar sucesivamente estas matrices y tomar el primer orden de la expansión, se encuentra que la matriz de transferencia para el modelo de seis vértices es

$$\mathbf{T} = \mathbb{1} + H_{XXZ} + \dots, \tag{7.3}$$

donde  $H_{XXZ}$  es el hamiltoniano del modelo de Heisenberg, con

$$\Delta_{HXXZ} = \frac{a-b}{c}. \tag{7.4}$$

De esta forma se tiene la relación entre la matriz de transferencia del modelo de seis vértices con el hamiltoniano de la cadena de Heisenberg XXZ. Asimismo, se encuentra una relación entre los pesos de Boltzman en el modelo clásico con la anisotropía del modelo cuántico.

## 7.2. Propiedades físicas

Tomando los resultados de los capítulos anteriores, se muestran las propiedades físicas de cada modelo según los pesos de Boltzman en el modelo de seis vértices. De ahora en adelante se usará  $\Delta_{6V}$  para denotar la constante del modelo de seis vértices, y  $\Delta_{HXXZ}$  para denotar la anisotropía en el eje  $z$  del modelo de Heisenberg XXZ.

Cuando en el modelo de seis vértices se tiene un ordenamiento ferroeléctrico tal que  $a > b + c$  o  $\Delta_{6V} > 1$ , la ecuación (7.4) implica que  $\Delta_{HXXZ} > 1$ . Lo cual se traduce a un orden ferromagnético en la cadena de Heisenberg.

Al obtener numéricamente los resultados para el modelo de Heisenberg, se obtiene que los vectores con menor energía son  $|++++\rangle$  y  $|-- --\rangle$  con magnetización por sitio  $m = 1$  y  $m = -1$ , respectivamente. Los parámetros utilizados para este resultado fueron:  $\Delta_{HXXZ} = 5$  y  $h = 0$ .

Por el contrario, cuando en el modelo de seis vértices  $\Delta_{6V} > 1$  pero con  $b > a + c$ , en el modelo de Heisenberg se tiene  $\Delta_{HXXZ} < \frac{a-c}{a+c}$  donde  $\Delta_{HXXZ}$  es positivo y  $a > c$ , así como  $\Delta_{HXXZ} > \frac{a-c}{a+c}$

con  $a < c$  y  $\Delta_{HXXZ}$  negativo. Estas condiciones se pueden traducir como  $-1 < \Delta_{HXXZ} < 1$  descartando el punto  $\Delta_{HXXZ} = 0$ , la fase paramagnética en la cadena XXZ del modelo de Heisenberg.

Los resultados obtenidos numéricamente con parámetros  $\Delta_{HXXZ} = -0,2$  y  $h = 0$ , fue una combinación lineal de los vectores  $|--++\rangle, |-+ -+\rangle, |-+ +- \rangle, |+ --+\rangle, |+ - +- \rangle, |+ + --\rangle$  y una magnetización  $m = 0$ . Al aplicar un campo magnético  $h = 2$  al mismo sistema, se obtuvo un solo vector  $|++++\rangle$  con magnetización por sitio  $m = 1$ .

Similarmente, con  $\Delta_{HXXZ} = 0,2$  y  $h = 0$ , el estado con menor energía es una combinación lineal con los mismos vectores que en el caso anterior y una magnetización igualmente nula. Asimismo, al aplicar un campo magnético al sistema, se obtuvo el vector  $|++++\rangle$  como se esperaba.

Por otro lado, en la fase anti-ferroeléctrica del modelo de seis vértices  $\Delta_{6V} < -1$  implica un ordenamiento anti-ferromagnético en el modelo de Heisenberg,  $\Delta_{HXXZ} < -1$ .

De los resultados obtenidos con  $\Delta_{HXXZ} = -2$  y  $h = 0$ , el estado con menor energía es una combinación lineal de los vectores con dos espines volteados, dando una magnetización por sitio  $m = 0$ .

En general, cuando  $\Delta_{6V} < -1$ , en el modelo de Heisenberg el vector con menor energía es una combinación lineal de vectores con  $n/2$  espines volteados en la cadena y una magnetización  $m = 0$ . Esto en el caso de  $n$  par. Cuando  $n$  no es un número par, se tiene que el vector con menor energía es una combinación lineal de vectores con  $(n - 1)/2$  espines volteados.

Finalmente, para el caso desordenado en el modelo de seis vértices, se tomó el caso  $a = b = c = 1$ , donde la temperatura es infinita. Con estos valores de los pesos de Boltzman se tiene que, en el modelo de Heisenberg, se recupera la cadena XX; es decir,  $\Delta_{HXXZ} = 0$ .

Estos resultados se resumen en la siguiente tabla.

| Modelo de seis vértices   | Modelo de Heisenberg   |
|---|--|
| $a > b + c$<br>fase ferroeléctrica  | $\Delta_{HXXZ} > 1$<br>fase ferromagnética   |
| $b > a + c$<br>fase ferroeléctrica  | $\Delta_{HXXZ} > \frac{a-c}{a+c}, \quad a < c$<br>$\Delta_{HXXZ} < \frac{a-c}{a+c}, \quad a > c$<br>fase paramagnética |
| $c > a + b$<br>fase anti-ferroeléctrica   | $\Delta_{HXXZ} < -1$<br>fase anti-ferromagnética   |
| $a, b, c < \frac{1}{2}(a + b + c)$<br>Incluye $a = b = c = 1$<br>temperatura infinita | $\Delta_{HXXZ} = 0$<br>cadena XX   |

Cuadro 7.1: Equivalencias de las propiedades ferroeléctricas y ferromagnéticas del modelo de seis vértices y el modelo de Heisenberg, respectivamente.

## 8 Conclusiones

Los modelos de seis vértices y el modelo de Heisenberg son dos modelos que explican propiedades eléctricas y magnéticas de distintos materiales, respectivamente. Sin embargo, al trabajar la matriz de transferencia del modelo de seis vértices fue posible estudiar una relación entre la matriz de transferencia de dicho modelo con el hamiltoniano del modelo de Heisenberg XXZ.

La igualdad encontrada implica que  $[H_{XXZ}, T_{6v}] = 0$ , lo cual significa que existe una base de autovectores en común. Asimismo, por la relación entre los pesos de Boltzman con la anisotropía del modelo de Heisenberg, determinar el diagrama de fase del modelo de seis vértices es equivalente a encontrar el diagrama de fase del modelo XXZ.

La equivalencia

$$\Delta_{HXXZ} = \frac{a-b}{c}$$

implica que una fase ferroeléctrica tiene un análogo ferromagnético. En particular, el análogo magnético de una fase ferroeléctrica en el modelo de seis vértices resulta de una combinación entre una fase ferromagnética y una fase paramagnética en una cadena de espines, según sean los valores de los pesos de Boltzman. Asimismo, esta relación indica que la configuración de una cadena de Heisenberg XXZ, cuando los pesos de Boltzman son iguales, corresponde a la configuración de una cadena XX en el modelo de Heisenberg.

La igualdad entre la matriz de transferencia del modelo de seis vértices y el hamiltoniano del modelo de Heisenberg, así como la equivalencia entre los diagramas de fase, permiten hacer un resumen con las implicaciones físicas de ambos modelos para simplificar la validación de experimentos.



# Bibliografía

- Baxter, Rodney. 1989. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Estados Unidos: Academic Pres.
- Callen, Herbert. 1985. *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics*. 2<sup>a</sup> ed. Republica de Singapur: John Wiley & Sons.
- Fendley, Paul. 2018. «The XXZ chain and the six-vertex model». En *Modern statistical mechanics*. <http://users.ox.ac.uk/~phys1116/>
- Franchini, Fabio. 2011. *Notes on Bethe Ansatz Techniques*. Italia.
- Franchini, Fabio. 2017. *An introduction to integrable techniques for one-dimensional quantum systems*. Italia. arXiv:1609.02100v3
- Karbach, Michael. y Muller, Gerhard. 2008. *Introduction to the Bethe Ansatz I*. University of Rhode Island, Kingstown. arXiv:cond-mat/9809162v1
- Pathria, Raj. y Beale, Paul. 2011. *Statistical Mechanics*. 3<sup>a</sup> ed. Estados Unidos: Elsevier.
- Perk, Jacques. y Au-Yang, Helen. 2006. *Yang-Baxter Equations*. Oklahoma State University, Estados Unidos. arXiv:math-ph/0606053v1
- Rodriguez-Plaza, M. 2005. *States with  $\nu_1 = \lambda$ ,  $\nu_2 = -\lambda$  and reciprocal equations in the six-vertex model*. Madrid, España. arXiv:cond-mat/0506613
- Samaj, Ladislav. *Introduction to Exactly Solvable 1D Quantum Lattice Models of Solid-State Physics*. Slovak Academy of Science, Eslovaquia.
- Syljuasen, Olav. y Zvonarev, M. 2018. *Directed-loop Monte Carlo simulations of vertex model*. Copenhagen, Dinamarca. arXiv:cond-mat/0401491
- Vijay, Sagar. 2014. *Studying the Six-Vertex Model with the Yang-Baxter Equation*. Massachusetts Institute of Technology, Estados Unidos.
- Vojta, Matthias. 2013. *Quantum phase transitions*. Universidad de Karlsruhe, Alemania. arXiv:cond-mat/0309604v2
- Vojta, Matthias. 2015. *Thermal and Quantum Phase Transitions*. Universidad técnica de Dresde, Alemania.



# 10 Anexos

## 10.1. Código para la magnetización del modelo de Ising

```
1 Magnetizacion del modelo de Ising
2
3 Definir la funcion de magnetizacion
4
5 M = (Exp[1/T]*Sinh[h/T])/(Exp[2/T]*(Sinh[h/T])^2 + Exp[-2/T])^(1/2);
6
7 Derivada de la magnetizacion respecto a la temperatura
8 DMt = Simplify[D[M, T]]
9
10 Graficas de la magnetiacion y de su primera derivada en funci n de la temperatura
11
12 Plot[M /. h -> 1, {T, 0, 10}, AxesLabel -> {"T", "M"},
13 PlotLabel -> "Magnetizacion del modelo de Ising"]
14
15 Plot[DMt /. h -> 1, {T, 0, 10}, AxesLabel -> {"T", "dM/dT"},
16 PlotLabel ->
17 "Primera derivada de la magnetizacion del modelo de Ising"]
18
19 Gr ficas de la magnetiacion en funcion del campo magnetico
20
21 For[i = 0.5, i < 4, i++,
22 Print[Plot[M /. T -> i, {h, -10, 10}, AxesLabel -> {"h", "M"},
23 PlotLabel ->
24 "Magnetizacion en funcion del campo magnetico externo con T = " + i]]]
```

## 10.2. Código de las ecuaciones de Yang-Baxter en el modelo de seis vértices

```
1 Ecuaciones de Y-B
2
3 Definir la base
4
5 {up, down} = {{1, 0}, {0, 1}}
6
7 {right, left} = {{1, 0}, {0, 1}}
```

```

8
9 Matrices L, L', R
10
11 L = {{a, 0, 0, 0}, {0, c, b, 0}, {0, b, c, 0}, {0, 0, 0, a}};
12 Lp = {{ap, 0, 0, 0}, {0, cp, bp, 0}, {0, bp, cp, 0}, {0, 0, 0, ap}};
13 R = {{app, 0, 0, 0}, {0, cpp, bpp, 0}, {0, bpp, cpp, 0}, {0, 0, 0, app}};
14
15 Elementos L
16
17 L\[Gamma][\[Alpha]_, \[Alpha]p_, \[Gamma]_, \[Gamma]p_] :=
18   Transpose[KroneckerProduct[List /@ \[Gamma],
19     List /@ \[Alpha]]].L.KroneckerProduct[List /@ \[Alpha]p,
20     List /@ \[Gamma]p]
21
22 Lp\[Gamma][\[Alpha]_, \[Alpha]p_, \[Gamma]_, \[Gamma]p_] :=
23   Transpose[KroneckerProduct[List /@ \[Gamma],
24     List /@ \[Alpha]]].Lp.KroneckerProduct[List /@ \[Alpha]p,
25     List /@ \[Gamma]p]
26
27 R\[Gamma][\[Alpha]_, \[Alpha]p_, \[Beta]_, \[Beta]p_] :=
28   Transpose[KroneckerProduct[List /@ \[Beta],
29     List /@ \[Alpha]]].R.KroneckerProduct[List /@ \[Alpha]p, List /@ \[Beta]p]
30
31 Combinaciones posibles para seis espines diferentes
32
33 combinaciones = Tuples[{up, down}, {6}];
34
35 combinaciones // Column;
36
37 base = {up, down};
38
39 Ecuaciones de YB
40
41 sumIzq[\[Alpha]_, \[Beta]_, \[Gamma]_, \[Alpha]p_, \[Beta]p_, \[Gamma]p_] := \
42   \!\(
43     \*UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \(\[Alpha]pp = 1\), \{(2)\}]\(
44     \*UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \(\[Beta]pp = 1\), \{(2)\}]\(
45     \*UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \(\[Gamma]pp =
46       1\), \{(2)\}]\((L\[Gamma][\[Alpha],
47       base[\(\[Alpha]pp)\(]\)], \[Gamma],
48       base[\(\[Gamma]pp)\(]\]) .
49     Lp\[Gamma][\[Beta], base[\(\[Beta]pp)\(]\)],
50     base[\(\[Gamma]pp)\(]\)], \[Gamma]p] .
51     R\[Gamma][base[\(\[Alpha]pp)\(]\)], \[Alpha]p,
52     base[\(\[Beta]pp)\(]\)], \[Beta]p]\)\)\)\)

```

```

53
54 sumDer[\[Alpha]_, \[Beta]_, \[Gamma]_, \[Alpha]p_, \[Beta]p_, \
55 \[Gamma]p_] := \!(\
56 \*UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \(\[Alpha]pp = 1\), \((2)\)\(\
57 \*UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \(\[Beta]pp = 1\), \((2)\)\(\
58 \*UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \(\[Gamma]pp =
59 1\), \((2)\)\((R\[Gamma][\[Alpha],
60 base[\(\([\)\]\(\[Alpha]pp)\)\([\)\])], \[Beta],
61 base[\(\([\)\]\(\[Beta]pp)\)\([\)\])]) .
62 Lp\[Gamma][base[\(\([\)\]\(\[Alpha]pp)\)\([\)\])], \[Alpha]p, \[Gamma],
63 base[\(\([\)\]\(\[Gamma]pp)\)\([\)\])]) .
64 L\[Gamma][base[\(\([\)\]\(\[Beta]pp)\)\([\)\])], \[Beta]p,
65 base[\(\([\)\]\(\[Gamma]pp)\)\([\)\])], \[Gamma]p)\)\)\)\)
66
67 64 Ecuaciones
68
69 izquierda =
70 Table[sumIzq[combinaciones[[j]][[1]], combinaciones[[j]][[2]],
71 combinaciones[[j]][[3]], combinaciones[[j]][[4]], combinaciones[[j]][[5]],
72 combinaciones[[j]][[6]]], {j, 1, 64}];
73
74 derecha = Table[
75 sumDer[combinaciones[[j]][[1]], combinaciones[[j]][[2]],
76 combinaciones[[j]][[3]], combinaciones[[j]][[4]], combinaciones[[j]][[5]],
77 combinaciones[[j]][[6]]], {j, 1, 64}];
78
79 izqSCeros = DeleteCases[izquierda, {0}]
80
81 derSCeros = DeleteCases[derecha, {0}]
82
83 izqSimetria = DeleteDuplicates[izqSCeros]
84
85 derSimetria = DeleteDuplicates[derSCeros]
86
87 Ecuaciones
88
89 Table[StringJoin[{ToString[izquierda[[k]][[1]][[1]]], " = ",
90 ToString[derecha[[k]][[1]][[1]]]}], {k, 1, Length[izquierda]}] // Column
91
92 No soluciones triviales
93
94 Table[StringJoin[{ToString[izqSCeros[[k]][[1]][[1]]], " = ",
95 ToString[derSCeros[[k]][[1]][[1]]]}], {k, 1, Length[izqSCeros]}] // Column
96
97 Por simetrai

```

```

98
99 Table[StringJoin[{ToString[izqSimetria[[k]][[1]][[1]]], " = ",
100   ToString[derSimetria[[k]][[1]][[1]]}], {k, 1,
101   Length[izqSimetria]}] // Column
102
103 No ecuaciones triviales (ambos lados de la igualdad son lo mismo)
104
105 Ecuas = DeleteCases[Table[If[
106   ToString[izqSimetria[[1]][[1]][[1]]] !=
107   ToString[derSimetria[[1]][[1]][[1]]],
108   StringJoin[{ToString[izqSimetria[[1]][[1]][[1]]], " = ",
109     ToString[derSimetria[[1]][[1]][[1]]}], {1, 1, 10}], Null];
110
111 Ecuaciones finales
112
113 ecuacionesF // Column
114
115 {"\<"ap bpp c + b cp cpp = a app cp">"},
116 {"\<"a bp bpp = ap b bpp + c cp cpp">"},
117 {"\<"b bpp cp + ap c cpp = app bp c">}

```

### 10.3. Código para graficar el diagrama de fase del modelo de seis vértices

```

1 \[CapitalDelta][a_, b_, c_] := (a^2 + b^2 - c^2)/(2 a*b)
2
3 Plot3D[\[CapitalDelta][a, b, 1], {a, 0.2, 5}, {b, 0.2, 5},
4   AxesLabel -> {"a/c", "b/c", "\[CapitalDelta]"}, ViewPoint -> Front,
5   ColorFunction -> "TemperatureMap",
6   PlotLabel -> "Diagrama de fase de 6VM", FaceGrids -> None,
7   Boxed -> False, PlotRange -> {-3, 3}]
8
9 Plot3D[\[CapitalDelta][a, b, 1], {a, 0.2, 5}, {b, 0.2, 5},
10  AxesLabel -> {"a/c", "b/c", "\[CapitalDelta]"}, ViewPoint -> Above,
11  ColorFunction -> "TemperatureMap",
12  PlotLabel -> "Diagrama de fase de 6VM", FaceGrids -> None,
13  Boxed -> False]

```

### 10.4. Código para el modelo de Heisenberg

```

1 definir matrices de pauli
2
3 {sx, sy, sz} = PauliMatrix[{1, 2, 3}];
4

```

```

5 definir la base en sz
6
7 em := {{0}, {1}}
8 ep := {{1}, {0}}
9
10 definir operadores escalera
11
12 sp = 1/2*(sx + I*sy)
13 sm = 1/2*(sx - I*sy)
14
15 definir operadores de Pauli
16
17 \[Sigma]x[N_, j_] := KroneckerProduct @@
18   Insert[Table[IdentityMatrix[2], {N - 1}], sx, Mod[j, N, 1]]
19
20 \[Sigma]y[N_, j_] := KroneckerProduct @@
21   Insert[Table[IdentityMatrix[2], {N - 1}], sy, Mod[j, N, 1]]
22
23 \[Sigma]z[N_, j_] := KroneckerProduct @@
24   Insert[Table[IdentityMatrix[2], {N - 1}], sz, Mod[j, N, 1]]
25
26 operadores escalon
27
28 \[Sigma]p[N_, j_] := KroneckerProduct @@
29   Insert[Table[IdentityMatrix[2], {N - 1}], sp, Mod[j, N, 1]]
30
31 \[Sigma]m[N_, j_] := KroneckerProduct @@
32   Insert[Table[IdentityMatrix[2], {N - 1}], sm, Mod[j, N, 1]]
33
34 necesitamos definir la base
35
36 Ep[n_] := KroneckerProduct @@ Table[{{1}, {0}}, {n}]
37 Em[n_] := KroneckerProduct @@ Table[{{0}, {1}}, {n}]
38
39 notacion compacta
40
41 s[list_, n_] :=
42   Dot @@ Table[\[Sigma]m[n, list[[j]]], {j, 1, Length[list]}.Ep[n]
43
44 notaciones
45
46 ToSpins[expr_] :=
47   expr /.
48     st : s[sp__] :> StringJoin["|",
49     StringJoin @@ (ToString /@ st /. "1" -> "-" /. "-1" -> "+"), ">"];

```

```

50
51 definir la base
52
53 Basis[L_] := Basis[L] = s @@ # & /@ Tuples[{-1, 1}, 1 {L}]
54
55 Tomamos un estado escrito en la base y lo convertimos a vector
56
57 ToVector[state_, L_] := Coefficient[state, Basis[L]]
58
59 Y al revés
60
61 FromVector[vector_, L_] :=
62 Plus @@ (Times @@ # & /@ Thread[{vector, Basis[L]}])
63
64 el hamiltoniano
65
66 HXXZ[\[CapitalDelta]_, N_, h_] := -J/2 (\!\(
67 \*UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \((j = 1)\), \((N -
68 1)\)]\(\(\[Sigma]x[N, j] . \[Sigma]x[N, j + 1] + \[Sigma]y[N,
69 j] . \[Sigma]y[N,
70 j + 1] + \[CapitalDelta]*\[Sigma]z[N, j] . \[Sigma]z[N,
71 j + 1]\)\)\) + \[Sigma]x[N, N].\[Sigma]x[N, 1] + \[Sigma]y[N,
72 N].\[Sigma]y[N, 1] + \[CapitalDelta]*\[Sigma]z[N, N].\[Sigma]z[N, 1]) -
73 h (\!\(
74 \*UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \((j = 1)\), \((N)\)]\(\(\[Sigma]z[N, j]\)\)\)
75
76 Pruebas
77
78 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
79 Energía de una cadena XXZ sin espines volteados
80
81 For[i = 2, i <= 8, i++,
82 Print["N = " + i +
83 LinearSolve[s[{}], i], HXXZ[\[CapitalDelta], i, h].s[{}], i]]]
84
85
86 Subscript[E, 0] = -N(J\[CapitalDelta]/2+h)
87
88 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
89
90 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
91 Energía de una cadena XXZ con M = 1 espines volteados
92
93 \[Psi][n_] := \!\(
94 \*UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \((j = 1)\), \((n)\)]\((A*Exp[I*k*j]*s[{}], n)\)\)

```

```

95
96 For[l = 2, l <= 8, l++,
97   Print["N = " + l ,
98     Solve[(HXXZ[\[CapitalDelta], l, h].\[Psi][1])[2] == En*\[Psi][1][2],
99       En]]
100
101 E=Subscript[E, 0]+2(h+J\[CapitalDelta])-2J Cos[k]
102
103 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
104
105 Magnetizacion
106
107 Sz[n_] := 1/n \!\(
108 \*UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \(\j = 1\), \(\n\)]\(\(\[Sigma]z[n, j]\)\)\)
109
110 min\[Lambda] = Min[Eigensystem[HXXZ[3, 4, 0] /. J -> 1][[1]]]
111
112 posicion =
113   Position[Eigensystem[HXXZ[3, 4, 0] /. J -> 1][[1]], min\[Lambda]][[1]]
114
115 minVector = Eigensystem[HXXZ[3, 4, 0] /. J -> 1][[2]][[posicion]]
116
117 s[{} , 4]
118
119 minVector.Sz[4].Transpose[minVector]
120
121 ahora si
122
123 \[Lambda]min[\[CapitalDelta]_, n_, h_] :=
124   Min[Eigensystem[HXXZ[\[CapitalDelta], n, h] /. J -> 1][[1]]]
125
126 pos[\[CapitalDelta]_, n_, h_] :=
127   Position[Eigensystem[HXXZ[\[CapitalDelta], n, h] /. J -> 1][[
128     1]], \[Lambda]min[\[CapitalDelta], n, h]][[1]]
129
130 vectorBae[\[CapitalDelta]_, n_, h_] :=
131   Eigensystem[HXXZ[\[CapitalDelta], n, h] /. J -> 1][[2]][[
132     pos[\[CapitalDelta], n, h]]]
133
134 mag[\[CapitalDelta]_, n_, h_] :=
135   vectorBae[\[CapitalDelta], n, h].Sz[n].Transpose[
136     vectorBae[\[CapitalDelta], n, h]]
137
138 valores = {};
139

```

```

140 For\[CapitalDelta] = -3, \[CapitalDelta] <= 3, \[CapitalDelta]++,
141   AppendTo[valores, mag\[CapitalDelta], 4, 0]]
142
143 valores
144
145 Plot[mag\[Delta], 4, 0], {\[Delta], -5, 5},
146   AxesLabel -> {"\[CapitalDelta]", "M"}]
147
148 Plot[mag\[Delta], 4, 2], {\[Delta], -5, 5},
149   AxesLabel -> {"\[CapitalDelta]", "M"}]
150
151 Plot[mag[-2, 4, h], {h, -5, 5}, AxesLabel -> {"h", "M"}]
152
153 Plot[mag[2, 4, h], {h, -5, 5}, AxesLabel -> {"h", "M"}]
154
155 Plot3D[mag\[CapitalDelta], 4, h], {\[CapitalDelta], -5, 3}, {h, -5,
156   5}, AxesLabel -> Automatic, ViewPoint -> {0, 0, 2},
157   ColorFunction -> Hue, PlotLegends -> Automatic]
158
159 Equivalencia
160
161 Operador de spin total
162
163 Sz[n_] := 1/n \!\(
164   \*UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \(\j = 1\), \(\n\)]\(\(\[Sigma]z[n, j]\)\)\);
165
166 Eigensystem[HXXZ[5, 4, 0] /. J -> 1]
167
168 Ferroelectrico en 6 VM : a > b + c
169
170 \[CapitalDelta] > 1 : \[CapitalDelta] = 5
171
172 \[Lambda]min = Min[Eigenvalues[HXXZ[5, 4, 0]] /. J -> 1]
173
174 Position[Eigenvalues[HXXZ[5, 4, 0]] /. J -> 1, \[Lambda]min]
175
176 Vmin = Eigenvectors[HXXZ[5, 4, 0]][[2]]
177
178 FromVector[Transpose[{Vmin}], 4] // ToSpins
179
180 Magntizacion
181
182 Vmin.Sz[4].Vmin
183
184 Vmin2 = Eigenvectors[HXXZ[2, 4, 0]][[3]]

```

```

185
186 FromVector[Transpose[{Vmin2}], 4] // ToSpins
187
188 Magnetizacion
189
190 Vmin2.Sz[4].Vmin2
191
192
193 Ferroelectrico 6VM: b > a+c
194
195 0 > \[CapitalDelta] > (a-c)/(a+c): \[CapitalDelta]= -0.2, h=0
196
197 \[Lambda]min = Min[Eigenvalues[HXXZ[-0.2, 4, 0]] /. J -> 1]
198
199 Position[Eigenvalues[HXXZ[-0.2, 4, 0]] /. J -> 1, \[Lambda]min]
200
201 Vmin = Eigenvectors[HXXZ[-0.2, 4, 0] /. J -> 1][[1]]
202
203 FromVector[Transpose[{Vmin}], 4] // ToSpins
204
205 Magnetizacion
206
207 Vmin.Sz[4].Vmin
208
209
210 Ferroelectrico 6VM: b > a+c
211
212 0 > \[CapitalDelta] > (a-c)/(a+c): \[CapitalDelta]= -0.2, h>=2
213
214 \[Lambda]min = Min[Eigenvalues[HXXZ[-0.2, 4, 2]] /. J -> 1]
215
216 Position[Eigenvalues[HXXZ[-0.2, 4, 2]] /. J -> 1, \[Lambda]min]
217
218 Vmin = Eigenvectors[HXXZ[-0.2, 4, 2] /. J -> 1][[2]]
219
220 FromVector[Transpose[{Vmin}], 4] // ToSpins
221
222 Magnetizacion
223
224 Vmin.Sz[4].Vmin
225
226
227 Ferroelectrico 6VM: b > a+c
228
229 0 < \[CapitalDelta] < (a-c)/(a+c): \[CapitalDelta]= 0.2,h=0

```

```

230
231 \[Lambda]min = Min[Eigenvalues[HXXZ[0.2, 4, 0] /. J -> 1]]
232
233 Position[Eigenvalues[HXXZ[0.2, 4, 0] /. J -> 1], \[Lambda]min]
234
235 Vmin = Eigenvectors[HXXZ[0.2, 4, 0] /. J -> 1][[2]]
236
237 FromVector[Transpose[{Vmin}], 4] // ToSpins
238
239 Magnetizacion
240
241 Vmin.Sz[4].Vmin
242
243
244 Ferroelectrico 6 VM : b > a + c
245
246 0 < \[CapitalDelta] < (a-c)/(a+c): \[CapitalDelta]= 0.2, h>=1
247
248 \[Lambda]min = Min[Eigenvalues[HXXZ[0.2, 4, 1] /. J -> 1]]
249
250 Position[Eigenvalues[HXXZ[0.2, 4, 1] /. J -> 1], \[Lambda]min]
251
252 Vmin = Eigenvectors[HXXZ[0.2, 4, 1] /. J -> 1][[1]]
253
254 FromVector[Transpose[{Vmin}], 4] // ToSpins
255
256 \[Lambda]min = Min[Eigenvalues[HXXZ[0, 3, 0] /. J -> 1]]
257
258 Position[Eigenvalues[HXXZ[0, 3, 0] /. J -> 1], \[Lambda]min]
259
260 Vmin = Eigenvectors[HXXZ[0, 3, 0] /. J -> 1][[1]]
261
262 FromVector[Transpose[{Vmin}], 3] // ToSpins
263
264 Vmin.Sz[3].Vmin
265
266
267 Desordenado 6VM: a,b,c < 1/2 (a+b+c)
268
269 Caso 0: a=b=c=1: \[CapitalDelta]=0, n=4
270
271 \[Lambda]min = Min[Eigenvalues[HXXZ[0, 4, 0] /. J -> 1]]
272
273 Position[Eigenvalues[HXXZ[0, 4, 0] /. J -> 1], \[Lambda]min]
274

```

```

275 Vmin = Eigenvectors[HXXZ[0, 4, 0] /. J -> 1][[1]]
276
277 FromVector[Transpose[{Vmin}], 4] // ToSpins
278
279 Magnetizacion
280
281 Vmin.Sz[4].Vmin
282
283
284 Antiferroelectrico 6VM: c > a+b
285
286 \[CapitalDelta]<1:\[CapitalDelta]=-2
287
288 \[Lambda]min = Min[Eigenvalues[HXXZ[-2, 4, 0] /. J -> 1]]
289
290 Position[Eigenvalues[HXXZ[-2, 4, 0] /. J -> 1], \[Lambda]min]
291
292 Vmin = Eigenvectors[HXXZ[-2, 4, 0] /. J -> 1][[1]]
293
294 FromVector[Transpose[{Vmin}], 4] // ToSpins
295
296 Magnetizacion
297
298 Vmin.Sz[4].Vmin
299
300 Otro
301
302 \[Lambda]min = Min[Eigenvalues[HXXZ[-2, 5, 0] /. J -> 1]]
303
304 Position[Eigenvalues[HXXZ[-2, 5, 0] /. J -> 1], \[Lambda]min]
305
306 Vmin = Eigenvectors[HXXZ[-2, 5, 0] /. J -> 1][[1]]
307
308 FromVector[Transpose[{Vmin}], 5] // ToSpins
309
310 Magnetizacion
311
312 Simplify[Vmin.Sz[5].Vmin]
313
314 Uno mas
315
316 \[Lambda]min = Min[Eigenvalues[HXXZ[-2, 6, 0] /. J -> 1]]
317
318 Position[Eigenvalues[HXXZ[-2, 6, 0] /. J -> 1], \[Lambda]min]
319

```

```

320 Vmin = Eigenvectors[HXXZ[-2, 6, 0] /. J -> 1][[1]]
321
322 Magnetizacion
323
324 Vmin.Sz[6].Vmin
325
326 Ultimo... lo prometo
327
328 \[Lambda]min = Min[Eigenvalues[HXXZ[-2, 7, 0] /. J -> 1]]
329
330 Position[Eigenvalues[HXXZ[-2, 7, 0] /. J -> 1], \[Lambda]min]
331
332 Vmin = Eigenvectors[HXXZ[-2, 7, 0] /. J -> 1][[1]]
333
334 FromVector[Transpose[{Vmin}], 7] // ToSpins
335
336 Magnetizacion
337
338 FullSimplify[Vmin.Sz[7].Vmin]

```