

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



**EL ANSATZ DE BETHE APLICADO AL MODELO DE
HEISENBERG CON CADENAS DE ESPÍN $1/2$ Y SUS
TRANSICIONES DE FASE.**

TRABAJO DE GRADUACIÓN PRESENTADO POR
GONZALO MORÁN COLOM
PARA OPTAR AL GRADO ACADÉMICO
DE LICENCIADO EN FÍSICA

GUATEMALA
2019

**EL ANSATZ DE BETHE APLICADO AL MODELO DE
HEISENBERG CON CADENAS DE ESPÍN $1/2$ Y SUS
TRANSICIONES DE FASE.**

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



**EL ANSATZ DE BETHE APLICADO AL MODELO DE
HEISENBERG CON CADENAS DE ESPÍN $1/2$ Y SUS
TRANSICIONES DE FASE.**

TRABAJO DE GRADUACIÓN PRESENTADO POR
GONZALO MORÁN COLOM
PARA OPTAR AL GRADO ACADÉMICO
DE LICENCIADO EN FÍSICA

GUATEMALA
2019

Vo.Bo.:



Giovanni Ramírez García

Tribunal Examinador:



Zaida del Rosario Urrutia del Cid



Ángel Giovanni Ramírez García



Juan Diego Chang Santizo

Fecha de aprobación:

Guatemala, Mayo de 2019

Prefacio

Cuando empecé a estudiar las cadenas de espines y los fundamentos de la física de materia condensada como preparación para realizar este trabajo, me pareció útil empezar con una introducción detallada sobre el marco en el cual se creó el Modelo de Heisenberg. Me percaté que antes de describir el Modelo de Heisenberg debía presentar el fenómeno fundamental de la interacción de intercambio, su álgebra y las ecuaciones y los operadores; de igual manera con el Modelo de Heisenberg. El ánimo por hacerlo así me nació porque me costó interiorizar los conceptos fundamentales y las razones por las cuales se hacen y se prueban ciertas propiedades y fue difícil encontrar trabajos previos que resumieran de manera completa, directa y explícita todos los temas aquí expuestos.

¿Qué es la física de la materia condensada? Marder (2011) nos expone que con el descubrimiento de la mecánica cuántica se empezó a tener esperanzas de explicar el mundo familiar a partir de ecuaciones de escala atómica. A la Física de Materia Condensada al principio se le llamó *Física de Estado Sólido*, cuando se conformó de la División de Física de Estado Sólido por parte de la Sociedad Estadounidense de Física en 1947. Luego de una década de investigación y muchos descubrimientos después, se hizo evidente que el término *Física del Estado Sólido*, empezaba a quedar pequeño para el campo, ya que se había iniciado el estudio de los metales líquidos, como el Helio líquido o los cristales líquidos. En 1963, Busch empezó a editar la revista especializada en Física titulada *Physik der Kondensierten Materie* que se traduce al castellano como *Física de la Materia Condensada*.

A partir de este punto, el nuevo término empezó a utilizarse más y más a menudo hasta que a finales de la década de 1970 la Sociedad Americana de Física cambió el nombre de su División de Estado Sólido por la de División de Materia Condensada, en respuesta al uso generalizado del término entre los físicos del mundo entero, según Marder (2011).

Actualmente existe un grupo de investigación de materia condensada en la Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de San Carlos de Guatemala, al cual fui invitado a participar como representante de la Universidad del Valle de Guatemala. En el mismo, cada uno de los participantes se le asigna un tema a desarrollar durante el año. Es importante que haya representantes de la Universidad del Valle de Guatemala en el grupo de investigación de la USAC porque el objeto es aportar a la ciencia y poder realizar investigaciones, así como contribuir al desarrollo de la investigación en física teórica en Guatemala.

Tuve la suerte de que el Dr. Giovanni Ramírez aceptara ser mi asesor para este trabajo porque, además de sus excelentes características humanas, él es el director del grupo de materia condensada

en la Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de San Carlos de Guatemala y ha estudiado durante muchos años los tópicos aquí expuestos. También agradezco al Msc. Juan Diego Chang por toda la ayuda prestada y el tiempo dedicado a aclararme múltiples dudas así como a sugerirme utilizar el procesador de texto LyX basado en LaTeX que utilicé finalmente en este trabajo y que tanto me facilitó su realización.

Agradezco principalmente a mis padres, Gonzalo y Elisa, por el apoyo incondicional que hizo posible que yo pudiera estudiar física en un país lleno de contrastes socioeconómicos como mi patria, Guatemala. También agradezco a mi esposa Tikalia que me inspiró a retomar el camino de la academia y a realizar este trabajo. A mi hermana Elisa que siempre creyó en mí. A Zaida Urrutia le agradezco todo el soporte y toda la atención brindada así como a su asistente Olga Castellanos. A mis profesores y a mis compañeros que colaboraron para que haya llegado hasta aquí.

Índice general

Lista de figuras	XI
Lista de cuadros	XIII
Resumen	XV
1. Introducción	1
2. Objetivos	3
3. El Modelo de Heisenberg	5
3.1. Retículos cristalinos unidimensionales.	5
3.2. El Modelo de Heisenberg y las cadenas de espines.	6
3.2.1. Interacción de intercambio.	7
3.2.2. Momento angular intrínseco o espín.	10
3.2.3. Partícula única de espín $\frac{1}{2}$	13
3.2.4. Dos partículas interactuantes con espín $\frac{1}{2}$	14
3.2.5. Conmutadores y números cuánticos.	16
3.2.6. La interpretación física de la interacción de Heisenberg para dos partículas con espín $\frac{1}{2}$	18
3.2.7. Arreglo infinito de espines	19
3.2.8. Definición del modelo de Heisenberg.	20
3.3. Variaciones del modelo de Heisenberg	25
3.4. Diagonalización para un retículo con dos sitios	26
3.5. Aplicaciones recientes del modelo de Heisenberg	28
3.5.1. Información cuántica	29
3.5.2. Computación cuántica	29
3.5.3. Redes tensoriales (TN)	31
3.5.3.1. Redes tensoriales sin dimensiones extra	32
3.5.3.2. Redes tensoriales con dimensiones extra	34

4. El Ansatz de Bethe y la descripción del espectro de energía del modelo de Heisenberg XXZ	37
4.1. Aplicación del Ansatz de Bethe para el modelo de Heisenberg XXX	37
4.2. Aplicación del Ansatz de Bethe para el modelo de Heisenberg XXZ	51
4.2.1. Cálculo de la energía del estado base $M = 0$ y la aplicación Ansatz de Bethe primer estado excitado $M = 1$	56
4.2.2. Segundo estado excitado $M = 2$	57
4.2.3. Tercer estado excitado $M = 3$	59
4.2.4. Caso sin adyacencia (a)	59
4.2.5. Casos con adyacencia (b) (c) y (d)	59
4.2.6. Para M arbitrario	60
4.3. La parametrización de Orbach	62
4.3.1. Caso ferromagnético $\Delta = 1$	62
4.3.2. Caso antiferromagnético $\Delta = -1$	63
4.4. Descripción del espectro de energía para la cadena de espines de Heisenberg XXZ .	64
4.4.1. Estado base y su energía	64
4.4.2. Estados excitados	66
5. Fases cuánticas y transiciones de fase cuánticas	69
5.1. Transiciones de fase	69
5.2. Transiciones de fase cuánticas	72
5.3. Transiciones de fase cuánticas en el modelo de Heisenberg XXZ	76
6. Conclusiones	81
6.1. El espectro de energía de una cadena cuántica de espín $1/2$ de Heisenberg XXZ .	81
6.2. Descripción del modelo de Heisenberg.	81
6.3. Las interacciones entre partículas de espín $1/2$ y su influencia en la dinámica de una cadena de espines.	81
6.4. Análisis del método de Ansatz de Bethe utilizando el modelo de Heisenberg en su variante XXX.	82
6.5. Aplicación del método de Ansatz de Bethe al modelo de Heisenberg en su variante XXZ.	82
6.6. Aplicaciones recientes del modelo de Heisenberg.	82
6.6.1. Información cuántica	83
6.6.2. Computación cuántica	83
6.6.3. Redes tensoriales	83
6.7. Las transiciones de fase clásicas y cuánticas	83

6.8. Las transiciones de fase cuánticas de cadena cuántica de espín $1/2$ descrita por el modelo de Heisenberg XXZ	84
7. Recomendaciones	85
8 Bibliografía	85
9. Anexos	91
9.1. Programa para diagonalización del hamiltoniano de Heisenberg XXZ	91

Índice de figuras

3.1. Cadena de espines con $N = 23$	7
3.2. Magnetización y espín total vs. Temperatura de un ferromagneto.	19
3.3. Cubo de espines.	20
3.4. Cuadrado de espines.	20
3.5. Cadena de espines.	21
3.6. Ejemplo de un estado cuántico de 9 grados de libertad.	31
3.7. Ejemplos de estados TN	33
3.8. Ejemplos de estados TN del tipo TTN	35
5.1. Diagrama de fase de un fluido.	70
5.2. Curva de presión de vapor.	71
5.3. Gráficas de magnetización Vs. Campo magnético externo.	72
5.4. Diagrama de fase de un magneto uniaxial.	73
5.5. Magnetización espontánea Vs. Temperatura crítica.	74
5.6. Magnetización en campo externo nulo Vs. Temperatura crítica	75
5.7. Energía Vs. Constante de acoplamiento, con cruce de nivel.	76
5.8. Energía Vs. Constante de acoplamiento, sin cruce de nivel.	76
5.9. La magnetización por sitio vs. la anisotropía Δ para una cadena de 8 sitios.	78
5.10. La magnetización por sitio vs. anisotropía $-\Delta$ para una cadena de 8 sitios.	79
9.1.	92

Índice de cuadros

3.1. Resumen de estados de un sistema de dos partículas con espín $\frac{1}{2}$ entrelazadas con la interacción de Heisenberg.	18
3.2. Reglas de aplicación de los operadores intercambio sobre los vectores base $ \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle$, con $\sigma_n = +, -$	23

Resumen

Los sistemas físicos que se trabajaron fueron cadenas unidimensionales con N partículas con espín $1/2$, en un retículo cristalino con condiciones periódicas en la frontera, el cual retiene cada una de estas partículas en una posición fija. El sistema se encuentra en el cero absoluto. Al inicio del trabajo *On the Theory of Metals* Bethe (2011), menciona que Werner Heisenberg definió dentro de su Modelo las cadenas de espines modelándolas matemáticamente por medio de matrices de Pauli. Como se verá más adelante, el hamiltoniano, correspondiente a las variantes de este Modelo es, en su forma matricial de tamaño $2^N \times 2^N$ y le corresponde un espacio de Fock.

Para describir el espectro de energía del hamiltoniano de una cadena de espines de Heisenberg XXX, Bethe desarrolló una técnica, ahora llamada Ansatz de Bethe en su honor. Esta técnica permite resolver sectores del hamiltoniano y hallar sus eigenfunciones y eigenvalores sin necesidad de diagonalizarlo, sino solucionando un conjunto de ecuaciones algebraicas propias para cada sector; la solución de estas ecuaciones no es trivial.

Como expone Baxter (1982), el Modelo reticular de una cadena de espines de Heisenberg es simplificado, sin embargo ha servido como base para explicar propiedades magnéticas en cristales. Marder (2011) nos relata que dentro de dichos cristales existen magnetos de dimensión restringida que interactúan con otros magnetos de la misma clase dentro del cristal lo que deriva en un acoplamiento magnético mucho más fuerte en una dimensión que en las restantes dos dimensiones. La superconductividad, según Sachdev (2011), se comprobó que está íntimamente relacionada con las fluctuaciones magnéticas posibles únicamente en Modelos unidimensionales y que, a pesar de que se estudian estos Modelos en cero absoluto, sucede que en ocasiones existen transiciones de fase a temperaturas finitas.

El Ansatz de Bethe consiste en aproximar la solución del hamiltoniano correspondiente al Modelo de Heisenberg por medio de una superposición de ondas planas. Franchini (2016) explica que Bethe encontró que se favorecía la existencia de pares de espines con la misma orientación uno a la par del otro, opuesto a tener pares de espines antiparalelos. Estos pares de espines de igual dirección tendrían la misma energía, sin importar su orientación, algo que también deja claro Feynman (1982).

El objetivo general del trabajo es describir el espectro de energía de la cadena cuántica de N elementos de espín $1/2$ que se encuentra descrita por el Modelo de Heisenberg en su variante XXZ utilizando el método analítico del Ansatz de Bethe. Utilizando dicho método, encontramos que una cadena de espines de Heisenberg XXZ presenta un espectro de baja energía que exhibe

degeneración y cuya magnitud depende de la longitud de la cadena. Esto implica que el Modelo presenta magnetización incluso a temperatura cero absoluto y además exhibe transiciones de fase al variar el valor de la anisotropía.

Como objetivos específicos de este trabajo, se describe el Modelo de Heisenberg y algunas de sus variantes; se describen las propiedades y la naturaleza de las interacciones entre partículas de espín $1/2$ y cómo influyen estas en la dinámica de una cadena de espines; se analizó paso a paso el método de Ansatz de Bethe utilizando el Modelo de Heisenberg en su variante XXX hasta el sector correspondiente al tercer estado excitado; se aplicó el método de Ansatz de Bethe al Modelo de Heisenberg en su variante XXZ hasta generalizarlo para cualquier sector del hamiltoniano. Se introdujeron algunas de las aplicaciones de Modelo de Heisenberg que actualmente se están estudiando e implementando en desarrollo de nuevas tecnologías; analizamos las transiciones de fase cuánticas que suceden en una cadena cuántica de espín $1/2$ descrita por el Modelo de Heisenberg XXZ por medio del desarrollo de un programa en entorno Python que simula el comportamiento de una cadena cuántica de espín $1/2$ descrita por el Modelo de Heisenberg XXZ de 8 partículas y que grafica los diagramas de fase para poder analizar las transiciones de fase cuánticas de la cadena.

1 Introducción

El objetivo general del trabajo es describir el espectro de energía de la cadena cuántica de N elementos de espín $1/2$ que se encuentra descrita por el Modelo de Heisenberg en su variante XXZ utilizando el método analítico del Ansatz de Bethe.

El Modelo de Heisenberg XXZ se basa en una cadena cuántica de N elementos de espín $1/2$, cuyas interacciones muestran una anisotropía sobre una dirección específica. Dejando variar la constante de acoplamiento anisotrópica inducimos un diferente ordenamiento en el sistema, para poder caracterizar dos fases: una antiferromagnética y una ferromagnética.

Según Marder (2011) y Sachdev (2011) el ferromagnetismo es un tópico de extenso estudio en la física de materia condensada. Para poder explicar este fenómeno en estas cadenas de espines, se puede utilizar el método Ansatz de Bethe, para lo cual se deben comprender ampliamente los fenómenos a describir y los métodos propuestos para su solución. Cabe mencionar que varios autores, entre ellos Blundell (2011) y Franchini (2016), coinciden en que el método de Ansatz de Bethe es ampliamente utilizado en la actualidad y que los Modelos que ayudan a resolver tienen muchas aplicaciones por lo cual es importante conocerlos a profundidad para un físico que quiere dedicarse a materia condensada. Son los objetivos específicos de este trabajo describir los espectros de energía de los hamiltonianos para los Modelos de Heisenberg XXX y XXZ utilizando dicho método, ya que este permite realizar la tarea enfocándose en los estados de interés del hamiltoniano, ya que analizar el espectro completo puede volverse muy complicado.

Según Yeomans (1992), entre las aplicaciones de dichos Modelos está el estudio de transiciones de fase de la materia, que consiste en estudiar el cambio abrupto del estado cuántico de un material, descrito con diversos tipos de retículos, cuya demostración para el Modelo de Heisenberg anisotrópico es el objetivo general de este trabajo. Recientemente se sigue utilizando el Modelo de Heisenberg en el campo de la información cuántica, donde sirve como base para estudiar distintas topologías de propagación de información Nachtergaele, *et al* (2018). También en el campo de la computación cuántica, en el cual se estudian las tareas de procesamiento de información que pueden realizar sistemas cuánticos y sus circuitos cuánticos; en este contexto se utiliza el Modelo de Heisenberg para describir el funcionamiento de baja energía de los mismos, Bellucci, *et al* (2006), así como para describir los posibles algoritmos dentro de un computador cuántico De Raedt, *et al* (2016). En el campo de las redes tensoriales, se definen una colección de tensores cuyos índices se encuentran conectados en un patrón de red; estas redes se pueden utilizar para representar funciones de onda correspondientes a N partículas que al ser representadas matemáticamente les

corresponde un espacio vectorial similar al del Modelo de Heisenberg, por lo tanto este mismo es utilizado como Modelo de juguete para probar distintas formas de extraer información de dichos sistemas, como expone Orús (2014).

Ya hubo trabajos de graduación realizados por estudiantes del departamento de Física de la Universidad Del Valle de Guatemala sobre física de materia condensada que se basaron en el Modelo de Ising, como son los casos del Lic. Rodrigo Castillo y del Lic. José Pablo Linares, ambos asesorados por el Dr. Alvaro Veliz Osorio. Es mi intención continuar con el aporte en física teórica de materia condensada investigando el Modelo de Heisenberg, utilizando el método analítico del Ansatz de Bethe para su solución, logrando así aportar mayor información para las siguientes iteraciones de estudiantes de física.

También es importante notar que el premio Nobel de Física de 2016 fue otorgado a tres científicos que desarrollaron métodos analíticos para resolver una versión del Modelo de Heisenberg que describe fases de la materia que no se comprendían aún, que tienen como consecuencia efectos tales como la superconductividad y la super fluidez, esto según la Royal Swedish Academy of Sciences (2016).

La descripción general de este trabajo es la siguiente. El primer capítulo está dedicado al Modelo de Heisenberg, en el cual presentaremos los detalles de la interacción de intercambio como antesala a la presentación del Modelo de Heisenberg generalizado, y luego se presentarán sus variantes; dedicamos una sección a exponer algunas de las aplicaciones recientes del Modelo. En segundo lugar se expondrá el Modelo de Heisenberg XXX y se le aplicará el método del Ansatz de Bethe, replicando el resultado original de Bethe y contrastándolo en su primer estado excitado a una diagonalización exacta del hamiltoniano. En tercer lugar se aplicará el Ansatz de Bethe al Modelo de Heisenberg del tipo XXZ y se describirá el espectro de energías del Hamiltoniano así como la manera que se pueden construir sus eigenfunciones. Y en cuarto lugar se presentarán los conceptos de las transiciones de fase clásicas y de las transiciones de fase cuánticas y se interpretarán los posibles escenarios en donde los Modelos de Heisenberg resueltos en la segunda y tercera parte tienen o no transiciones de fase. Los resultados se contrastarán con resultados obtenidos de métodos computacionales para resolver los mismos Modelos.

2 Objetivos

2.1 General

Describir el espectro de energía de la cadena cuántica de N elementos de espín $1/2$ que se encuentra descrita por el Modelo de Heisenberg en su variante XXZ utilizando el método analítico del Ansatz de Bethe.

2.2 Específicos

1. Introducir el Modelo de Heisenberg y algunas de sus variantes.
2. Describir las propiedades y la naturaleza de las interacciones entre partículas de espín $1/2$ y como influyen estas en la dinámica de una cadena de espines.
3. Analizar paso a paso el método de Ansatz de Bethe utilizando el Modelo de Heisenberg en su variante XXX.
4. Aplicar el método de Ansatz de Bethe al Modelo de Heisenberg en su variante XXZ.
5. Introducir algunas de las aplicaciones de Modelo de Heisenberg que actualmente se están estudiando y aplicando en desarrollo de nuevas tecnologías.
6. Introducir al lector sobre las transiciones de fase clásicas y las transiciones de fase cuánticas.
7. Desarrollar un programa en entorno Python para modelar el comportamiento de una cadena cuántica de espín $1/2$ descrita por el Modelo de Heisenberg XXZ de 8 partículas para graficar diagramas de fase y así poder analizarl sus transiciones de fase cuánticas.

3 El Modelo de Heisenberg

3.1. Retículos cristalinos unidimensionales.

En el instante que pensamos en un cristal, nos viene a la mente de primero un cuarzo, o un diamante o un grano de sal; no se nos ocurre un trozo de algún metal, material que también tiene estructura cristalina; por su maleabilidad, los metales esconden su estructura cristalina porque pueden ser moldeados macroscópicamente. Según Ashcroft, *et al* (1976), la verdadera prueba de la naturaleza cristalina de los metales es a nivel microscópico, encontrando sus iones ordenados en un arreglo periódico. Las consideraciones geométricas de estos arreglos están implícitas en el análisis de muchos tópicos de la física de materia condensada.

Un arreglo periódico regular en el cual se distribuyen los iones o espines, se llama retículo. Existen muchos materiales sólidos en los cuales sus átomos o moléculas están ubicadas de una manera perfectamente espaciada y periódica. Un cristal macroscópico se constituye de repeticiones de su unidad periódica más pequeña, llamada celda unitaria. Por lo tanto, al trasladarse sobre el cristal en un número entero del tamaño de la celda unitaria, el cristal eventualmente coincide en sí mismo. Esta propiedad es fundamental en el Ansatz de Bethe y se llama *simetría traslacional*. Los cristales son entonces materiales ordenados que muestran interacción entre sus constituyentes tanto a larga distancia como a corta distancia entre ellos. Según Goldenfeld (1992), en los Modelos estudiados en este trabajo, la expresión «a corta distancia» se refiere al orden de los primeros vecinos. Dada la periodicidad del retículo, los estados energéticos dentro del cristal se extienden y por lo tanto hay libre circulación de los electrones Ver el ashcroft y forma como calculas los coeficientes de conductividad.

¿Por qué retículos cristalinos en una dimensión? ¿Por qué restringirse a un Modelo unidimensional? Consideremos un simple problema con una persona caminando a lo largo de un sendero. El sendero es visiblemente recto y el desplazamiento se mide en un eje, sea este el eje x . Tomando medida del tiempo y del desplazamiento total recorrido se calcula la velocidad promedio de la persona en la distancia x . Se obtuvo un valor válido del movimiento en una dimensión de una persona que en realidad es tridimensional. Esa es la idea de los retículos unidimensionales, que sirven para describir fenómenos unidimensionales de objetos tridimensionales. Por ejemplo, N átomos arreglados en un retículo, considerando los electrones de valencia de los mismos para describir el fenómeno de la conducción de electrones, que sucede a lo largo de la cadena sobre un eje únicamente, es un fenómeno unidimensional de átomos que son tridimensionales.

Según Franchini (2016), considerar los Modelos en espacio de mayor dimensión, como el Modelo

de Ising, pueden proyectarse en Modelos unidimensionales porque presentan las mismas transiciones de fase.

3.2. El Modelo de Heisenberg y las cadenas de espines.

El Modelo de Heisenberg nace de la mecánica estadística con el objetivo de estudiar los puntos críticos y las transiciones de fase de sistemas magnéticos, dentro de los cuales los espines son considerados como objetos cuánticos. Dicho Modelo utiliza el concepto de magnetos atómicos y de cómo estos se combinan para formar sistemas que tienen propiedades magnéticas macroscópicas. Dado que el momento magnético de un átomo está estrechamente asociado con su momento angular o espín, es necesario estudiar los espines para entender el magnetismo macroscópico. A nivel atómico, las propiedades de los átomos se describen en términos de la mecánica cuántica, por lo tanto debemos estudiar espines cuánticos y sus interacciones. Analizaremos la naturaleza de la interacción de intercambio y distinguiremos la interacción ferromagnética y antiferromagnética. Parkinson, *et al* (2010). El hamiltoniano general del Modelo de Heisenberg es,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{n=1}^N \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} - h \sum_{n=1}^N \mathbf{S}_n, \quad (3.1)$$

donde J es la constante de acoplamiento para una cadena unidimensional de N elementos representados por los operadores de espín \mathbf{S}_n sujetos a una condición de frontera periódica: $\mathbf{S}_{N+1} = \mathbf{S}_1$. h representa un campo magnético externo que en este trabajo no se considerará.

Parkinson, *et al* (2010), nos expone que los sistemas cuánticos de espines aparecen cuando estudiamos el magnetismo. Un magneto muestra ciertas características como tener atracción a objetos metálicos, porque está hecho de átomos en los cuales todos o algunos de ellos son magnetos diminutos en sí mismos. Estos magnetos atómicos producen los efectos observados cuando todos o su mayoría se alinean en la misma dirección de tal forma que el efecto neto es la suma de todos los magnetos atómicos y entonces es de escala macroscópica. Para que estos magnetos atómicos estén alineados debe haber una fuerza entre ellos. Una posibilidad es que esta fuerza sea la interacción normal entre dipolos magnéticos que tiende a alinear dos de ellos paralela o antiparalelamente, o bien a algún ángulo arbitrario, dependiendo de sus posiciones relativas. Esta es una interacción de larga distancia que se extiende varios espacios atómicos del retículo cristalino. Sin embargo, la interacción de dipolo magnético es demasiado débil para explicar el fenómeno del magnetismo a temperatura ambiente. Si esta fuera la única interacción posible entre los átomos, el magnetismo ocurriría únicamente cerca del cero absoluto, donde dominan las fluctuaciones cuánticas.

Al considerar el planteamiento de Franchini (2016), un retículo cuya celda unitaria contiene un espín y que este retículo forma una fila de celdas unitarias a lo largo de un eje únicamente. Imaginemos también que este retículo tiene N celdas unitarias y que las mismas cumplen la condición de frontera $N + 1 = 1$. A este objeto se le llama cadena de espines. Si además le damos la propiedad

de que exista interacción de intercambio de la forma mostrada en la ecuación (3.1), tenemos una cadena de espines de Heisenberg.

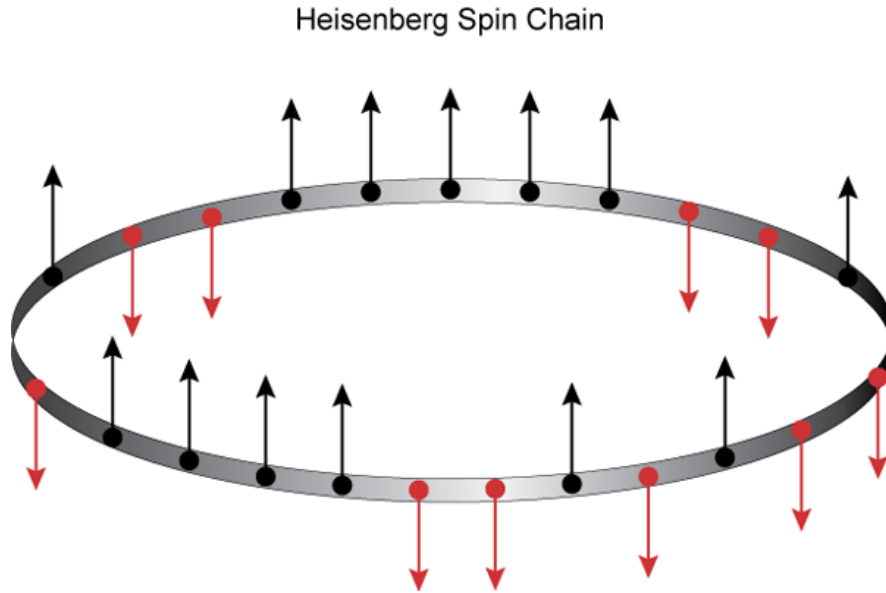


Figura 3.1: Cadena de espines con $N = 23$.

De estas, 13 se encuentran apuntando hacia arriba y 10 se encuentran apuntando hacia abajo.

Fuente: American Physical Society.

3.2.1. Interacción de intercambio.

Es un hecho que los materiales de uso práctico tienen sus magnetos atómicos alineados por medio de una *interacción de intercambio*. Básicamente se debe a que las fuerzas eléctricas entre electrones son mucho más fuertes que las de origen magnético. Esto explica por qué la interacción de intercambio es lo suficientemente poderosa para permitir el magnetismo a escala microscópica incluso a temperatura ambiente. El tratamiento analítico de la interacción de intercambio es mucho más sencilla que la interacción dipolo magnético y siendo muy corto alcance, dependiente de una superposición de ondas según Parkinson, *et al* (2010).

El momento magnético de un átomo se debe, en parte, al movimiento de los electrones alrededor del núcleo. Desde el punto de vista clásico, se pueden imaginar como planetas orbitando alrededor del Sol. Dado que un electrón tiene carga eléctrica que genera una diminuta corriente alrededor del núcleo, la cual a su vez tiene un dipolo magnético asociado a ella. Con excepción del átomo de hidrógeno, todos los demás átomos tienen más de un electrón y a menudo los dipolos magnéticos de sus electrones se cancelan, por lo cual algunos de los átomos no tienen momento dipolo neto. Siguiendo la línea de pensamiento clásico, el electrón orbitando el núcleo también tiene un momento angular, por lo cual esperamos y encontramos que el dipolo magnético de un átomo, donde exista, está asociado a un momento angular del átomo. El estudio del comportamiento microscópico de los materiales magnéticos es muchas veces un estudio de cómo los momentos angulares de los

átomos interactúan, en vez de los momentos magnéticos de los mismos según Shankar (1994).

El cálculo detallado de la interacción de intercambio es posible en muchos casos, como apunta Parkinson, *et al* (2010). La energía de la interacción de intercambio se puede expresar:

$$E = \alpha \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \beta S_1^2 S_2^2, \quad (3.2)$$

donde \mathbf{S}_1 y \mathbf{S}_2 son los momentos angulares de cada átomo. Las negrillas denotan el carácter vectorial del momento angular.

El caso especial $\alpha = -J$, $\beta = 0$ se llama interacción isotrópica de Heisenberg, y es en la que se enfocará este trabajo y más adelante en la sección (3.2.8) se explicará el significado que tiene J en el Modelo. El caso especial $\alpha = 0$, $\beta = -J$ se llama interacción de Ising. En ambos casos si J es positiva la energía mínima se obtiene cuando los vectores de momento angular son paralelos. En el caso de Heisenberg no existe un eje favorecido para el alineamiento, pero para el caso de Ising hay un eje preferido como expone Castillo (2015). Si J es negativa la energía mínima se obtiene cuando los vectores de momento angular son antiparalelos. La interacción de Ising no se presentará en este trabajo.

Sachdev (2011) explica que cuando una interacción favorece el alineamiento paralelo de los átomos magnéticos el resultado es un ferromagneto. El alineamiento alterno resulta en antiferromagnetos, los cuales no tienen un momento magnético macroscópico neto. Sin embargo, a nivel microscópico éstos exhiben propiedades cuánticas más interesantes, como la contribución magnética a las propiedades térmicas siendo una de ellas el calor específico.

Si la interacción no se restringe a los vecinos más cercanos, o si hay más de un tipo de átomo magnético en el arreglo, entonces otros tipos de magnetismo pueden observarse, como apunta Blundell (2011). El ferrimagneto se caracteriza por tener algunos átomos alineados en una dirección y otros en dirección opuesta de tal forma que hay momento magnético macroscópico neto. El ordenamiento espiral puede también ocurrir, en átomos que no se alinean en un solo eje, sino que la dirección rota mientras el observador se mueve a través del material, resultando casi siempre en un momento magnético macroscópico distinto a cero, según Parkinson, *et al* (2010). Los ferrimagnetos y los magnetos espirales no se presentarán en este trabajo.

Se presentarán sistemas magnéticos de Heisenberg, o bien, variaciones del Modelo de Heisenberg. Marder (2011) relata que estos sistemas tendrán dos o más partículas, donde cada una tiene un momento angular y un momento magnético asociado, permitiendo el estudio de ciertos tipos de materiales magnéticos. Usualmente las partículas magnéticas son átomos o iones de metales de transición como el Mn, Ni o Fe o tierras raras como el Nd o el Ce. La interacción de intercambio sucede entre los momentos angulares de las partículas pero, como su momento magnético es proporcional al momento angular, superficialmente parece una interacción entre momentos magnéticos.

Parkinson, *et al* (2010) recuerda que en 1925 Heisenberg y en 1926 Schrödinger establecieron las bases para la mecánica cuántica. El formalismo de Schrödinger plantea que la evolución de los sistemas se da en los estados mientras que Heisenberg en los observables, es decir cantidades medibles. El formalismo de Heisenberg es especialmente útil en la descripción del momento angular. Para el momento angular orbital de partículas únicas se puede utilizar el formalismo de Schrödinger, pero para sistemas con muchas partículas interactuantes es mucho más conveniente utilizar el formalismo de Heisenberg. De hecho, para el momento angular intrínseco de partículas elementales, el espín, no es posible obtener una función de onda específica. Para los bariones, como el neutrón y el protón, esto se debe a que la estructura interna en términos de quarks es complicada y en muchos casos los mismos quarks tienen espín, mientras que los leptones, tales como los electrones, se consideran partículas punto, sin estructura interna. La mayor parte del magnetismo observado en la práctica se debe a los electrones, acorde a Baxter (1982). Puede ser asociado con el momento orbital angular tanto como por el espín. Para un electrón tenemos que,

$$\vec{\mu} = \beta \vec{\tilde{J}}, \quad (3.3)$$

donde $\vec{\tilde{J}}$ es el momento magnético total, $\vec{\mu}$ es el momento dipolo magnético medido en unidades de \hbar y $\beta = \frac{e\hbar}{2m}$ es la unidad elemental de momento magnético asociado con el espín unitario, el magnetrón de Bohr. La interacción con el campo magnético es

$$I = \vec{\mu} \cdot \vec{\mathbf{B}}. \quad (3.4)$$

Ahora nótese que el momento magnético total es,

$$\vec{\tilde{J}} = \vec{\tilde{L}} + \vec{\tilde{S}}, \quad (3.5)$$

donde $\vec{\tilde{L}}$ es el momento magnético orbital y es $\vec{\tilde{S}}$ es el momento de espín y que este momento total está escrito en una notación resumida de

$$\vec{\tilde{J}} = \vec{\tilde{L}} \otimes \mathbf{I}_{\mathbf{L}} + \mathbf{I}_{\mathbf{S}} \otimes \vec{\tilde{S}}, \quad (3.6)$$

donde $\mathbf{I}_{\mathbf{L}}$ es el vector identidad del momento magnético orbital y $\mathbf{I}_{\mathbf{S}}$ es el vector identidad del momento magnético de espín. Entonces, sustituyendo la ecuación (3.3) en (3.4) tenemos,

$$I = \beta \vec{\tilde{J}} \cdot \vec{\mathbf{B}}. \quad (3.7)$$

Sustituyendo ahora la ecuación (3.6) en (3.7), se obtiene

$$\begin{aligned} I &= \beta(\tilde{\mathbf{L}} \otimes \mathbf{I}_L + \mathbf{I}_S \otimes \tilde{\mathbf{S}}) \cdot \tilde{\mathbf{B}} \\ &= \beta(\tilde{\mathbf{L}} \otimes \mathbf{I}_L) \cdot \tilde{\mathbf{B}} + \beta(\mathbf{I}_S \otimes \tilde{\mathbf{S}}) \cdot \tilde{\mathbf{B}} \end{aligned} \quad (3.8)$$

por lo que se puede decidir ignorar el movimiento orbital de los electrones y tomar en cuenta únicamente la interacción de espín.

3.2.2. Momento angular intrínseco o espín.

Es necesario conocer los resultados más importantes sobre el momento angular para poder estudiar cualquier sistema de espín cuántico, como el Modelo de Heisenberg.

Existen dos tipos de momento angular en la naturaleza, como lo recuerda Parkinson, *et al* (2010). El primero que usualmente se estudia es el momento que surge de un movimiento circular relativo a cierto eje, este se llama momento angular orbital. En mecánica cuántica uno se encuentra primero con los momentos angulares orbitales cuando se estudian los eigenestados de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno.

Siguiendo el planteamiento de Sakurai, *et al* (2011), se consideró una partícula carente de espín que está sujeta a un potencial simétrico esférico. La ecuación de onda es separable en coordenadas esféricas y la eigenfunción de energía puede ser escrita como

$$\langle \mathbf{x}' | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad (3.9)$$

donde el vector posición \mathbf{x}' se escribe en términos de las coordenadas esféricas r , θ y ϕ y donde n , l y m son números cuánticos principal, orbital y magnético respectivamente. Nótese que el número cuántico n puede ser otro, como el número cuántico radial para problemas de estados acoplados o la energía para una onda de partículas libres. Dado que la dependencia angular es común en todos los problemas con simetría esférica, podemos aislar esta dependencia y considerar

$$\langle \hat{\mathbf{n}} | l, m \rangle = Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (3.10)$$

donde se define el eigenvector $|\hat{\mathbf{n}}\rangle$ como de dirección. Desde este punto de vista, explica Sakurai, *et al* (2011), $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ es la amplitud para un estado caracterizado por los número cuánticos l y m que puedan ser encontrados en la dirección de $\hat{\mathbf{n}}$ especificada por θ y ϕ . Ya considerando la componente angular escribimos

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = C_{l,m} P_l^m(\theta) e^{im\phi}, \quad (3.11)$$

donde P_l^m son los polinomios de Legendre de grado l y $C_{l,m}$ es la constante de normalización. Eisberg, *et al* (1999) relata que, físicamente, los número cuánticos aparecen como consecuencia

de la separación de variables de la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas ya que la misma contiene 3 variables independientes. En el contexto de un electrón de valencia, el momento angular del mismo depende del número cuántico orbital l mientras que su energía dependerá de m si el electrón se coloca en un campo magnético externo. Las partes angulares de la ecuación de Schrödinger son también eigenestados de los operadores de momento angular, tal como lo escribe Parkinson, *et al* (2010). Para una partícula con momento lineal \mathbf{p} y vector de posición \mathbf{r} tenemos que el momento angular orbital es $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ y en la mecánica cuántica tiene la misma forma

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}, \quad (3.12)$$

donde el sombrero representa que son operadores. Estos operadores tienen la relación de conmutación $[\hat{L}^x, \hat{L}^y] = i\hbar\hat{L}^z$. Dado que los $Y_{l,m}$ son eigenestados de \hat{L}^z y de $\hat{\mathbf{L}}^2 = (\hat{L}^x)^2 + (\hat{L}^y)^2 + (\hat{L}^z)^2$ simultáneamente implica que es siempre posible hallar estados que sean simultáneamente eigenestados de dos operadores siempre y cuando conmuten. Sus eigenvalores son

$$\hat{L}^z Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m}, \quad (3.13)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{l,m} = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m}, \quad (3.14)$$

Otros operadores útiles son los denominados operadores escalera

$$\hat{L}^+ \equiv \hat{L}^x + i\hat{L}^y, \quad (3.15)$$

$$\hat{L}^- \equiv \hat{L}^x - i\hat{L}^y, \quad (3.16)$$

De estas definiciones se tiene que

$$[\hat{L}^+, \hat{L}^-] = 2\hbar\hat{L}^z, \quad (3.17)$$

y además que

$$\hat{L}^+ Y_{l,m} = 0, m = l. \quad (3.18)$$

Sin embargo si $m < l$ se tiene

$$\hat{L}^z (\hat{L}^+ Y_{l,m}) = (m+1)\hbar (L^+ Y_{l,m}), \quad (3.19)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 (\hat{L}^+ Y_{l,m}) = l(l+1)\hbar^2 (\hat{L}^+ Y_{l,m}). \quad (3.20)$$

Esto significa que $\hat{L}^+ Y_{l,m}$ también es eigenestado de \hat{L}^z y de $\hat{\mathbf{L}}^2$. Tiene el mismo eigenvalor de $\hat{\mathbf{L}}^2$ que $Y_{l,m}$, pero un eigenvalor distinto para \hat{L}^z , el cual se incrementa por una unidad de \hbar . \hat{L}^+ mapea $Y_{l,m}$ a $Y_{l,m+1}$, por medio de una constante multiplicativa y por eso se llama operador

escalera de subida. Similarmente ocurre con \hat{L}^- el cual mapea a $Y_{l,m}$ en $Y_{l,m-1}$ y que por lo tanto se llama operador escalera de bajada.

Blundell (2011) recuerda que el segundo tipo de momento angular que ocurre en la naturaleza es el espín intrínseco de partículas elementales. Esta es una propiedad fundamental de una partícula. Comúnmente se piensa que se debe a la rotación interna de una partícula, por lo cual es llamado así, pero esto no es correcto dado que, por ejemplo, un electrón tiene espín pero se considera una partícula puntual sin estructura interna. El espín tiene la mayor parte de las propiedades del momento angular orbital, aunque también tiene algunas propiedades especiales. Se denotará por $\hat{\mathbf{S}}$ en lugar de $\hat{\mathbf{L}}$ e igualmente se utilizarán los operadores \hat{S}^z y de $\hat{\mathbf{S}}^2$ con los mismos números cuánticos l y m tal que

$$\hat{S}^z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle, \quad (3.21)$$

$$\hat{\mathbf{S}}^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle, \quad (3.22)$$

el eigenestado de espín $|l, m\rangle$ se comporta como el eigenestado orbital $Y_{l,m}$, pero con dos diferencias fundamentales

1. $|l, m\rangle$ no tiene una forma explícita, como la tiene $Y_{l,m}$ en términos de θ y ϕ
2. l puede ser un entero puro o un entero más $\frac{1}{2}$, llamado medio entero.

Los valores de m aún difieren por la unidad y todavía toman valores de $-l$ a $+l$, pero si l es un entero más $\frac{1}{2}$, los m toman la misma forma. También existen los operadores \mathbf{S}^+ y \mathbf{S}^- que son análogos a los operadores orbitales \hat{L}^+ y \hat{L}^- y que comparten las mismas propiedades tales como

$$\hat{\mathbf{S}}^+ |l, m\rangle = 0, l = m. \quad (3.23)$$

Y que de forma explícita son

$$\mathbf{S}^+ = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^x + i\mathbf{S}^y), \quad (3.24)$$

$$\mathbf{S}^- = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^x - i\mathbf{S}^y), \quad (3.25)$$

mientras que para $m < l$ se tiene

$$\hat{\mathbf{S}}^z (\hat{\mathbf{S}}^+ |l, m\rangle) = (m+1)\hbar (\hat{\mathbf{S}}^+ |l, m\rangle), \quad (3.26)$$

$$\hat{\mathbf{S}}^2 (\hat{\mathbf{S}}^+ |l, m\rangle) = l(l+1)\hbar^2 (\hat{\mathbf{S}}^+ |l, m\rangle). \quad (3.27)$$

También se tienen resultados similares para $\hat{\mathbf{S}}^- |l, m\rangle$.

Para el momento angular orbital de un electrón en un átomo de hidrógeno, pueden haber estados con diferentes números cuánticos l , cada uno de los cuales tiene varios posibles valores de

m . Para el espín el valor de l es fijo. La única diferencia entre eigenestados es el valor de m .

En los materiales magnéticos el momento magnético de un átomo podría ser una combinación de momento angular orbital y de espín. El momento magnético es una función descrita en términos de factor g de Landé de un átomo o ion que varía entre 1 (para momento angular puro) y 2 (para espín puro). De cualquier manera, en este trabajo se dejó que el momento angular tome un valor fijo de l , que corresponde a una forma de magnitud, y se permitió que varíe su orientación a través del número m . Por esta razón se hace referencia al momento angular de un átomo magnético como espín utilizando el símbolo \mathbf{S} , sin sombrero por referirse siempre a operadores hermíticos de aquí en adelante. También se tomó el valor de $\hbar = 1$, en unidades naturales.

3.2.3. Partícula única de espín $\frac{1}{2}$

Para una partícula única de espín $\frac{1}{2}$ el valor de l es $\frac{1}{2}$. El valor de m puede ser $\frac{1}{2}$ o $-\frac{1}{2}$, por lo tanto hay dos eigenestados de \mathbf{S}^z así

$$|l, m\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \text{ o } \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (3.28)$$

En notación abreviada se pueden escribir estos estados como

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \left| \frac{1}{2} \right\rangle \equiv |+\rangle, \quad (3.29)$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |-\rangle. \quad (3.30)$$

Estos dos eigenestados forman un conjunto completo para una partícula de espín $\frac{1}{2}$ por lo que un estado arbitrario puede escribirse

$$\psi = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle. \quad (3.31)$$

Los estados están normalizados y son ortogonales dado que

$$\langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1, \quad (3.32)$$

$$\langle + | - \rangle = \langle - | + \rangle = 0. \quad (3.33)$$

Al aplicar los operadores de espín a los eigenestados $|+\rangle$ y $|-\rangle$, se tiene

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^z |+\rangle &= \frac{1}{2} |+\rangle \\ \mathbf{S}^z |-\rangle &= -\frac{1}{2} |-\rangle \\ \mathbf{S}^+ |+\rangle &= 0 = \mathbf{S}^- |-\rangle \\ \mathbf{S}^+ |-\rangle &= |+\rangle \\ \mathbf{S}^- |+\rangle &= |-\rangle. \end{aligned} \quad (3.34)$$

3.2.4. Dos partículas interactuantes con espín $\frac{1}{2}$.

Cuando partículas con espín interactúan entre sí, nuevos fenómenos ocurren tales como el ferromagnetismo y el antiferromagnetismo.

El tratamiento cuántico de estos sistemas involucra una cantidad considerable de matemática, según Delcompare (2017), y en este trabajo se presenta uno de los métodos analíticos más utilizados, el Ansatz de Bethe, así como el método de diagonalización exacta. Estos resultados se contrastarán con resultados obtenidos de métodos computacionales para resolver los mismos Modelos.

Ahora suponiendo que se tienen dos átomos únicamente, cada uno con espín $\frac{1}{2}$, sujetos a una interacción isotrópica de intercambio J , llamada interacción de Heisenberg. El hamiltoniano es

$$\mathcal{H} = J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (3.35)$$

El tratamiento tradicional involucra considerar el ángulo entre los espines dado que

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_1 S_2 \cos \theta, \quad (3.36)$$

Como ambos, S_1 y S_2 son iguales a $\frac{1}{2}$, la energía es

$$E = \frac{1}{4} J \cos \theta. \quad (3.37)$$

Dado que $-1 \leq \cos \theta \leq 1$ son posibles cualesquiera valores de energía entre $+\frac{1}{4}J$ y $-\frac{1}{4}J$. La mecánica cuántica trata de encontrar todos los eigenestados del sistema. Primero se escribe un conjunto ortonormal completo de los estados del sistema y luego se escribe \mathcal{H} en forma matricial, utilizando como base los estados ortonormales, para diagonalizar y encontrar los eigenestados.

Usando el subscripto 1 para la primer partícula, una base para esta consiste en los dos eigenestados de \mathbf{S}_1^z , $|+\rangle_1$ y $|-\rangle_1$. De manera similar $|+\rangle_2$ y $|-\rangle_2$ forman una base para la segunda partícula. Entonces una base para el par es

$$\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}, \quad (3.38)$$

donde $|++\rangle$ significa que se tienen $|+\rangle_1 \times |+\rangle_2$ y de manera similar para los demás estados acoplados. Por lo tanto \mathcal{H} tendrá dimensión 4×4 en su forma matricial. Es de utilidad trabajar

con el hamiltoniano (3.58) utilizando las ecuaciones (3.24) y (3.25), así

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \\
&= J(\mathbf{S}_1^x \mathbf{S}_2^x + \mathbf{S}_1^y \mathbf{S}_2^y + \mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z) \\
&= J\left(\frac{1}{2}\mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^- + \frac{1}{2}\mathbf{S}_1^- \mathbf{S}_2^+ + \mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z\right)
\end{aligned} \tag{3.39}$$

Al considerar el efecto de del hamiltoniano (3.39) sobre la base (3.38) y recordando que todos los operadores correspondientes a diferentes átomos conmutan y que los operadores con subscripto n actúan únicamente sobre el n átomo y que este operador no afecta el siguiente átomo. Primero se consideró el actuar de $\mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z$ sobre cada estado base

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z |++\rangle &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} |++\rangle = \frac{1}{4} |++\rangle \\
\mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z |+-\rangle &= -\frac{1}{4} |+-\rangle \\
\mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z |-+\rangle &= -\frac{1}{4} |-+\rangle \\
\mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z |--\rangle &= \frac{1}{4} |--\rangle
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Ahora, al considerar la aplicación de $\mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^-$ y $\mathbf{S}_1^- \mathbf{S}_2^+$ operando en cada eigenestado

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^- |++\rangle &= 0 \\
\mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^- |+-\rangle &= 0 \\
\mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^- |-+\rangle &= |-+\rangle \\
\mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^- |--\rangle &= 0 \\
\mathbf{S}_1^- \mathbf{S}_2^+ |++\rangle &= 0 \\
\mathbf{S}_1^- \mathbf{S}_2^+ |+-\rangle &= |+-\rangle \\
\mathbf{S}_1^- \mathbf{S}_2^+ |-+\rangle &= \mathbf{S}_1^- \mathbf{S}_2^+ |--\rangle = 0
\end{aligned} \tag{3.41}$$

Se utilizó este resultado junto al hamiltoniano resultante de la ecuación (3.39) para obtener

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} |++\rangle &= \frac{1}{4} J |++\rangle \\
\mathcal{H} |+-\rangle &= -\frac{1}{4} J |+-\rangle + \frac{1}{4} J |-+\rangle \\
\mathcal{H} |-+\rangle &= -\frac{1}{4} J |-+\rangle + \frac{1}{4} J |+-\rangle \\
\mathcal{H} |--\rangle &= \frac{1}{4} J |--\rangle
\end{aligned} \tag{3.42}$$

En forma matricial se conforman las filas con cada uno de los eigenestados así

$$\mathcal{H} = J \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |++\rangle \\ |+-\rangle \\ |-+\rangle \\ |--\rangle \end{pmatrix}, \tag{3.43}$$

Los eigenvalores se obtienen resolviendo, omitiendo J ,

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{4} - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} - E & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} - E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} - E \end{vmatrix} = 0 \quad (3.44)$$

con lo que obtenemos

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{4} - E\right)^2 \begin{vmatrix} -\frac{1}{4} - E & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} - E \end{vmatrix} &= 0 \\ \left(\frac{1}{4} - E\right)^2 \left[\left(\frac{1}{4} + E\right)^2 - \frac{1}{4} \right] &= 0 \end{aligned} \quad (3.45)$$

$$\left(\frac{1}{4} - E\right)^2 \left[\left(\frac{1}{4} + E\right)^2 + \frac{1}{2} \right] \left[\left(\frac{1}{4} + E\right)^2 - \frac{1}{2} \right] = 0$$

lo que resulta en, $E = \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, -\frac{3}{4}$. Restaurando a J , los eigenvalores son $E = J/4$ tres veces y $E = -3J/4$. El eigenvalor mayor es $J/4$ que concuerda con la teoría clásica, pero el eigenvalor mínimo $E = J/4$ es resultado de un efecto cuántico. Dado que tres de los eigenvalores son degenerados, se pueden escoger sus correspondientes eigenestados de manera arbitraria. Por ejemplo, se pueden tomar así

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \psi_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.46)$$

y de esta forma los primeros 3 resultan con eigenvalor $E = J/4$ mientras que el último resulta con eigenvalor $E = -3J/4$. Ver tabla 3.1.

3.2.5. Conmutadores y números cuánticos.

Las relaciones de conmutación entre los operadores \mathbf{S}^+ , \mathbf{S}^- , \mathbf{S}^x y \mathbf{S}^y son útiles para el álgebra de las cadenas de espines. Se usaron las definiciones (3.24) y (3.25) para obtener

$$[\mathbf{S}^z, \mathbf{S}^+] = \mathbf{S}^+, \quad (3.47)$$

$$[\mathbf{S}^z, \mathbf{S}^-] = -\mathbf{S}^-, \quad (3.48)$$

$$[\mathbf{S}^-, \mathbf{S}^+] = -2\mathbf{S}^z. \quad (3.49)$$

También se puede definir que para el sistema de espines interactuantes el operador espín total,

$$\mathbf{S}_T^z = \mathbf{S}_1^z + \mathbf{S}_2^z, \quad (3.50)$$

que representa la componente z del momento angular total del sistema. Nótese que

$$[\mathbf{S}_T^z, \mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z] = 0, \quad (3.51)$$

porque solamente \mathbf{S}_1^z y \mathbf{S}_2^z participan en las operaciones. Ahora considérese,

$$\begin{aligned} [\mathbf{S}_T^z, \mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^-] &= [\mathbf{S}_1^z, \mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^-] + [\mathbf{S}_2^z, \mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^-] \\ &= [\mathbf{S}_1^z, \mathbf{S}_1^+] \mathbf{S}_2^- + \mathbf{S}_1^+ [\mathbf{S}_2^z, \mathbf{S}_2^-] \\ &= \mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^- + \mathbf{S}_1^+ (-\mathbf{S}_2^-) \\ &= 0 \end{aligned}, \quad (3.52)$$

y de forma similar $[\mathbf{S}_T^z, \mathbf{S}_1^- \mathbf{S}_2^+] = 0$. Esto implica que el espín total \mathbf{S}_T^z conmuta con cada término del hamiltoniano (3.39), por lo tanto se puede afirmar que \mathbf{S}_T^z es un buen número cuántico. Aplicándolo a los estados base se tiene

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_T^z |++\rangle &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) |++\rangle = |++\rangle \\ \mathbf{S}_T^z |+-\rangle &= \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) |+-\rangle = 0 \\ \mathbf{S}_T^z |-+\rangle &= 0 \\ \mathbf{S}_T^z |--\rangle &= -|--\rangle \end{aligned} \quad (3.53)$$

De esta manera los eigenestados ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 y ψ_4 mostrados en la ecuación (3.46) de la subsección (3.2.4) tienen propiedades tales que

$$\mathbf{S}_T^z \psi_1 = \psi_1, \quad \mathbf{S}_T^z \psi_2 = 0, \quad \mathbf{S}_T^z \psi_3 = -\psi_3 \quad \mathbf{S}_T^z \psi_4 = 0 \quad (3.54)$$

Donde ψ_2 y ψ_4 tienen eigenvalor de \mathbf{S}_T^z igual a 0 mientras que ψ_1 tiene eigenvalor igual a 1 y ψ_3 tiene eigenvalor igual a -1 . Existe otra propiedad del intercambio de Heisenberg. El hamiltoniano es isotrópico y no distingue entre x , y y z , dado que $[\mathbf{S}_T^z, \mathcal{H}] = 0$ entonces también $[\mathbf{S}_T^x, \mathcal{H}] = 0$ y $[\mathbf{S}_T^y, \mathcal{H}] = 0$.

Como se menciona en la subsección (3.1), si dos operadores conmutan es posible encontrar eigenestados comunes para ambos operadores. Dado que $[\mathbf{S}_T^x, \mathbf{S}_T^z] \neq 0$ se pueden hallar eigenestados de \mathcal{H} y también de \mathbf{S}_T^z como se ha mostrado en esta subsección y así se podrán encontrar otros estados que sean eigenestados de \mathcal{H} y también de \mathbf{S}_T^x . Sin embargo no es posible encontrar estados que sean eigenestados de \mathbf{S}_T^z y de \mathbf{S}_T^x simultáneamente ya que estos operadores no conmutan. El

momento angular total está dado por

$$\mathbf{S}_T = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 , \quad (3.55)$$

y entonces

$$\mathbf{S}_T^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = \mathbf{S}_T^x + \mathbf{S}_T^y + \mathbf{S}_T^z . \quad (3.56)$$

Como \mathcal{H} conmuta con todas las componentes \mathbf{S}_T^2 , entonces $[\mathbf{S}_T^2, \mathcal{H}] = 0$, o sea que \mathcal{H} conmuta con \mathbf{S}_T^2 . Los eigenestados (3.46) son simultáneamente eigenestados de \mathcal{H} , \mathbf{S}_T^z y de \mathbf{S}_T^2 . Los eigenvalores correspondientes al operador \mathbf{S}_T^2 están dados por

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_T^2 \psi_1 &= 2\psi_1 \\ \mathbf{S}_T^2 \psi_2 &= 2\psi_2 \\ \mathbf{S}_T^2 \psi_3 &= 2\psi_3 \\ \mathbf{S}_T^2 \psi_4 &= 0 \end{aligned} . \quad (3.57)$$

Por ejemplo en $\mathbf{S}_T^2 \psi_1 = l(l+1)\psi_1$ l debe ser igual a 1, se tiene que el número cuántico momento angular total $l = 1$. Similarmente el estado ψ_4 tiene número cuántico momento angular igual a 0.

3.2.6. La interpretación física de la interacción de Heisenberg para dos partículas con espín $\frac{1}{2}$

Si se combinan dos átomos con espín $\frac{1}{2}$ podemos formar una configuración con espín 1 o una configuración con espín 0, como lo muestran los eigenvalores (3.57) del espín total \mathbf{S}_T^2 . La configuración con espín total 1 puede tener 3 posibles orientaciones, que son los valores del componente z del espín.

Cuadro 3.1: Resumen de estados de un sistema de dos partículas con espín $\frac{1}{2}$ entrelazadas con la interacción de Heisenberg.

Estado	Forma Explícita	Configuración	\mathbf{S}_T	\mathbf{S}_T^z	E
ψ_1	$ ++\rangle$	$\uparrow\uparrow$	1	1	$J/4$
ψ_2	$\frac{1}{\sqrt{2}}(+-\rangle + -+\rangle)$	$\rightarrow\rightarrow$	1	0	$J/4$
ψ_3	$ --\rangle$	$\downarrow\downarrow$	1	-1	$J/4$
ψ_4	$\frac{1}{\sqrt{2}}(+-\rangle - -+\rangle)$	$\uparrow\downarrow$	0	0	$-3J/4$

Fuente: Parkinson, *et al* (2010).

Se llama a ψ_1 , ψ_2 y ψ_3 estados triplete mientras que ψ_4 es un estado único. Los estados triplete tienen dos espines paralelos cada uno y a este tipo de configuración se le llama ferromagnética dado que los momentos magnéticos serán paralelos también. El estado único es de configuración cero espín, con sus espines arreglados antiparalelamente, se llama antiferromagnética.

De aquí se entiende que si J es positiva entonces el estado fundamental es *antiferromagnético*, pero si J es negativa entonces el estado base es *ferromagnético*, tal como se definió definido en la

sección 3.2.

3.2.7. Arreglo infinito de espines

Un cristal magnético está constituido por N de átomos magnéticos arreglados en retículos regulares. Cada átomo tiene un espín y su momento magnético asociado. Si los espines, y por consecuencia, los momentos magnéticos están alineados en la misma dirección tenemos un ferromagneto con un momento magnético neto grande. Existen otras posibles configuraciones en la ausencia de campo magnético: Desordenadas con un arreglo aleatorio de espines que constituyen un *paramagneto* y las que alternan la orientación de los espines hacia arriba y hacia abajo que constituyen un *antiferromagneto* Blundell (2011).

El caso más importante es el llamado *límite termodinámico* el cual implica tomar el límite $N \rightarrow \infty$. A cualquier temperatura distinta de cero, las fluctuaciones térmicas tenderán a reducir el alineamiento perfecto de un ferromagneto o de un antiferromagneto, aunque podría aún haber un alineamiento neto hasta alguna temperatura crítica T_C arriba de la cual el sistema entra en una fase paramagnética. Esta temperatura crítica también es llamada temperatura de Curie para un ferromagneto y temperatura de Néel para un antiferromagneto.

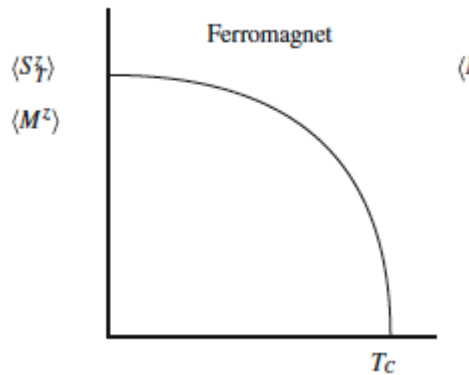


Figura 3.2: Magnetización y espín total vs. Temperatura de un ferromagneto. Fuente: Parkinson, et al (2010).

Nótese que la interacción de intercambio es de muy corta distancia. Una simple aproximación, que resulta ser precisa para muchos cristales, consiste en asumir que solo los vecinos más cercanos en el retículo interactúan. Existen tres arreglos básicos fundamentales

1. Cubo simple de espines. A interactúa con B, C y D pero no con E o F, como se muestra en la Figura 3.3
2. Cuadrado de espines. A interactúa con B pero no con C.
3. Cadena de espines. A interactúa con B pero no con C.

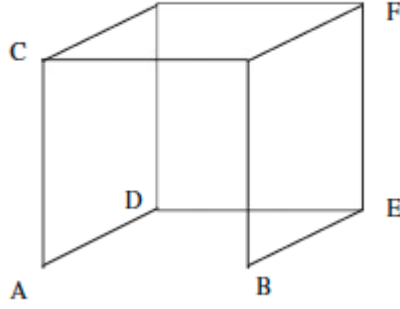


Figura 3.3: Cubo de espines.
Fuente: Parkinson, et al (2010).

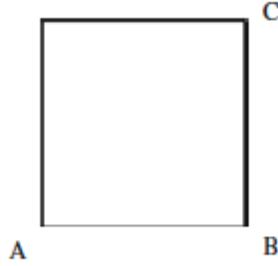


Figura 3.4: Cuadrado de espines.
Fuente: Parkinson, et al (2010).

Las diferencias entre el comportamiento clásico y cuántico son más marcadas para valores bajos de espín y para bajas dimensiones.

3.2.8. Definición del modelo de Heisenberg.

El hamiltoniano del sistema es

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= J[\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \dots + \mathbf{S}_N \cdot \mathbf{S}_1] \\ &= J \sum_{n=1}^N \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} \end{aligned} \quad , \quad (3.58)$$

el cual se puede reescribir, generalizando la ecuación (3.39) para N partículas,

$$\mathcal{H} = J \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2} (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z \right]. \quad (3.59)$$

Las cadenas de espines pueden realizarse de manera aproximada en cristales, si la estructura cristalina es tal que mantiene a las cadenas razonablemente apartadas entre sí. La anisotropía iónica del cristal determina si los momentos magnéticos se comportan como espines de Ising ($D = 1$),

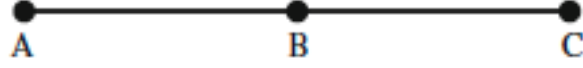


Figura 3.5: Cadena de espines.
Fuente: Parkinson, et al (2010).

como espines XY ($D = 2$) o como espines de Heisenberg ($D = 3$), donde D denota la cantidad de dimensiones del espacio de espín. Por ejemplo, los cristales de trifluorato de potasio KCuF_3 , se comportan como cadenas unidimensionales de espines de Heisenberg. En el presente trabajo se consideró el espín de electrones interactuantes, que son fermiones con espín $\frac{1}{2}$ Yeomans (1992).

El producto tensorial para dos matrices \mathbf{A} y \mathbf{B} es:

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})_{\sigma'_1 \sigma'_2}^{\sigma_1 \sigma_2} = \mathbf{A}_{\sigma'_1}^{\sigma_1} \mathbf{B}_{\sigma'_2}^{\sigma_2} = \mathbf{A}_{\sigma_1 \sigma'_1} \mathbf{B}_{\sigma_2 \sigma'_2} = \begin{pmatrix} A_{11} \mathbf{B} & \cdots & A_{1n} \mathbf{B} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} \mathbf{B} & \cdots & A_{mn} \mathbf{B} \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

considérese una cadena con N celdas unitarias de un retículo. Introducimos los operadores de Pauli dentro del retículo

$$\mathbf{S}_n^\alpha = 1 \otimes \cdots \otimes 1 \otimes \mathbf{S}^\alpha \otimes 1 \otimes \cdots \otimes 1, \quad (3.61)$$

que de forma explícita se escribe

$$(\mathbf{S}_n^\alpha)_{\sigma'_1 \dots \sigma'_N}^{\sigma_1 \dots \sigma_N} = (\mathbf{S}^\alpha)_{\sigma_n \sigma'_n} \delta_{\sigma_1 \sigma'_1} \cdots \delta_{\sigma_{n-1} \sigma'_{n-1}} \delta_{\sigma_{n+1} \sigma'_{n+1}} \cdots \delta_{\sigma_N \sigma'_N}. \quad (3.62)$$

Regresando a la ecuación 3.61, consideremos el producto de dos matrices, cada una representado diferentes sitios

$$\mathbf{S}_n^\alpha \mathbf{S}_m^\beta = 1 \otimes \cdots \otimes 1 \otimes \mathbf{S}^\alpha \otimes 1 \otimes \cdots \otimes \mathbf{S}^\beta \otimes 1 \otimes \cdots \otimes 1, \quad (3.63)$$

donde la matrices \mathbf{S}^α y \mathbf{S}^β situadas en el lado derecho de la ecuación 3.63. Recuérdese que las matrices \mathbf{S}^α y \mathbf{S}^β son de dimensión $2^N \times 2^N$, y que para este tipo de matrices el producto ordinario de 2 de ellas está dado por el producto directo de N matrices de 2×2 . Por esta razón, se debe realizar el producto matricial de las matrices 2×2 en cada uno de los sitios correspondientes a $n=1, 2, \dots, N$ para luego obtener una matriz de dimensión $2^N \times 2^N$ que corresponde al producto tensorial de las otras matrices Samaj (2015).

El operador \mathbf{S}_n^α representa el n espín de la cadena de N espines. Usando las matrices de Pauli se introduce los operadores espín:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}^x &= \sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\
\mathbf{S}^y &= \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\
\mathbf{S}^z &= \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{3.64}$$

donde las matrices de Pauli tienen las siguientes propiedades con respecto al producto

$$(\sigma^\alpha)^2 = 1, \tag{3.65}$$

$$\sigma^\alpha \cdot \sigma^\beta = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma^\gamma, \alpha \neq \beta, \tag{3.66}$$

siendo $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ es el tensor antisimétrico. Como consecuencia, se tiene,

$$[\sigma^\alpha, \sigma^\beta] = 2i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathbf{S}^\gamma, \tag{3.67}$$

mientras que el anticonmutador es,

$$\{\sigma^\alpha, \sigma^\beta\} = 2\delta_{\alpha\beta}, \tag{3.68}$$

Es de utilidad presentar también los eigenestados de \mathbf{S}^z que forman una base,

$$\mathbf{S}^z |+\rangle = |+\rangle, |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \mathbf{S}^z |-\rangle = -|-\rangle, |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{3.69}$$

donde los vectores $|+\rangle$ y $|-\rangle$ representan los estados espín \uparrow y espín \downarrow respectivamente. Es útil trabajar con los operadores intercambio mostrados en la sección anterior en la ecuaciones (3.24) y (3.25), aunque ahora se presentan también como matrices

$$\mathbf{S}^+ = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^x + i\mathbf{S}^y) \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.70}$$

$$\mathbf{S}^- = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^x - i\mathbf{S}^y) \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.71}$$

estos actúan sobre los vectores $|\pm\rangle$ así,

$$\mathbf{S}^+ |+\rangle = \mathbf{S}^- |-\rangle = 0; \mathbf{S}^+ |+\rangle = |+\rangle, \mathbf{S}^- |+\rangle = |-\rangle, \tag{3.72}$$

La aplicación de los operadores descritos en (3.70) y (3.71) sobre los vectores base $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle$ se lista en el Cuadro 3.2.

Cuadro 3.2: Reglas de aplicación de los operadores intercambio sobre los vectores base $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle$, con $\sigma_n = +, -$.

	$ \dots + \dots\rangle$	$ \dots - \dots\rangle$
\mathbf{S}_i^+	0	$ \dots + \dots\rangle$
\mathbf{S}_i^-	$ \dots - \dots\rangle$	0
\mathbf{S}_i^z	$\frac{1}{2} \dots + \dots\rangle$	$-\frac{1}{2} \dots - \dots\rangle$

Se considera el conmutador de los operadores \mathbf{S}^+ y \mathbf{S}^- y la regla de conmutación de las matrices de Pauli (3.67), se tiene,

$$\begin{aligned}
[\mathbf{S}^+, \mathbf{S}^-] &= \mathbf{S}^+\mathbf{S}^- - \mathbf{S}^-\mathbf{S}^+ \\
&= \frac{1}{2}(\mathbf{S}^x + i\mathbf{S}^y)\frac{1}{2}(\mathbf{S}^x - i\mathbf{S}^y) - \frac{1}{2}(\mathbf{S}^x - i\mathbf{S}^y)\frac{1}{2}(\mathbf{S}^x + i\mathbf{S}^y) \\
&= \frac{1}{4}[\mathbf{S}^x\mathbf{S}^x - i\mathbf{S}^x\mathbf{S}^y + i\mathbf{S}^y\mathbf{S}^x + \mathbf{S}^y\mathbf{S}^y] - \frac{1}{4}[\mathbf{S}^x\mathbf{S}^x + i\mathbf{S}^x\mathbf{S}^y - i\mathbf{S}^y\mathbf{S}^x + \mathbf{S}^y\mathbf{S}^y], \quad (3.73) \\
&= -\frac{1}{4}i(\mathbf{S}^y\mathbf{S}^x - i\mathbf{S}^x\mathbf{S}^y) + \frac{1}{4}i(\mathbf{S}^x\mathbf{S}^y - \mathbf{S}^y\mathbf{S}^x) \\
&= -i[\mathbf{S}^y, \mathbf{S}^x] + i[\mathbf{S}^x, \mathbf{S}^y] \\
&= 2\mathbf{S}^z
\end{aligned}$$

denotando un operador que está actuando sobre la n partícula de la cadena de espines, agregándole un subíndice n , por ejemplo \mathbf{S}_n^\pm .

Luego de darles posición en la cadena, nótese que emergen las siguientes propiedades

$$[\mathbf{S}_n^\alpha, \mathbf{S}_m^\alpha] = 0, n \neq m, \quad (3.74)$$

$$[\mathbf{S}_n^z, \mathbf{S}_m^\pm] = \pm \mathbf{S}_n^\pm \delta_{nm} \quad (3.75)$$

$$[\mathbf{S}_n^+, \mathbf{S}_m^-] = 2\mathbf{S}_n^z \delta_{nm} \quad (3.76)$$

$$[\mathbf{S}_n^\alpha, \mathbf{S}_m^\beta] = \delta_{nm} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \mathbf{S}_n^\gamma \quad (3.77)$$

donde se toma $\hbar = 1$, δ_{nm} es el símbolo delta de Dirac y $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ es el tensor antisimétrico.

El espacio de Hilbert correspondiente a la matriz (3.63) es $\mathbf{V}_1 \otimes \mathbf{V}_2 \otimes \dots \otimes \mathbf{V}_N$ con \mathbf{V}_n isomorfo a $\mathbb{C} \neq \mathbb{C}^2$. Cuando se tienen N espacios de Hilbert, como en este caso, se llama un espacio de Fock. Elegiremos como base para cada uno de los vectores 2×1 V_n los vectores ortonormales $|+\rangle$, que representa el espín hacia arriba, y e^- que representa el espín hacia abajo, ambos definidos en la ecuación (3.64). La base vectorial de los operadores de Pauli se genera por todos los posibles 2^N productos tensoriales de estos vectores 2×1 en la cadena. A partir de ahora se adoptará la convención donde un vector base $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$ corresponde al producto tensorial de M vectores

$|-\rangle$ puestos en cierto orden en la cadena,

$$n_1 < n_2 < \dots < n_M, \quad (3.78)$$

y por $(N - M)$ vectores $|+\rangle$ en los sitios restantes,

$$|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle = |+\rangle \otimes \dots \otimes |+\rangle \otimes |-\rangle \otimes |+\rangle \otimes \dots \otimes |+\rangle \otimes |-\rangle \otimes \dots \otimes |+\rangle, \quad (3.79)$$

donde los n_i corresponden a los espacios en el retículo donde se tiene un vector $|-\rangle$. Se puede reescribir nuestro vector en términos de los operadores intercambio así,

$$|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle = \mathbf{S}_{n_1}^- \mathbf{S}_{n_2}^- \dots \mathbf{S}_{n_M}^- |0\rangle, \quad (3.80)$$

donde $|0\rangle$ es el producto tensor de N vectores $|+\rangle$. Dado que el número total de estos vectores ortogonales es 2^N , estos forman una base completa para el espacio 2^N dimensional de Fock, es decir que la dimensión de un espacio vectorial es la dimensión del producto de los vectores

En 1926 tanto Heisenberg como Dirac mostraron que se puede escribir un hamiltoniano para dos electrones en interacción mutua, que actúa únicamente sobre los grados de libertad del espín Marder (2011).

$$\mathcal{H}_{n,n+1} = -J \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1}, \quad (3.81)$$

donde J representa la constante de acoplamiento que rige la escala de energía de intercambio entre las dos partículas interactuantes (que en este caso son fermiones con espín $\frac{1}{2}$). \mathbf{S}_i y \mathbf{S}_j representan el espín total de las partículas, o bien,

$$\mathbf{S}_n = (\mathbf{S}_n^x, \mathbf{S}_n^y, \mathbf{S}_n^z), \quad (3.82)$$

$$\mathbf{S}_{n+1} = (\mathbf{S}_{n+1}^x, \mathbf{S}_{n+1}^y, \mathbf{S}_{n+1}^z), \quad (3.83)$$

por lo que el producto interno de dos vectores de espín \mathbf{S}_i y \mathbf{S}_j que corresponden a dos partículas es,

$$\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} = \mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z = \frac{1}{2} (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z. \quad (3.84)$$

En el hamiltoniano de una cadena de espines, se debe tomar en cuenta las interacciones de partículas

adyacentes,

$$\mathcal{H} = - \sum_{n=1}^N J \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} \quad (3.85)$$

donde n representa que la suma va sobre los pares interactuantes y J es la constante de acoplamiento entre los espines. Tomando en cuenta la interacción entre N partículas, la ecuación (3.85) puede escribirse así,

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \mathcal{H}_{n,n+1}, \quad (3.86)$$

para denotar la suma de los hamiltonianos que representan a N partículas interactuando con sus vecinos más cercanos. Ahora, es sumamente importante considerar las condiciones de frontera de la cadena de espines relacionada con esta ecuación. En este modelo nos interesa que la cadena de espines sea cerrada, como se muestra en la Figura (3.1). Por lo siguiente se debe considerar la interacción con la N partícula con la primer partícula. La representación matemática de esta idea puede expresarse como

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^{N-1} \mathcal{H}_{n,n+1} + \mathcal{H}_{N,1} \quad (3.87)$$

Esto implica que en la cadena de espines representada por el modelo de Heisenberg, los extremos de la cadena se unen de manera que la posición N sea el vecino más cercano de la posición $N - 1$ así como del electrón de la primera posición dentro del retículo.

3.3. Variaciones del modelo de Heisenberg

El modelo de Heisenberg fue introducido en 1928 y fue discutido en detalle como un modelo del ferromagnetismo por Van Vleck en su libro de 1932 . Este modelo describe razonablemente las propiedades de algunos aislantes magnéticos, como el monosulfuro de europio EuS, y nos provee un hamiltoniano microscópico que describe la interacción entre electrones que origina el ferromagnetismo Yeomans (1992).

En el modelo de Heisenberg se supone que, cuando una colección grande de iones magnéticos se coloca en un retículo, la ecuación (3.85) describe la energía del sistema. Sustituyendo la ecuación (3.84) en (3.85) se obtiene,

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{n=1}^N \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} = -\frac{J}{2} \sum_{n=1}^N [\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z], \quad (3.88)$$

cambiando i por n y j por $n+1$ para plasmar en la ecuación el hecho que se consideran las interacciones entre primeros vecinos, y considerando una constante de acoplamiento J_α para cada dimensión del espacio de espín, se reescribe,

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [J_x \mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + J_y \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y + J_z \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z], \quad (3.89)$$

donde la periodicidad de la cadena de espines se asegura definiendo $\mathbf{S}_{N+1}^\alpha = \mathbf{S}_1^\alpha$. La ecuación (3.89) es la forma general del hamiltoniano correspondiente a una cadena de espines según el modelo de Heisenberg. Samaj (2015)

Existen cinco combinaciones tradicionales del modelo de Heisenberg, determinadas por las posibilidades de las constantes de acoplamiento Samaj (2015):

- $J_x = J_y = J_z = J$, corresponden al modelo isotrópico de Heisenberg, denominado XXX, resuelto en 1931 por Bethe a través del método Ansatz de Bethe Bethe (2011). El hamiltoniano correspondiente a esta versión es,

$$H = -J \sum_{n=1}^N [\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z] = -J \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2} (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z \right], \quad (3.90)$$

Existen dos soluciones para este modelo: La primera encontrada por el mismo Bethe, implica tener $J_x = J_y = J_z = J > 0$ y se denomina como cadena isotrópica de Heisenberg XXX. La segunda encontrada por Hulthén en 1938 corresponde a tener $J_x = J_y = J_z = J < 0$ y se denomina cadena antiferromagnética de Heisenberg XXX.

- $J = J_x = J_y, J_z \neq 0$, corresponde al modelo XXZ de Heisenberg, su hamiltoniano es,

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [J(\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y) + J_z \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z], \quad (3.91)$$

donde J_z es la constante de acoplamiento para el eje z del espacio de espín, mientras que J es la constante de acoplamiento para el eje x y para el eje y también del espacio de espín.

- $J_x \neq J_y \neq J_z$, corresponde al modelo XYZ de Heisenberg. El hamiltoniano correspondiente a esta versión es el que aparece en la ecuación (3.89).
- $J = J_x = J_y, J_z = 0$, corresponden al modelo XX. El hamiltoniano correspondiente a esta versión es,

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{n=1}^N [\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y], \quad (3.92)$$

- $J_x \neq J_y, J_z = 0$, corresponden al modelo XY. El hamiltoniano correspondiente a esta versión es,El

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [J_x \mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + J_y \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y] \quad (3.93)$$

3.4. Diagonalización para un retículo con dos sitios

Es claro que no son de gran interés los sistemas con 2, 3 o 4 partículas, sino sistemas de N partículas, por lo cual se mostrará en esta sección dónde radica el problema de la diagonalización y

por qué se debe recurrir al Ansatz de Bethe para describir el espectro de energías del Hamiltoniano (3.85) en cualesquiera de sus distintas formas de manera analítica. Se trabajará con el modelo de Heisenberg XXX utilizado en la sección anterior y se realizará la diagonalización exacta para 2 partículas. Se utilizarán los operadores de cambio de espín \mathbf{S}^- y \mathbf{S}^+ de las ecuaciones (3.71) y (3.70), así como el operador \mathbf{S}^z de la ecuación , en la línea de pensamiento de Delcompare (2017), utilizando el hamiltoniano (3.90) y sustituyendo en (3.84) $i = n$ y $j = n + 1$, se escribe,

$$\begin{aligned} H_{XXX} &= -J \sum_{n=1}^N [\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z] \\ &= -J \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2} (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z \right], \end{aligned} \quad (3.94)$$

Para 2 partículas se puede escribir,

$$\begin{aligned} H_{XX2} &= -J \sum_{n=1}^2 \left[\frac{1}{2} (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z \right] \\ &= -J \left\{ \left[\frac{1}{2} (\mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^- + \mathbf{S}_1^- \mathbf{S}_2^+) + \mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z \right] + \left[\frac{1}{2} (\mathbf{S}_2^+ \mathbf{S}_1^- + \mathbf{S}_2^- \mathbf{S}_1^+) + \mathbf{S}_2^z \mathbf{S}_1^z \right] \right\} \\ &= -J \left\{ \mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z + \mathbf{S}_2^z \mathbf{S}_1^z + \frac{1}{2} (\mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^- + \mathbf{S}_1^- \mathbf{S}_2^+ + \mathbf{S}_2^+ \mathbf{S}_1^- + \mathbf{S}_2^- \mathbf{S}_1^+) \right\} \end{aligned} \quad (3.95)$$

En forma matricial se escribe,

$$H_{XX2} = \begin{pmatrix} -J/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J/4 & -J/2 & 0 \\ 0 & -J/2 & J/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J/4 \end{pmatrix}. \quad (3.96)$$

Para diagonalizar el hamiltoniano, y así poder describir el espectro de energía del sistema, considérese el problema

$$H_{XX2} |\psi\rangle = E |\psi\rangle.$$

Los eigenestados están dados por,

$$\begin{aligned}
 |\psi_1\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right], \\
 |\psi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right], \\
 |\psi_4\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{3.97}$$

En este caso, los tres primeros estados son degenerados y tienen energía $E = -J/4$ y el cuarto estado tiene energía $E = -3J/4$, el cuál es mucho menor y se debe a un efecto cuántico. En notación de Dirac, estos estado pueden escribirse como

$$\begin{aligned}
 |\psi_1\rangle &= |++\rangle, \\
 |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |(+-) + (-+)\rangle \\
 |\psi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |(+-) - (-+)\rangle \\
 |\psi_4\rangle &= |--\rangle
 \end{aligned} \tag{3.98}$$

Recuérdese que el sistema se encuentra a cero absoluto por lo tanto es de notar que pueda tener $2^2 = 4$ estados distintos representables en una matriz de dimensión $2^2 \times 2^2$; adicionalmente tiene dos niveles de energía.

3.5. Aplicaciones recientes del modelo de Heisenberg

El modelo de Heisenberg con todas sus variaciones sigue siendo aplicado a numerosas teorías que forman la base de tecnologías de vanguardia. En esta sección se muestran algunas de las corrientes más recientes de la física que siguen utilizando dicho modelo.

Los estudios que se han realizado con el modelo de Heisenberg han permitido que se conozcan muchas de sus características de modo que, aunque aun se siguen buscando más aplicaciones el

modelo sirve de modelo de juguete para probar varias aplicaciones.

En esta sección se presentan tres aplicaciones generales sin profundizar dado cada una de ellas es un campo completo de la física de materia condensada.

3.5.1. Información cuántica

Una parte importante del análisis de la información cuántica es la velocidad de propagación de la información. El límite superior de la velocidad de propagación de la información en sistemas cuánticos no relativistas se llama Límite de Lieb-Robinson Lieb, *et al* (1971).

El modelo de Heisenberg es uno de los modelos representativos de una clase de modelos cuánticos de red y muchas veces es usado como punto de partida para estudiar algunas generalizaciones o en distintas topologías, según Nachtergaele, *et al* (2018).

Como nos menciona Cubitt, *et al* (2017), es de sumo interés la simulación cuántica. Muchos modelos de redes se pueden realizar en simuladores cuánticos, para los cuáles existen categorías para determinar las clases de universalidad de los modelos que permiten establecer los protocolos de corrección de error que deben usarse.

De forma experimental, algunas de las simulaciones del transporte de información en cadenas de espines con alguna de las variantes del modelo de Heisenberg también se realizan con técnicas como RMN (Resonancia Magnética Nuclear) Cappellaro, *et al* (2017). También se hacen simulaciones con modelos de Heisenberg antiferromagnéticas para cristales simples probando distintos métodos como el de Monte Carlo cuántico, protocolos de percolación, etc. Vajk, *et al* (2013).

3.5.2. Computación cuántica

La computación cuántica es el estudio de las tareas de procesamiento de información que pueden lograrse utilizando sistemas cuánticos. Es un campo científico interdisciplinario, engloba la física de materia condensada, la ciencia de la computación y la informática. El desarrollo de la computación clásica se puede parametrizar por medio de la ley de Moore, la cual ha permanecido válida desde que fue formulada y expresa que la capacidad de procesamiento de las computadoras basadas en transistores se duplicará cada dos años sin incremento de costo. Tomando esto en cuenta y recordando que, según la tesis de Church-Turing, cualquier proceso algorítmico puede simularse eficientemente usando una máquina de Turing, sucede que las computadoras clásicas solamente pueden simular la computadoras cuánticas de manera muy ineficiente, sugiriendo que las computadoras cuánticas ofrecen una ventaja en velocidad de procesamiento notable, por lo cual son atractivas de desarrollarse como indicó Nielsen, *et al* (2011).

En 1985 David Deutsch quiso encontrar una teoría física que respaldara el tesis de Church-Turing. Él trató de definir un aparato computacional que pudiera simular un sistema físico arbitrario, lo cual lo llevó a desarrollar sus ideas a partir de la mecánica cuántica. Los aparatos que ideó son análogos cuánticos de las máquinas de Turing. Él probó que las computadoras cuánticas pueden tener mayor poder de procesamiento que las clásicas como también indicó Nielsen, *et al*

(2011).

Con respecto al campo de la informática, en las aplicaciones clásicas se utilizan múltiples redes de muchos canales de comunicación entre muchas computadoras, lo cual se encuentra muy desarrollado hoy en día, siendo el ejemplo la *world wide web*. Aunque se han encontrado resultados importantes en la teoría de la información cuántica recientemente, no existe una teoría unificada de información cuántica de redes, utilizando canales cuánticos de información basados en cúbits, los análogos cuánticos de los conocidísimos bits Nielsen, *et al* (2011).

Un cúbit tiene cierto estado, 0 o 1 como lo tienen los bits normales, siendo sus estados normales $|0\rangle$ o $|1\rangle$, con la diferencia que los cúbits pueden tener otros estados además de estos e incluso una combinación lineal de estados,

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (3.99)$$

donde α y β son número complejos. Dicho de otra forma, los estados cúbit son vectores en un espacio vectorial complejo de dos dimensiones. Los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ se llaman estados computacionales base y forman una base ortonormal para dicho espacio vectorial como también apunta Nielsen, *et al* (2011). Cualquier persona que ha estudiado mecánica cuántica sabe que no se puede examinar un cúbit para obtener los valores de α y β para determinar el estado exacto de la función de la ecuación 3.99. La propiedad de inobservable de un cúbit y las observaciones que podemos realizar yacen en el corazón de la computación y de la información cuánticas. Se debe notar que las computadoras clásicas evalúan en el estado exacto de los bits constantemente Nielsen, *et al* (2011).

Los circuitos superconductores, basados en las uniones de Josephson, permiten fácilmente elaborar distintas configuraciones permitiendo diseñar unidades básicas que se pueden combinar en distintos arreglos. Una forma de explicar su comportamiento de baja energía es mediante una cadena de Heisenberg efectiva Bellucci, *et al* (2016).

Las computadoras cuánticas aún no son comprendidas a totalidad aunque desde hace algunos años se vienen estudiando distintos problemas en los que se podrían poner a prueba. También se estudian las características de los dispositivos que podrían realizar el procesamiento. El modelo de Heisenberg se usa para caracterizar el confinamiento de cúbits acoplados usando una cadena de espines $1/2$ anisotrópica de Heisenberg, construyendo una secuencia ligada de energía por sitios en un retículo que resulta en el confinamiento de partículas en sitios individuales Dykman, *et al* (2005).

Dado que el modelo de Heisenberg en sus distintas variantes es usado en el campo de la mecánica estadística, se han descrito algoritmos para estudiar la implementación para el caso que sea necesario definir una mecánica cuántica estadística que pueda llevarse a término dentro de una computadora cuántica De Raedt, *et al* (2016).

3.5.3. Redes tensoriales (TN)

Como relata Orús (2014), las redes tensoriales, conocidas en inglés como *Tensor Networks* y referidas de ahora en adelante por sus siglas en inglés (TN), se definen como una colección de tensores cuyos índices se conectan conforme a un patrón de red. Se pueden utilizar para representar funciones de onda correspondientes a N partículas que representadas de otra manera les correspondería un espacio de Hilbert exponencialmente grande, como es el caso del modelo de Heisenberg. Esta representación se basa en la estructura del entrelazamiento cuántico.

La representación en TN es la base para muchos métodos de simulación que se basan en el grupo de Renormalización de la matriz densidad (DMRG) originalmente desarrollado por S. R. White en 1992. Delcompare (2017).

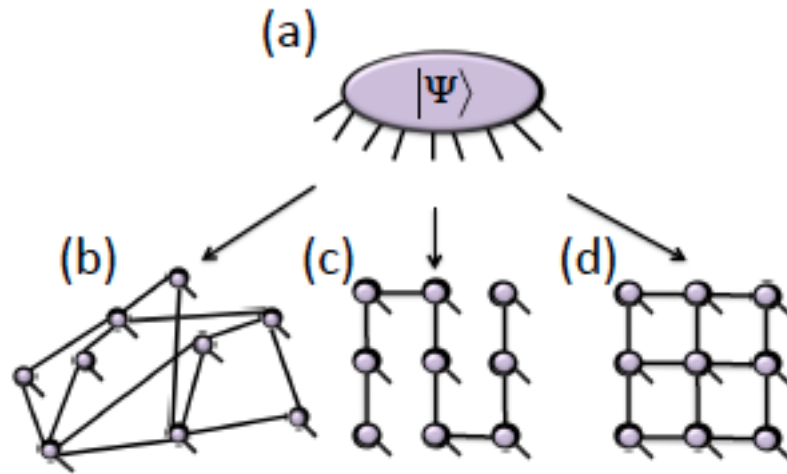


Figura 3.6: Ejemplo de un estado cuántico de 9 grados de libertad. Posibles configuraciones: (a) Un estado cuántico $|\Psi\rangle$ para nueve grados de libertad locales, o sea, para nueve espines. Este es descompuesto como (b) una red tensorial arbitraria, (c) un estado producto matricial unidimensional (MPS) y (d) un estado proyectado de pares entrelazados bidimensional PEPS.

Fuente: Orús (2014).

Las TN son representaciones de estados cuánticos de múltiples partículas que se basan en la estructura local de entrelazamiento. De cierto modo se puede decir que utilizamos el entrelazamiento para construir la función de onda para el sistema. Tómese como ejemplo un sistema cuántico con N partículas de espín $1/2$ cuyos eigenestados se pueden escribir de la forma,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N C_n |n\rangle. \quad (3.100)$$

Se puede describir cualquier función de onda del sistema, de manera ineficiente, en términos de

2^N coeficientes complejos C_n mientras escogamos una base individual $|n\rangle$ para los espines $n = 1, 2, \dots, N$. Siguiendo el planteamiento de Orús (2014), estos coeficientes se pueden entender como elementos de un tensor C con N índices, donde cada uno de los índices puede tomar dos valores, por ejemplo, espín arriba o espín abajo. Para reducir la complejidad en la representación del estado, se puede reemplazar el tensor C por una red de tensores de menor rango interconectados, donde cada uno de ellos tiene una cantidad pequeña de coeficientes, como se muestra en la Figura (3.6). En esta figura se han representado los tensores con formas y los índices con líneas. Se han representado los índices comunes entre los tensores sobre los cuales hay una suma sobre todos sus posibles valores con líneas que van de una forma hacia otra, representado los índices que conecta a tensores con tensores.

Se puede pensar en las TN como descomponer el estado cuántico en bloques fundamentales similares al ADN, llamados tensores con menos parámetros. Los tensores de menor rango son el ADN de la función de onda, en el sentido que todas las propiedades del estado cuántico de N partículas puede leerse de los de menor rango individualmente. Esta construcción es lo que se llama red tensorial Orús (2014).

El modelo de Heisenberg se utiliza dentro de las redes tensoriales para representar estados cuánticos conocidos y así poder extraer información intrínseca de los sistemas cuánticos como parte de una red tensorial y también para comparar los resultados de métodos alternativos aplicados a los mismo sistemas Ueda (2018).

Orús presenta una clasificación de los estados representados por TN. Estas pueden clasificarse en términos de las dimensiones a lo largo de las cuales los tensores se definen Orús (2014). De acuerdo a este criterio existen dos variaciones de clasificación:

3.5.3.1. Redes tensoriales sin dimensiones extra

Este caso corresponde a tener los tensores a lo largo de las dimensiones físicas del sistema que se describe, es decir, a lo largo de m dimensiones para un sistema de m dimensiones. De este tipo de redes tensoriales existen algunas familias, descritas a continuación.

Representación de estados cuánticos (MPS)

Orús (2014) nos relata que estos estados, por sus siglas en inglés correspondientes a *Matrix Product States*, son la base para algunos de los más poderosos métodos de simulación de sistemas cuánticos unidimensionales de muchas partículas, siendo el más prominente el algoritmo de Grupo de Normalización de la Matriz de densidad (DMRG). También es el fundamento para otros métodos, como Decimación por Bloque Evolucionante en Tiempo (TEBD) y como el Grupo de Renormalización de Potencias de Función de Onda (PWFRG).

Los MPS son estados de TN que corresponden a un arreglo unidimensional de tensores. Se tiene un tensor por sitio en el sistema cuántico unidimensional de N partículas. Lo índices tensoriales

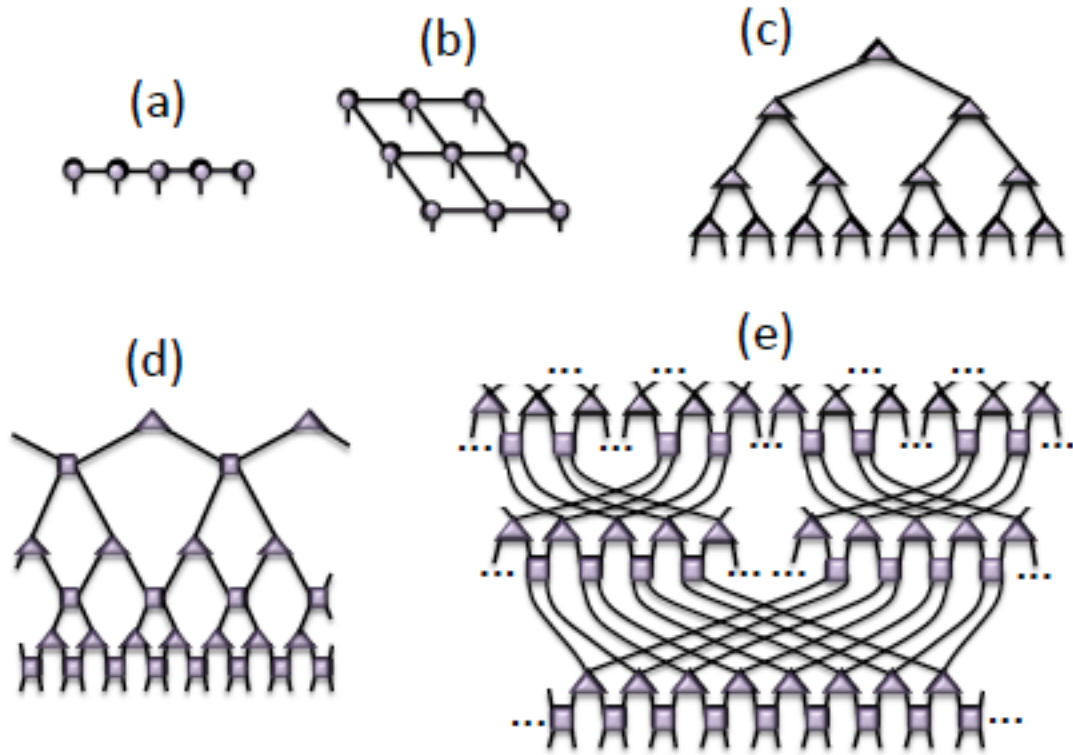


Figura 3.7: Ejemplos de estados TN

(a) MPS; (b) PEPS; (c) TTN; (d) MERA; (e) MERA de ramas, o *branching* MERA, en inglés.
Fuente: Orús (2014).

cerrados pueden tomar hasta D valores, mientras que los índices abiertos corresponden a los grados de libertad de los espacios de Hilbert locales en cada sitio del retículo. Ver la Figura (3.7).

Estados proyectados de pares entrelazados (PEPS)

Se conocen por sus siglas en inglés PEPS, que significa *Projected Entangled Pair States*. Esta familia de TN es la generalización natural de las MPS a más dimensiones. Por simplicidad considerarán únicamente 2 dimensiones. Como en el caso de los MPS, los índices PEPS tienen dimensión D . Se encuentran los PEPS bidimensionales en la base de varios métodos de simulación de sistemas cuánticos definidos sobre retículos, como los algoritmos PEPS e infinito-PEPS, así como métodos como el Grupo Tensorial de Renormalización TRG, el Segundo Grupo de Renormalización SRG, el Grupo de Renormalización Tensorial de Alto Orden (HOTRG), métodos basados en las Matrices de Transferencia de Esquina (CTM) y Tensores de Esquina.

Los PEPS tienen varias propiedades. Primero, se pueden definir en el límite termodinámico cuando escogemos que tengan invarianza traslacional bidimensional. Segundo, son densos en el sentido que al incrementar la dimensión de ligamiento D se recuperan progresivamente el espacio

de Hilbert completo. Tercero, la entropía de entrelazamiento de un bloque de tamaño $L \times L$ de un TN de tipo PEPS con dimensión de ligamiento D obedece a $S(L) \leq 4L \log D$. Esta propiedad la satisfacen los estados base y los primeros estados excitados de hamiltonianos bidimensionales con interacciones locales, como el de Heisenberg XY, por lo tanto los PEPS reproducen la estructura de entrelazamiento de tales estados cuánticos de la materia. Cuarto, los PEPS pueden tener longitud infinita de correlación, y por lo tanto pueden utilizarse funciones de correlación con decaimiento polinomial infinito. Quinto, la computación de valores esperados exactos de algún estado PEPS es un problema exponencialmente difícil, opuesto al caso de los MPS. Sexto, no tienen forma canónica dado que la TN bidimensional tiene bucles y entonces no se pueden asociar bases de Schmidt ortonormales a la izquierda o derecha a cada índice ligado.

3.5.3.2. Redes tensoriales con dimensiones extra

En estas TN, los tensores van a lo largo de las dimensiones físicas espaciales del retículo fundamental, pero también a lo largo de dimensiones *holográficas* extra.

Redes tensoriales arbóreas (TTN)

Estas estructuras asemejan un árbol y se conocen como *Tree Tensor Networks*, por lo que se les refiere, por sus siglas en inglés, como TTN. Estos estados no tienen bucles y tienen solo una dimensión extra, como se muestra en la Figura (3.7)(c). Los tensores se entienden en términos de la escala del ramal de la red, correspondiendo a la dimensión de los grados físicos de libertad.

Sus propiedades principales son: Primero, la entropía de entrelazamiento de L espines contiguos depende de la bipartición, donde algunas biparticiones obedecen a la ley de área unidimensional, mientras otras violan la ley de área logarítmicamente, como se observa en la Figura (3.8). Segundo, se pueden computar los valores esperados eficientemente. Tercero, Dado que su estructura no tiene bucles, las TTN admiten una forma canónica.

Ansatz de Renormalización de Entrelazamiento Multiescala (MERA)

Estos estados son llamados *Multi-Scale Entanglement Renormalization Ansatz* en inglés, por lo cual se denotan por sus siglas en este lenguaje, MERA. Son un tipo de estado TN en el cual los tensores van a lo largo de las dirección física tanto como de la dirección holográfica. Esta TN es la base de la llamada Renormalización de Entrelazamiento. Dentro de una TN de tipo MERA, los tensores deben cumplir con restricciones, donde deben ser unitarios o isométricos. En este tipo de TN, el entrelazamiento se construye localmente a cualquier escala dentro del sistema. Los tensores unitarios entrelazan los grados de libertad adyacentes a cualquier escala de longitud mientras que las isometrías vuelven menos fina la escala del sistema preservando así la normalización del estado cuántico, según Orús (2014).

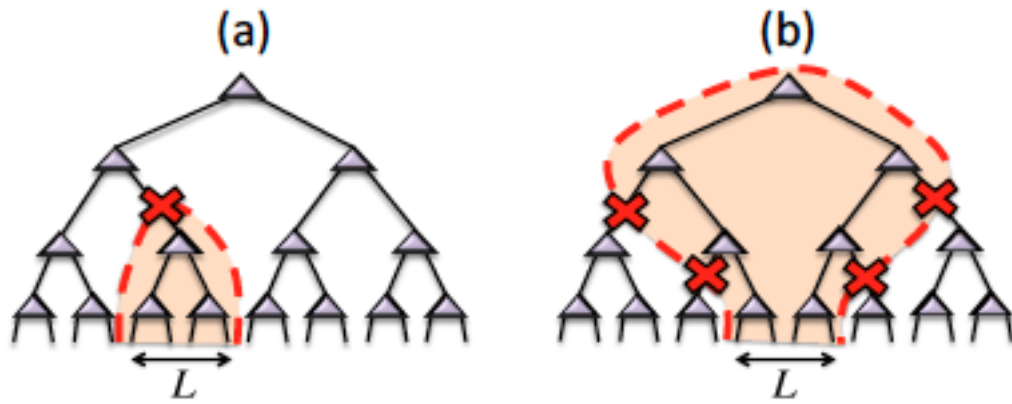


Figura 3.8: Ejemplos de estados TN del tipo TTN
 (a) MPS; (b) PEPS.

Fuente: Orús (2014)

4 El Ansatz de Bethe y la descripción del espectro de energía del modelo de Heisenberg XXZ

Bethe encontró en 1931 los eigenvalores y las eigenfunciones para un metal unidimensional, como él lo llamó en el momento, objeto llamado ahora cadena de espines. El describió este objeto como una cadena de muchísimos átomos arreglados linealmente cuya característica común era tener un único electrón con espín intrínseco en la capa de valencia. En la teoría de los metales, según el trabajo de Werner Heisenberg sobre el tema, Bethe expuso que solo se había trabajado con el movimiento de los electrones de conducción, y por consecuencia con la energía cinética dada por este movimiento, y que la interacción de intercambio no había sido incluida en el potencial que actúa sobre los electrones. En su opinión, era esencial abordar el problema del ferromagnetismo, asumiendo que los átomos están fijos en un retículo y considerar la interacción de intercambio como una perturbación Bethe (2011).

En su tesis, Bethe demostró que el método lograba calcular todos los eigenvalores para un cristal unidimensional, como él lo llamó, con una precisión arbitraria; esto implica que se puede resolver para las regiones de interés del hamiltoniano. También su método resulta en una cantidad exacta de eigenvalores para cada sector de espín del hamiltoniano que se quiera resolver. En la sección siguiente describirá el método de Bethe, ahora conocido como el Ansatz de Bethe.

4.1. Aplicación del Ansatz de Bethe para el modelo de Heisenberg XXX

Se calcula la energía del estado base, el primer estado excitado, el segundo estado excitado y el tercer estado excitado para mostrar la forma como funciona el método con un modelo más sencillo para introducirnos a los detalles antes de entrar a aplicarlo al modelo principal de estudio, que es la variante XXZ.

Estado base y primer estado excitado

Se inicia calculando el estado base y el primer estado excitado del hamiltoniano para el modelo de Heisenberg XXX, utilizando la ecuación (3.88) la sub sección (3.3) en su variante con los

operadores intercambio definidos en (3.70) y (3.71), se tiene

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_{n=1}^N [\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z], \quad (4.1)$$

Nótese que, como se muestra en la sección 3.2.8, el tamaño del hamiltoniano es de $2^N \times 2^N$, por lo tanto para sistemas con muchas partículas se torna imposible diagonalizarlo con métodos de diagonalización exacta.

Se puede reducir la complejidad de la matriz del hamiltoniano tomando en cuenta que existe simetría rotaciones con respecto al eje z del espacio de espín, dado que si se realiza un cambio de orientación de todos los espines en la cadena de manera simultánea, no se afectará el espín total. Esto implica que el componente en z del espín total $\mathbf{S}_T^z = \sum_{n=1}^N \mathbf{S}_n^z$ se conserva, siendo el espín total,

$$\mathbf{S}_T^z = \sum_{n=1}^N \mathbf{S}_n^z, \quad (4.2)$$

por lo que se debe cumplir,

$$[\mathcal{H}, \mathbf{S}_T^z] = 0. \quad (4.3)$$

Tomando el hamiltoniano de la ecuación (4.1) y realizando la conmutación con la ecuación(4.3) se escribe,

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}, \mathbf{S}_T^z] &= \left[-J\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z], \sum_{n=1}^N \mathbf{S}_n^z \right] \\ &= -J\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z, \mathbf{S}_n^z] \\ &= -J\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{ [\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x, \mathbf{S}_n^z] + [\mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y, \mathbf{S}_n^z] + [\mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z, \mathbf{S}_n^z] \}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Utilizaremos ahora la identidad de Leibniz $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ así

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}, \mathbf{S}_T^z] &= -J\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{ \mathbf{S}_n^x [\mathbf{S}_{n+1}^x, \mathbf{S}_n^z] + [\mathbf{S}_n^x, \mathbf{S}_n^z] \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y [\mathbf{S}_{n+1}^y, \mathbf{S}_n^z] + [\mathbf{S}_n^y, \mathbf{S}_n^z] \mathbf{S}_{n+1}^y \\ &\quad + \mathbf{S}_n^z [\mathbf{S}_{n+1}^z, \mathbf{S}_n^z] + [\mathbf{S}_n^z, \mathbf{S}_n^z] \mathbf{S}_{n+1}^z \}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Aplicaremos la propiedad (3.77) así

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}, \mathbf{S}_T^z] &= -J\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{ -\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^y - \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^y \} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (4.6)$$

Tomando en cuenta las reglas de aplicación listadas en la Tabla 3.2, la operación de \mathcal{H} en

$|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle$ da como resultado una combinación lineal de vectores base, cada uno de los cuales contiene el mismo número de espines orientados hacia abajo. Por lo tanto ordenar los vectores base con respecto a el número cuántico $\mathbf{S}_T^z = N/2 - M$ donde M representa el número total de espines hacia abajo, es todo lo que se requiere para diagonalizar por bloques la matriz del hamiltoniano. Dado que el espín total se conserva, el estado en el cual todos los espines apuntan hacia arriba debe ser un eigenestado del hamiltoniano. Así definimos el vacío ferromagnético,

$$|0\rangle = |+\dots+\rangle, \quad (4.7)$$

que corresponde a tener $M = 0$ espines hacia abajo. La ecuación (4.7) representa un eigenestado de \mathcal{H} dado que la ecuación de Schrödinger para $|0\rangle$ es,

$$\mathcal{H}|0\rangle = E_0|0\rangle, \quad (4.8)$$

calculando el valor esperado de \mathcal{H} para el vector $|0\rangle$ se tiene,

$$\begin{aligned} \langle 0|\mathcal{H}|0\rangle &= \langle 0| -J \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2}(\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z \right] |0\rangle \\ \langle \mathcal{H} \rangle &= -J \sum_{n=1}^N \langle 0| \left[\frac{1}{2}(\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z \right] |0\rangle \\ &= -J \sum_{n=1}^N \langle 0| \left[\frac{1}{2} \mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- |0\rangle + \frac{1}{2} \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+ |0\rangle + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z |0\rangle \right]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Expandiendo las sumarias se tiene,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle &= -J \langle 0| \left(\frac{1}{2} \mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^- |0\rangle + \frac{1}{2} \mathbf{S}_1^- \mathbf{S}_2^+ |0\rangle + \mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z |0\rangle \right) \dots \\ &\quad -J \langle 0| \left(\frac{1}{2} \mathbf{S}_N^+ \mathbf{S}_1^- |0\rangle + \frac{1}{2} \mathbf{S}_N^- \mathbf{S}_1^+ |0\rangle + \mathbf{S}_N^z \mathbf{S}_1^z |0\rangle \right). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Donde el primer término corresponde a $n = 1$ y el último término corresponde a $n = N$. Nótese que se aplicó la condición de frontera periódica donde $N + 1 = 1$, asegurando la periodicidad de la cadena. Aplicando las reglas de la Tabla 3.2, se obtiene,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle &= -J \langle 0| \left(0 + 0 + \frac{1}{4} |0\rangle \right) \dots \\ &\quad -J \langle 0| \left(0 + 0 + \frac{1}{4} |0\rangle \right) \\ &= -J \left[\frac{N}{4} \langle 0|0\rangle \right] \\ &= -\frac{JN}{4}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

es decir que la energía del estado base es,

$$E_0 = \langle \mathcal{H} \rangle = -\frac{JN}{4}. \quad (4.12)$$

Ahora considérese el caso con $M = 1$, que corresponde a tener un espín hacia abajo. Los N vectores base del espacio invariante correspondiente se etiquetan con la posición del espín hacia abajo,

$$|n\rangle = \mathbf{S}_n^- |0\rangle, \quad (4.13)$$

con $n = 1, \dots, N$ y donde $n = N + 1 = 1$. Para diagonalizar el bloque del hamiltoniano \mathcal{H} correspondiente a $M = 1$ se debe tomar en cuenta la simetría traslacional, lo que significa que el hamiltoniano \mathcal{H} es invariante con respecto a traslaciones discretas del espín que apunta hacia abajo del espacio donde se encuentra en el retículo hacia cualquier otro espacio cualquier cantidad de veces. Probar que el hamiltoniano tiene simetría traslacional es importante; así como en la mecánica clásica las simetrías se evalúan por medio de brackets de Poisson, en mecánica cuántica se evalúan por medio de conmutadores. Los vectores base invariantes traslacionalmente se pueden construir si se escribe,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} |n\rangle, \quad (4.14)$$

para número de onda $k = 2\pi m/N$ con $m = 0, \dots, N - 1$. Se introduce el operador traslación T_n , el cual se comporta de la siguiente manera,

$$T |++--\rangle = |+- -+\rangle, \quad (4.15)$$

y se define explícitamente como

$$T_{n,n+1} = \mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+. \quad (4.16)$$

Ahora demostraremos que $[T_{n,n+1}, \mathcal{H}_{n,n+1}] = 0$. Se utilizará un vector de prueba, dado por,

$$\begin{pmatrix} |+\rangle \otimes |+\rangle \\ |+\rangle \otimes |-\rangle \\ |-\rangle \otimes |+\rangle \\ |-\rangle \otimes |-\rangle \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Nótese que las combinaciones de los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$ mostradas en el vector de prueba (4.17) son todas las posibles combinaciones que pueden existir a lo largo de la cadena de espines. Ahora bien,

tenemos que

$$\begin{aligned}
[T_{n,n+1}, \mathcal{H}_{n,n+1}] &= [\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+, \mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+ + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z] \\
&= (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+ + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z) \\
&\quad - (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+ + \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z) (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) \\
&= (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z - \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+).
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Operando el conmutador con el vector de prueba se tiene,

$$\begin{aligned}
[T_{n,n+1}, \mathcal{H}_{n,n+1}] \begin{pmatrix} |+\rangle \otimes |+\rangle \\ |+\rangle \otimes |-\rangle \\ |-\rangle \otimes |+\rangle \\ |-\rangle \otimes |-\rangle \end{pmatrix} &= (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z \begin{pmatrix} |+\rangle \otimes |+\rangle \\ |+\rangle \otimes |-\rangle \\ |-\rangle \otimes |+\rangle \\ |-\rangle \otimes |-\rangle \end{pmatrix} \cdots \\
&\quad - \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) \begin{pmatrix} |+\rangle \otimes |+\rangle \\ |+\rangle \otimes |-\rangle \\ |-\rangle \otimes |+\rangle \\ |-\rangle \otimes |-\rangle \end{pmatrix} \\
&= (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) \begin{pmatrix} |+\rangle \otimes |+\rangle \\ -|+\rangle \otimes |-\rangle \\ -|-\rangle \otimes |+\rangle \\ |-\rangle \otimes |-\rangle \end{pmatrix} \cdots, \tag{4.19} \\
&\quad - \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z \begin{pmatrix} 0 \\ |-\rangle \otimes |+\rangle \\ |+\rangle \otimes |-\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 \\ -|-\rangle \otimes |+\rangle \\ -|+\rangle \otimes |-\rangle \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ -|-\rangle \otimes |+\rangle \\ -|+\rangle \otimes |-\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= 0,
\end{aligned}$$

por lo que se afirma que $T_{n,n+1}$ y $\mathcal{H}_{n,n+1}$ conmutan y por lo tanto $\mathcal{H}_{n,n+1}$ tiene simetría traslacional. Calculando el valor esperado para el hamiltoniano presentado en la ecuación, se demostrará que las funciones de la ecuación (4.14) son también eigenfunciones del hamiltoniano \mathcal{H} mostrado

en (4.1). Se procede con

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{-ikn} \langle n | \left\{ -\frac{J}{2} \sum_{l=1}^N \left[\frac{1}{2} (\mathbf{S}_l^+ \mathbf{S}_{l+1}^- + \mathbf{S}_l^- \mathbf{S}_{l+1}^+) + \mathbf{S}_l^z \mathbf{S}_{l+1}^z \right] \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n'=1}^N e^{ikn'} |n'\rangle \right\}, \quad (4.20)$$

$$\langle H \rangle = -\frac{J}{N} \sum_{n=1}^N e^{-ikn} \langle n | \left\{ \sum_{l=1}^N \left[\frac{1}{2} \mathbf{S}_l^+ \mathbf{S}_{l+1}^- + \frac{1}{2} \mathbf{S}_l^- \mathbf{S}_{l+1}^+ + \mathbf{S}_l^z \mathbf{S}_{l+1}^z \right] \sum_{n'=1}^N e^{ikn'} |n'\rangle \right\}, \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = & -\frac{J}{N} \sum_{n=1}^N e^{-ikn} \langle n | \left\{ \sum_{l=1}^N \frac{1}{2} \mathbf{S}_l^+ \mathbf{S}_{l+1}^- \sum_{n'=1}^N e^{ikn'} |n'\rangle + \right. \\ & \left. + \sum_{l=1}^N \frac{1}{2} \mathbf{S}_l^- \mathbf{S}_{l+1}^+ \sum_{n'=1}^N e^{ikn'} |n'\rangle + \sum_{l=1}^N \mathbf{S}_l^z \mathbf{S}_{l+1}^z \sum_{n'=1}^N e^{ikn'} |n'\rangle \right\}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

a partir de ahora se van a considerar tres ecuaciones por separado asociadas a la ecuación (4.22) de la siguiente manera,

$$\chi_1 = \frac{-J}{N} \sum_{n=1}^N e^{-ikn} \langle n | \left\{ \sum_{l=1}^N \frac{1}{2} \mathbf{S}_l^+ \mathbf{S}_{l+1}^- \left[\sum_{n'=1}^N e^{ikn'} |n'\rangle \right] \right\}, \quad (4.23)$$

$$\chi_2 = \frac{-J}{N} \sum_{n=1}^N e^{-ikn} \langle n | \left\{ \sum_{l=1}^N \frac{1}{2} \mathbf{S}_l^- \mathbf{S}_{l+1}^+ \left[\sum_{n'=1}^N e^{ikn'} |n'\rangle \right] \right\}, \quad (4.24)$$

$$\chi_3 = \frac{-J}{N} \sum_{n=1}^N e^{-ikn} \langle n | \left\{ \sum_{l=1}^N \mathbf{S}_l^z \mathbf{S}_{l+1}^z \left[\sum_{n'=1}^N e^{ikn'} |n'\rangle \right] \right\}, \quad (4.25)$$

donde

$$\langle H \rangle = \chi_1 + \chi_2 + \chi_3. \quad (4.26)$$

Empezando con la ecuación (4.23) y asociando los términos e^{-ikn} y $e^{ikn'}$, se tiene

$$\chi_1 = -\frac{J}{N} \sum_{n=1}^N \langle n | \left\{ \sum_{l=1}^N \frac{1}{2} \mathbf{S}_l^+ \mathbf{S}_{l+1}^- \left[\sum_{n'=1}^N e^{ik(n'-n)} |n'\rangle \right] \right\}. \quad (4.27)$$

Expandiendo la suma sobre n' se puede escribir

$$\chi_1 = -\frac{J}{N} \sum_{n=1}^N \langle n | \left\{ \sum_{l=1}^N \frac{1}{2} \mathbf{S}_l^+ \mathbf{S}_{l+1}^- \left[e^{ik(1-n)} |1\rangle + \dots + e^{ik(N-n)} |N\rangle \right] \right\}. \quad (4.28)$$

donde el primer término expandido dentro de los corchetes corresponde a $n' = 1$ y el último

corresponde a $n' = N$. Ahora expandiendo la suma sobre l que contiene los operadores $\mathbf{S}_l^+ \mathbf{S}_{l+1}^-$ resulta en

$$\begin{aligned} \chi_1 = & -\frac{J}{2N} \sum_{n=1}^N \langle n | \{ \mathbf{S}_1^+ \mathbf{S}_2^- [e^{ik(1-n)} |1\rangle + e^{ik(2-n)} |2\rangle + \dots + e^{ik(N-n)} |N\rangle] \\ & \dots + \mathbf{S}_N^+ \mathbf{S}_1^- [e^{ik(1-n)} |1\rangle + e^{ik(2-n)} |2\rangle + \dots + e^{ik(N-n)} |N\rangle] \}, \end{aligned} \quad (4.29)$$

aplicando los operadores $\mathbf{S}_l^+ \mathbf{S}_{l+1}^-$ a cada estado

$$\begin{aligned} \chi_1 = & -\frac{J}{2N} \sum_{n=1}^N \langle n | \{ [e^{ik(1-n)} |2\rangle + e^{ik(2-n)} * 0 + \dots + e^{ik(N-n)} * 0] \\ & \dots + [e^{ik(1-n)} * 0 + e^{ik(2-n)} * 0 + \dots + e^{ik(N-n)} |1\rangle] \}, \\ = & -\frac{J}{2N} \sum_{n=1}^N \langle n | \{ e^{ik(1-n)} |2\rangle + e^{ik(2-n)} |3\rangle + \dots + e^{ik(N-1-n)} |N\rangle + e^{ik(N-n)} |1\rangle \}, \end{aligned} \quad (4.30)$$

ahora, expandiendo la suma sobre n que representa los estados conjugados, se obtiene

$$\begin{aligned} \chi_1 = & -\frac{J}{2N} \{ [e^{ik(1-1)} \langle 1 | 2\rangle + e^{ik(2-1)} \langle 1 | 3\rangle + \dots + e^{ik(N-1)} \langle 1 | 1\rangle] \\ & \dots + [e^{ik(1-N)} \langle N | 2\rangle + e^{ik(2-N)} \langle N | 3\rangle + \dots + e^{ik(N-1-N)} \langle N | N\rangle + e^{ik(N-N)} \langle N | 1\rangle] \}, \\ = & -\frac{J}{2N} \{ [e^{ik(0)} * 0 + \dots + e^{ik(N-1)}] + \dots + [e^{ik(1-N)} * 0 + \dots + e^{ik(-1)} + e^{ik(0)} * 0] \} \\ = & -\frac{J}{2N} \{ e^{ik(N-1)} + (N-1)e^{-ik} \} \\ = & -\frac{J}{2N} \{ e^{ikN} e^{-ik} + (N-1)e^{-ik} \}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Recordando la condición cíclica de frontera, podemos reescribir χ_1 así,

$$\chi_1 = -\frac{J}{2N} \{ e^{-ik}(1 + N - 1) \} = -\frac{J}{2N} \{ N e^{-ik} \} = -\frac{J}{2} e^{-ik}. \quad (4.32)$$

Procediendo de manera similar con la ecuación (4.24) se tiene,

$$\chi_2 = -\frac{J}{N} \sum_{n=1}^N \langle n | \left\{ \sum_{l=1}^N \frac{1}{2} \mathbf{S}_l^- \mathbf{S}_{l+1}^+ \left[\sum_{n'=1}^N e^{ik(n'-n)} |n'\rangle \right] \right\}, \quad (4.33)$$

expandiendo la suma sobre n' se puede escribir,

$$\chi_2 = -\frac{J}{2N} \sum_{n=1}^N \langle n | \left\{ \sum_{l=1}^N \mathbf{S}_l^- \mathbf{S}_{l+1}^+ [e^{ik(1-n)} |1\rangle + \dots + e^{ik(N-n)} |N\rangle] \right\}, \quad (4.34)$$

donde el primer término dentro de los corchetes corresponde a $n' = 1$ y el último término corres-

ponde a $n' = N$. Ahora expandiendo la suma sobre l que contiene los operadores $\mathbf{S}_l^- \mathbf{S}_{l+1}^+$

$$\begin{aligned} \chi_2 = & -\frac{J}{2N} \sum_{n=1}^N \langle n | \{ \mathbf{S}_1^- \mathbf{S}_2^+ [e^{ik(1-n)} |1\rangle + e^{ik(2-n)} |2\rangle + \dots + e^{ik(N-n)} |N\rangle] \\ & + \mathbf{S}_N^- \mathbf{S}_1^+ [e^{ik(1-n)} |1\rangle + e^{ik(2-n)} |2\rangle + \dots + e^{ik(N-n)} |N\rangle] \} \end{aligned} \quad (4.35)$$

aplicando los operadores $\mathbf{S}_l^- \mathbf{S}_{l+1}^+$ a cada estado,

$$\begin{aligned} \chi_2 = & -\frac{J}{2N} \sum_{n=1}^N \langle n | \{ [e^{ik(1-n)} * 0 + e^{ik(2-n)} |1\rangle + \dots + e^{ik(N-n)} * 0] \\ & + [e^{ik(1-n)} |N\rangle + e^{ik(2-n)} * 0 + \dots + e^{ik(N-n)} * 0] \} \\ = & -\frac{J}{2N} \sum_{n=1}^N \langle n | \{ e^{ik(2-n)} |1\rangle + e^{ik(3-n)} |2\rangle + \dots + e^{ik(1-n)} |N\rangle \} \end{aligned} \quad (4.36)$$

finalmente expandiendo la suma sobre n que representa los estados conjugados se obtiene,

$$\begin{aligned} \chi_2 = & -\frac{J}{2N} \{ [e^{ik(2-1)} \langle 1 | 1\rangle + e^{ik(3-1)} \langle 1 | 2\rangle + \dots + e^{ik(N-N)} \langle 1 | N\rangle] \\ & [e^{ik(2-N)} \langle N | 1\rangle + e^{ik(3-N)} \langle N | 2\rangle + \dots + e^{ik(1-N)} \langle N | N\rangle] \} \end{aligned} \quad (4.37)$$

$$\chi_2 = -\frac{J}{2N} \{ (N-1)e^{ik} + e^{ik(1-N)} \}, \quad (4.38)$$

recordando la condición cíclica de frontera, se escribe,

$$\chi_2 = -\frac{J}{2N} \{ (N-1)e^{ik} + e^{ik} e^{-ikN} \} = -\frac{J}{2N} \{ (N-1)e^{ik} + e^{ik} \}, \quad (4.39)$$

$$\chi_2 = -\frac{J}{2N} \{ e^{ik}(N-1+1) \} = -\frac{J}{2N} \{ N e^{ik} \} = -\frac{J}{2} e^{ik}, \quad (4.40)$$

Ahora partiendo de la ecuación (4.25) y procediendo similarmente que con las ecuaciones (4.23) y (4.24) se tiene,

$$\chi_3 = \frac{-J}{N} \sum_{n=1}^N \langle n | \left\{ \sum_{l=1}^N \mathbf{S}_l^z \mathbf{S}_{l+1}^z \left[\sum_{n'=1}^N e^{ik(n'-n)} |n'\rangle \right] \right\} \right\rangle, \quad (4.41)$$

expandiendo la suma sobre n' se puede escribir,

$$\chi_3 = \frac{-J}{N} \sum_{n=1}^N \langle n | \left\{ \sum_{l=1}^N \mathbf{S}_l^z \mathbf{S}_{l+1}^z [e^{ik(1-n)} |1\rangle + \dots + e^{ik(N-n)} |N\rangle] \right\} \right\rangle, \quad (4.42)$$

donde el primer término dentro de los corchetes corresponde a $n' = 1$ y el último término corres-

ponde a $n' = N$. ahora expandiendo la suma sobre l que contiene los operadores $\mathbf{S}_l^z \mathbf{S}_{l+1}^z$ resulta,

$$\begin{aligned} \chi_3 = & -\frac{J}{N} \sum_{n=1}^N \langle n | \{ \mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_2^z [e^{ik(1-n)} |1\rangle + \dots + e^{ik(N-n)} |N\rangle] \\ & \dots + \mathbf{S}_N^z \mathbf{S}_1^z [e^{ik(1-n)} |1\rangle + \dots + e^{ik(N-n)} |N\rangle] \}, \end{aligned} \quad (4.43)$$

aplicando los operadores $\mathbf{S}_l^z \mathbf{S}_{l+1}^z$ a cada estado,

$$\begin{aligned} \chi_3 = & -\frac{J}{N} \sum_{n=1}^N \langle n | \{ [-\frac{1}{4} e^{ik(1-n)} |1\rangle + \dots + \frac{1}{4} e^{ik(N-n)} |N\rangle] \\ & \dots + [-\frac{1}{4} e^{ik(1-n)} |1\rangle + \dots - \frac{1}{4} e^{ik(N-n)} |N\rangle] \}, \end{aligned} \quad (4.44)$$

expandiendo la suma sobre n se obtiene,

$$\begin{aligned} \chi_3 = & -\frac{J}{N} \left(\left\{ [-\frac{1}{4} e^{ik(1-1)} \langle 1 | 1 \rangle - \frac{1}{4} e^{ik(2-1)} \langle 1 | 2 \rangle + \dots + \frac{1}{4} e^{ik(N-1)} \langle 1 | N \rangle] \right. \right. \\ & \dots + [-\frac{1}{4} e^{ik(1-1)} \langle 1 | 1 \rangle + \frac{1}{4} e^{ik(2-1)} \langle 1 | 2 \rangle + \dots - \frac{1}{4} e^{ik(N-1)} \langle 1 | N \rangle] \left. \right\} \\ & \dots + \left\{ [-\frac{1}{4} e^{ik(1-N)} \langle N | 1 \rangle - \frac{1}{4} e^{ik(2-N)} \langle N | 2 \rangle + \dots + \frac{1}{4} e^{ik(N-N)} \langle N | N \rangle] \right. \\ & \dots + [-\frac{1}{4} e^{ik(1-N)} \langle N | 1 \rangle + \frac{1}{4} e^{ik(2-N)} \langle N | 2 \rangle + \dots - \frac{1}{4} e^{ik(N-N)} \langle N | N \rangle] \left. \right\} \Big) \\ \chi_3 = & -\frac{J}{N} \left(\left\{ [-\frac{1}{4} e^{ik(0)} - \frac{1}{4} e^{ik(2-1)} * 0 + \dots + \frac{1}{4} e^{ik(N-1)} * 0] \right. \right. \\ & \dots + [-\frac{1}{4} e^{ik(0)} + \frac{1}{4} e^{ik(2-1)} * 0 + \dots - \frac{1}{4} e^{ik(N-1)} * 0] \left. \right\} \\ & \dots + \left\{ [-\frac{1}{4} e^{ik(1-N)} * 0 - \frac{1}{4} e^{ik(2-N)} * 0 + \dots + \frac{1}{4} e^{ik(0)}] \right. \\ & \dots + [-\frac{1}{4} e^{ik(1-N)} * 0 + \frac{1}{4} e^{ik(2-N)} * 0 + \dots - \frac{1}{4} e^{ik(0)}] \left. \right\} \Big) \\ \chi_3 = & -\frac{J}{N} \left(\left\{ [-\frac{1}{4} e^{ik(0)}] + \dots + [-\frac{1}{4} e^{ik(0)}] \right\} + \dots + \left\{ [\frac{1}{4} e^{ik(0)}] + \dots + [-\frac{1}{4} e^{ik(0)}] \right\} \right), \end{aligned} \quad (4.45)$$

Nótese que los elementos de la matriz que sobreviven para cada $n = 1, 2, \dots, N$ suman N , de los cuales existen siempre 2 elementos que son negativos mientras que el resto es positivo, lo cual resulta en

$$\begin{aligned} \chi_3 = & -\frac{J}{N} \left(\left\{ [-\frac{1}{4}] + [\frac{1}{4}] + \dots + [\frac{1}{4}] + [-\frac{1}{4}] \right\} + \dots + \left\{ [\frac{1}{4}] + [\frac{1}{4}] + \dots + [-\frac{1}{4}] + [-\frac{1}{4}] \right\} \right) \\ = & -\frac{J}{N} \left(\left\{ (N-2) [\frac{1}{4}] + 2 * [-\frac{1}{4}] \right\} + \dots + \left\{ (N-2) [\frac{1}{4}] + 2 * [-\frac{1}{4}] \right\} \right) \\ = & -\frac{J}{N} \left(N(N-2) [\frac{1}{4}] + 2N [-\frac{1}{4}] \right) \\ = & -J \left[\frac{N}{4} - 1 \right], \end{aligned} \quad (4.46)$$

Regresando a la ecuación (4.26) y sustituyendo los términos χ_1, χ_2, χ_3 por las ecuaciones (4.23), (4.38) y (4.46) respectivamente, se escribe

$$\langle H \rangle = -\frac{J}{2} e^{-ik} - \frac{J}{2} e^{ik} - J \left[\frac{N}{4} - 1 \right] = -J \left\{ \left(\frac{e^{ik} + e^{-ik}}{2} \right) + \frac{N}{4} - 1 \right\}, \quad (4.47)$$

$$\langle H \rangle = -J \left\{ \cos(k) - 1 + \frac{N}{4} \right\} = J(1 - \cos k) + \frac{JN}{4}, \quad (4.48)$$

recordando que la ecuación (4.12) da la energía del estado base, se sustituye para obtener,

$$\langle H \rangle = J(1 - \cos k) + E_0, \quad (4.49)$$

dado que el valor esperado del hamiltoniano $\langle H \rangle$ es la energía total de la cadena de espines se reescribe,

$$E - E_0 = J(1 - \cos k), \quad (4.50)$$

Ahora se puede decir que las funciones $|\psi\rangle$ de la ecuación (4.14), siendo eigenfunciones del hamiltoniano \mathcal{H} de la ecuación (4.22), los eigenvalores (4.50) son también eigenvalores de la ecuación de Schrödinger $\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Las eigenfunciones de la ecuación (4.14) representan excitaciones de un magnón trasladándose a lo largo de la cadena de espines Karbach (1997). El estado $|0\rangle$ representa el vacío ferromagnético sobre el cual el alineamiento de sus espines en dirección hacia arriba es periódicamente perturbado por una onda de espín con longitud de onda $\lambda = 2\pi/k$.

Primer estado excitado $M = 1$ y segundo estado excitado $M = 2$.

Se resolverán los casos para $M = 1$ y para $M = 2$, para luego generalizar para un M arbitrario. Resolver estos casos particulares da la intuición de cómo funciona el Ansatz de Bethe.

Se pueden construir vectores invariantes ante traslación con,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} |n\rangle, \quad (4.51)$$

para números de onda $k = 2\pi m/N$ para $m = 0, 1, \dots, N-1$. Los vectores $|\psi\rangle$ son eigenestados del operador traslación $T_{n,n+1}$ de la ecuación (4.16) con eigenvalores e^{ik} y al mismo tiempo son eigenestado de \mathcal{H} con eigenvalores

$$E - E_0 = J(1 - \cos k). \quad (4.52)$$

Siguiendo con el método Ansatz de Bethe, se procede de manera distinta. Para $M = 1$, cada eigenestado es una superposición de ondas de los vectores base,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N a(n) |n\rangle, \quad (4.53)$$

donde los vectores $|n\rangle$ corresponden a los presentados en la ecuación (4.13). El eigenestado $|\psi\rangle$ es una solución de la ecuación de Schrödinger $\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ si los coeficientes $a(n)$ satisfacen las

ecuaciones lineales,

$$2[E - E_0]a(n) = J[2a(n) - a(n-1) - a(n+1)], \quad (4.54)$$

para $n = 1, 2, \dots, N$ y con condiciones de frontera periódicas $a(n+N) = a(n)$. N soluciones linealmente independientes de la ecuación 4.54 son,

$$a(n) = e^{ikn}, \quad (4.55)$$

donde $k = \frac{2\pi}{N}m$ para $m = 0, 1, \dots, N-1$. Haber propuesto los coeficientes de la ecuación (4.55) fue lo que Hans Bethe llamó el Ansatz, palabra que traducida del alemán significa hipótesis Bethe (2011). Sustituyendo los coeficientes de la ecuación (4.55) a la ecuación (4.53) se tiene,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N e^{ikn} |n\rangle, \quad (4.56)$$

la cual se asemeja a la ecuación (4.14) con la que se construyó la base de los vectores traslacionalmente invariantes utilizados para diagonalizar el hamiltoniano de Heisenberg XXX, con $M = 1$ espines con dirección hacia abajo. La diferencia radica en la normalización. Para normalizar la ecuación (4.56) se procede así,

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n'=1}^N e^{-ikn'} \langle n'| \left[\sum_{n=1}^N e^{ikn} |n\rangle \right], \quad (4.57)$$

donde

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1, \quad (4.58)$$

es la condición de normalización. Por lo tanto se tiene,

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n'=1}^N e^{-ikn'} \langle n'| \left[\sum_{n=1}^N e^{ikn} |n\rangle \right] = \sum_{n'=1}^N \langle n'| \left[\sum_{n=1}^N e^{ik(n-n')} |n\rangle \right], \quad (4.59)$$

procediendo a expandir la sumatoria sobre n se tiene,

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n'=1}^N \langle n'| \left[e^{ik(1-n')} |1\rangle + e^{ik(2-n')} |2\rangle + \dots + e^{ik(N-n')} |N\rangle \right], \quad (4.60)$$

ahora expandiendo la sumatoria sobre n' que corresponde a los conjugados de la ecuación (4.56), se tiene,

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= \{ \langle 1| [e^{ik(0)} |1\rangle + e^{ik} |2\rangle + \dots + e^{ik(N-1)} |N\rangle] + \\ &+ \langle 2| [e^{-ik} |1\rangle + e^{ik(0)} |2\rangle + \dots + e^{ik(N-2)} |N\rangle] + \dots \\ &\dots + \langle N| [e^{ik(1-N)} |1\rangle + e^{ik(2-N)} |2\rangle + \dots + e^{ik(0)} |N\rangle] \}, \end{aligned} \quad (4.61)$$

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \psi \rangle &= \{ [e^{ik(0)} \langle 1 | 1 \rangle + e^{ik} \langle 1 | 2 \rangle + \dots + e^{ik(N-1)} \langle 1 | N \rangle] + \\
&+ [e^{-ik} \langle 2 | 1 \rangle + e^{ik(0)} \langle 2 | 2 \rangle + \dots + e^{ik(N-2)} \langle 2 | N \rangle] + \dots \\
&\dots + [e^{ik(1-N)} \langle N | 1 \rangle + e^{ik(2-N)} \langle N | 2 \rangle + \dots + e^{ik(0)} \langle N | N \rangle] \},
\end{aligned} \tag{4.62}$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = N, \tag{4.63}$$

por lo tanto, para que se cumpla la condición de normalización de la ecuación (4.58),

$$\frac{\langle \psi | \psi \rangle}{N} = 1, \tag{4.64}$$

entonces se reescribe,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} |n\rangle, \tag{4.65}$$

la cual es idéntica a la ecuación (4.14), por lo tanto estas son eigenfunciones del hamiltoniano (4.1) con eigenvalores descritos por la ecuación (4.50).

Para el caso $M = 2$, la configuración general de la cadena de espines corresponde a tener dos espines con su orientación para abajo, es decir,

$$|n_1, n_2\rangle = \mathbf{S}_{n_1}^- \mathbf{S}_{n_2}^- |0\rangle, \tag{4.66}$$

las características del Ansatz de Bethe cobran importancia. En este caso se deben determinar los coeficientes $a(n_1, n_2)$ para todos los eigenestados,

$$|\psi\rangle = \sum_{1 \leq n_1 \leq n_2 \leq N} a(n_1, n_2) |n_1, n_2\rangle, \tag{4.67}$$

donde los vectores de la ecuación (4.66) son los vectores base en el subespacio de dimensión $N(N-1)/2$. Los coeficientes del Ansatz de Bethe para este caso es,

$$a(n_1, n_2) = Ae^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + Be^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)}. \tag{4.68}$$

Si suponemos que $A = B$, si se usan los mismos valores para k_1 y k_2 y si se interpreta la función de onda como una superposición de dos magnones, el resultado sería un conjunto sobre completo de $N(N+1)/2$ estados no ortogonales. Se requiere que al cambiar la orientación hacia abajo de dos o más espines, estos ocupen sitios diferentes, por lo cual se entra en conflicto con una superposición de ondas de espín.

La ecuación de eigenvalores para los estados de la ecuación (4.67) es ahora,

$$\begin{aligned}
2[E - E_0]a(n_1, n_2) &= J[2a(n_1, n_2) - a(n_1 - 1, n_2) - a(n_1 + 1, n_2) + \\
&2a(n_1, n_2) - a(n_1, n_2 - 1) - a(n_1, n_2 + 1)],
\end{aligned} \tag{4.69}$$

para $n_2 > n_1 + 1$. En esta ecuación se considera que los estados $\mathbf{S}_{n_1}^- |0\rangle$ y $\mathbf{S}_{n_2}^- |0\rangle$ están separados por al menos un sitio. Para los casos donde $\mathbf{S}_{n_1}^- |0\rangle$ y $\mathbf{S}_{n_2}^- |0\rangle$ son adyacentes, se tiene la ecuación,

$$2[E - E_0]a(n_1, n_2) = J[2a(n_1, n_2) - a(n_1 - 1, n_2) - a(n_1, n_2 + 2)], \quad (4.70)$$

con $n_2 = n_1 + 1$. La ecuación (4.69) se cumple con la ecuación (4.68) para constantes arbitrarias si la energía depende de k_1 y k_2 así,

$$E - E_0 = J \sum_{i=1,2} (1 - \cos k_i). \quad (4.71)$$

Ahora la ecuación (4.70) merece otro tratamiento ya que difiere de la ecuación (4.69) para $n_2 = n_1 + 1$. Substrayendo la ecuación (4.70) de la ecuación (4.69) y haciendo $n_2 = n_1 + 1$ tenemos,

$$2(n_1, n_1 + 1) = a(n_1, n_1) + a(n_1 + 1, n_1 + 1). \quad (4.72)$$

Esto implica que los coeficientes $a(n_1, n_2)$ son soluciones de las ecuaciones (4.69) y (4.70) si tienen la forma de la ecuación (4.68) y satisfacen la ecuación (4.72). Nótese que las constantes A y B de la ecuación (4.68) representan amplitudes y deben estar escaladas similarmente,

$$\frac{A}{B} = e^{i\theta} = -\frac{e^{i(k_1+k_2)} + 1 - 2e^{ik_1}}{e^{i(k_1+k_2)} + 1 - 2e^{i2}}, \quad (4.73)$$

debemos incorporar esta condición al Ansatz propuesto en la ecuación (4.68) así,

$$a(n_1, n_2) = Ae^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2 + \frac{1}{2}\theta_{12})} + Be^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2 + \frac{1}{2}\theta_{21})}, \quad (4.74)$$

donde el ángulo de fase $\theta_{12} = -\theta_{21} \equiv \theta$ depende de k_1 y k_2 por medio de la ecuación (4.73). En forma real, se procede así,

$$2 \cot \frac{\theta}{2} = \cot \frac{k_1}{2} - \cot \frac{k_2}{2}. \quad (4.75)$$

Se llamará a las cantidades k_1 y k_2 momentos de la función de onda del Ansatz de Bethe (4.67) cuyos coeficientes corresponden a la ecuación (4.74). Como se probó en la ecuación (4.19), la cadena tiene invarianza traslacional, lo cual implica que $a(n_1, n_2) = a(n_2, n_1 + N)$. Tomando el logaritmo de $e^{ik_1 N} = e^{i\theta}$ y de $e^{ik_2 N} = e^{-i\theta}$ se tiene

$$Nk_1 = 2\pi\lambda_1 + \theta, \quad (4.76)$$

$$Nk_2 = 2\pi\lambda_2 - \theta, \quad (4.77)$$

donde $\lambda_i \in \{0, 1, \dots, N - 1\}$ son llamados números cuánticos de Bethe. Falta encontrar todos los

pares (λ_1, λ_2) que den soluciones a las ecuaciones de Bethe (4.75), (4.76) y (4.77). Cada eigenestado del subespacio $M = 2$ puede encontrarse de esta manera. Para toda solución con θ , k_1 y k_2 , el eigenestado tiene coeficientes de la forma (4.74). La expresión (4.71) y la relación de los números cuánticos de Bethe,

$$k = k_1 + k_2 = \frac{2\pi}{N} (\lambda_1 + \lambda_2), \quad (4.78)$$

son similares a dos magnones superpuestos, cuya interacción se refleja en la relación de fase θ y en la desviación de los momentos k_1 y k_2 de los valores correspondientes a los números de onda de un magnón dados en (4.55), según Karbach (1997).

Tercer estado excitado $M = 3$.

Tomando en consideración el sector del hamiltoniano donde $\mathbf{S}_T^Z = \frac{N}{2} - 3$, o bien, cuando se tienen tres desviaciones con respecto al estado base $|0\rangle$. Como hay tres espines cambiados, se pueden tener tres ecuaciones para los coeficientes $a(n_1, n_2, n_3)$ tal y como fueron escritas para el caso $M = 2$. Nuevamente tenemos una ecuación única para el caso que no haya adyacencia,

$$a(n_1, n_2, n_3) = e^{ik_1 n_1} e^{ik_2 n_2} e^{ik_3 n_3}. \quad (4.79)$$

La energía está dada por

$$E = -J (3 - \cos k_1 - \cos k_2 - \cos k_3), \quad (4.80)$$

lo que corresponde a la energía de 3 magnones libres, aunque con distintas funciones de onda que para un magnón libre. Para todo valor de E cualquier permutación de k_1 , k_2 y k_3 será una solución, por lo que se puede escribir,

$$\begin{aligned} a(n_1, n_2, n_3) = & A_1 e^{i(k_1 n_1 + k_1 n_1 + k_1 n_1)} + A_2 e^{i(k_1 n_1 + k_1 n_1 + k_1 n_1)} \\ & + A_3 e^{i(k_1 n_1 + k_1 n_1 + k_1 n_1)} + B_1 e^{i(k_1 n_1 + k_1 n_1 + k_1 n_1)} \\ & + B_2 e^{i(k_1 n_1 + k_1 n_1 + k_1 n_1)} + B_3 e^{i(k_1 n_1 + k_1 n_1 + k_1 n_1)}. \end{aligned} \quad (4.81)$$

Se determinó la razón entre los coeficientes por la condición de frontera cuando dos o tres espines sean vecinos. Los factores de fase son,

$$A_p = C e^{i\Phi/2}, \quad (4.82)$$

$$B_p = C e^{-i\Phi/2}, \quad (4.83)$$

para $p = 1, 2, 3$. Bethe (2011) probó que los factores de fase ϕ_p deben tener la forma de los factores

de fase de una interacción de 2 espines, de los vistos en la subsección anterior. Específicamente,

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= \phi_{12} + \phi_{13} + \phi_{23} \\ \Phi_2 &= \phi_{23} + \phi_{21} + \phi_{31} \\ \Phi_3 &= \phi_{31} + \phi_{32} + \phi_{12},\end{aligned}\tag{4.84}$$

donde cada ϕ_{ij} satisfacen las ecuaciones,

$$2 \cot \frac{\phi_{ij}}{2} = \cot \frac{k_i}{2} - \cot \frac{k_j}{2}.\tag{4.85}$$

Como $\phi_{ij} = -\phi_{ji}$, las fases de las amplitudes B_p serán el negativo de las fases de las amplitudes A_p . Las condiciones de frontera serán,

$$\begin{aligned}Nk_1 &= 2\pi I_1 + \phi_{12} + \phi_{13} \\ Nk_2 &= 2\pi I_2 + \phi_{21} + \phi_{23} \\ Nk_3 &= 2\pi I_3 + \phi_{31} + \phi_{32},\end{aligned}\tag{4.86}$$

donde I_i son enteros. Si $|I_i - I_j| \geq 2$ para todo i, j , entonces las soluciones tienen tres valores reales de k_i . Según Parkinson, *et al* (2010), estos estados son llamadas ondas libres de espín. Si $|I_i - I_j| = 0$ o $|I_i - I_j| = 1$ se tiene mezcla entre estados libres y asociados. Un estado puede tener un espín libre y un par de espines asociados y por lo tanto tendrá un valor k real y dos valores k imaginarios. O bien tres espines libres, con tres valores de k reales.

4.2. Aplicación del Ansatz de Bethe para el modelo de Heisenberg XXZ

El modelo de Heisenberg XXZ utiliza en hamiltoniano de la ecuación (3.91),

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [J(\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y) + J_z \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z].$$

Considérese el retículo sobre el cual está definida la cadena de espines. Si se tienen N elementos en el retículo y N es par, se puede dividir el conjunto de elementos del retículo en dos subconjuntos,

sean estos A y B . Considerando la relación entre las matrices de Pauli siguiente

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}^z \mathbf{S}^x \mathbf{S}^z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\
&= -\mathbf{S}^x,
\end{aligned} \tag{4.87}$$

y similarmente $\mathbf{S}^z \mathbf{S}^y \mathbf{S}^z = -\mathbf{S}^y$, la transformación unitaria

$$P = \prod_{N \in A} \mathbf{S}_n^z, \tag{4.88}$$

deja al hamiltoniano \mathcal{H} de la ecuación (3.91) invariante, excepto por la constante J , así,

$$\begin{aligned}
P\mathcal{H}P^\dagger &= \left(\prod_{N \in A} \mathbf{S}_n^z \right) \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [J(\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y) + J_z \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z] \left(\prod_{N \in A} \mathbf{S}_n^z \right) \right\} \\
&= \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \left[J \left(\prod_{N \in A} \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x \prod_{N \in A} \mathbf{S}_n^z \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \prod_{N \in A} \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y \prod_{N \in A} \mathbf{S}_n^z \right) + \right. \\
&\quad \left. + J_z \prod_{N \in A} \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z \prod_{N \in A} \mathbf{S}_n^z \right\} \\
&= \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [J(-\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x - \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y) + J_z \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z] \right\} \\
&= \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [-J(\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y) + J_z \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z] \right\},
\end{aligned} \tag{4.89}$$

expandiendo las sumas y aplicando los operadores de las productorias se tiene,

$$P\mathcal{H}(J, J_z)P^\dagger = \mathcal{H}(-J, J_z). \tag{4.90}$$

Por lo tanto, sin pérdida de generalidad podemos tomar $J = 1$ y considerar el hamiltoniano siguiente,

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y + \Delta \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z], \tag{4.91}$$

donde $\Delta = J/J_z$ se denomina anisotropía y puede tomar valor real arbitrario.

El parámetro J establece la escala de la energía de intercambio de las componentes del espín en el plano x - y e implica que el intercambio es igual entre estos ejes. Para $J > 0$ el orden ferromagnético

es el preferido mientras si $J < 0$ el orden antiferromagnético se prefiere. En el eje de la cuantización, eje z , el parámetro Δ cuantifica la fuerza de la anisotropía uniaxial a lo largo de la dirección z , que compete con el término en el plano $x-y$.

Si $\Delta = 1$, se tiene el modelo isotrópico de Heisenberg XXX para una cadena de espines ferromagnética, como se mencionó en la sección 3.3. El resto de los valores de Δ corresponden al modelo anisotrópico de Heisenberg XXZ para una cadena de espines.

El modelo muestra varias simetrías que pueden ser usadas para evaluar su estado base y sus estados excitados. Para empezar, considerando un número par de sitios en el retículo, se puede transformar \mathcal{H} utilizando el operador unitario,

$$Q = \exp \left[i\pi \sum_{n=1}^N n \mathbf{S}_n^z \right] = \exp [i\pi (\mathbf{S}_1^z + 2\mathbf{S}_2^z + \dots + N\mathbf{S}_N^z)] , \quad (4.92)$$

así

$$Q\mathcal{H}(\Delta)Q^\dagger = -\mathcal{H}(-\Delta). \quad (4.93)$$

Operando sobre el hamiltoniano de la ecuación (4.91) se tiene,

$$Q\mathcal{H}Q^\dagger = \exp \left[i\pi \sum_{n=1}^N n \mathbf{S}_n^z \right] \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{n'=1}^N [\mathbf{S}_{n'}^x \mathbf{S}_{n'+1}^x + \mathbf{S}_{n'}^y \mathbf{S}_{n'+1}^y + \Delta \mathbf{S}_{n'}^z \mathbf{S}_{n'+1}^z] \exp \left[-i\pi \sum_{m=1}^N m \mathbf{S}_m^z \right] \right\}, \quad (4.94)$$

Lo que resulta en,

$$Q\mathcal{H}(\Delta)Q^\dagger = -H(-\Delta). \quad (4.95)$$

Por lo tanto se puede afirmar que los espectros de energía de $\mathcal{H}(\Delta)$ y $-\mathcal{H}(-\Delta)$ están relacionados por una reflexión cerca de $E = 0$. Esto también significa que los eigenestados del hamiltoniano son independientes del signo de J , aunque su orden energético es exactamente revertido al cambiar de signo.

Adicionalmente, la magnetización a lo largo del eje z , que también es el espín total

$$\mathbf{S}_T^z = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \mathbf{S}_n^z, \quad (4.96)$$

se conserva. En una configuración con todos los espines hacia arriba, toma su valor máximo $\mathbf{S}_{T_{MAX}}^z = N/2$. por lo tanto nótese el caso $0 \leq \mathbf{S}^z < N/2$, dado que una rotación a lo largo del eje x deja el hamiltoniano sin cambios. Además, como

$$[\mathcal{H}, \mathbf{S}_T^z] = 0,$$

se puede tratar separadamente sectores del espacio de Hilbert con magnetización fija. Entonces se

puede buscar una solución de la ecuación de Schrödinger,

$$\mathcal{H}(\Delta) |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (4.97)$$

como una superposición de todos los vectores en el espacio de Hilbert con un número fijo M de espines con dirección hacia abajo,

$$|\psi\rangle = \sum_{\{n\}} a(n_1, n_2, \dots, n_M) |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle, \quad (4.98)$$

donde la suma va sobre todas las posibles combinaciones del retículo de M sitios ordenados, según la ecuación (3.78).

Utilizando los operadores de cambio de espín vistos en la sección (3.2.8) se reescribe el hamiltoniano de la ecuación (4.91)

$$\mathcal{H}(\Delta) = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [2(\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) + \Delta \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z], \quad (4.99)$$

operándolo así:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\Delta) &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [2(\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) + \Delta \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z] \\ &= -\sum_{n=1}^N (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) - \frac{\Delta}{2} \sum_{n=1}^N (\mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z + 1 - 1) \\ &= -\sum_{n=1}^N (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) - \frac{\Delta}{2} \sum_{n=1}^N (\mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z - 1) - \frac{\Delta N}{2} \\ &= -\frac{\Delta N}{2} + \sum_{n=1}^N \mathcal{H}_{n,n+1}, \end{aligned} \quad (4.100)$$

donde

$$-\mathcal{H}_{n,n+1} = \mathbf{S}_i^+ \mathbf{S}_j^- + \mathbf{S}_i^- \mathbf{S}_j^+ + \frac{1}{2} \Delta (\mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z - 1). \quad (4.101)$$

La última ecuación nos será útil para saber cómo va a actuar sobre un estado $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$. Con respecto a los operadores, nótese que

$$(\mathbf{S}_i^+ \mathbf{S}_j^- + \mathbf{S}_i^- \mathbf{S}_j^+) \begin{pmatrix} |\pm_n\rangle \otimes |\pm_{n+1}\rangle \\ |\pm_n\rangle \otimes |\mp_{n+1}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ |\mp_n\rangle \otimes |\pm_{n+1}\rangle \end{pmatrix}, \quad (4.102)$$

$$\mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z \begin{pmatrix} |\pm_n\rangle \otimes |\pm_{n+1}\rangle \\ |\pm_n\rangle \otimes |\mp_{n+1}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\pm_n\rangle \otimes |\pm_{n+1}\rangle \\ -|\pm_n\rangle \otimes |\mp_{n+1}\rangle \end{pmatrix}. \quad (4.103)$$

En consecuencia se llega a

$$\mathcal{H}_{n,n+1} \begin{pmatrix} |\pm_n\rangle \otimes |\pm_{n+1}\rangle \\ |\pm_n\rangle \otimes |\mp_{n+1}\rangle \end{pmatrix} = \Delta \begin{pmatrix} 0 \\ |\pm_n\rangle \otimes |\mp_{n+1}\rangle \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ |\mp_n\rangle \otimes |\pm_{n+1}\rangle \end{pmatrix}. \quad (4.104)$$

Aplicando la ecuación (4.100) al estado $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$, se tiene

$$\left[\mathcal{H}(\Delta) + \frac{\Delta N}{2} \right] |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle = N_a \Delta |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle - \sum_{\{n'\}} |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle, \quad (4.105)$$

donde la configuración $\{n'\}$ de la cadena se obtiene de la configuración anterior $\{n\}$ intercambiando un par de espines antiparalelos que son vecinos inmediatos en el retículo, con

$$n'_1 = n_1, n'_2 = n_2, \dots, n'_\alpha = n_\alpha \pm 1, \dots, n'_M = n_M, \quad (4.106)$$

y que la configuración $\{n'\}$ cumple con la condición de ordenamiento de la ecuación (3.78) y con

$$N_a = \sum_{\{n'\}} 1, \quad (4.107)$$

con N_a el número de espines que son vecinos inmediatos en el retículo y que son antiparalelos en la configuración $\{n\}$. Para que se cumpla que las funciones de la ecuación (4.98) sean eigenestados de la ecuación de Schrödinger del hamiltoniano $\mathcal{H}(\Delta)$ se debe cumplir,

$$\left(E + \frac{N\Delta}{2} \right) a\{n\} = \sum_{\{n'\}} (\Delta a\{n\} - a\{n'\}), \quad (4.108)$$

$$\bar{E}a\{n\} = \sum_{\{n'\}} (\Delta a\{n\} - a\{n'\}). \quad (4.109)$$

La expresión $\bar{E} = (E + \frac{N\Delta}{2})$ se llamará la energía corrida. Para aplicar el intercambio de configuración $\{n\}$ a $\{n'\}$ en todo el intervalo de los sitios del retículo n_α , se debe extender el intervalo más allá del N sitio para incluir la condición de frontera periódica. Para los coeficientes de la ecuación, las condiciones periódicas se ven reflejadas de la siguiente forma,

$$a(n_1, n_2, \dots, n_M) = a(n_2, n_3, \dots, n_M, n_1 + N) \quad (4.110)$$

siempre respetando el orden de la ecuación (3.78). Ahora se deben resolver las ecuaciones (4.108), para cada sección del espacio de Fock, es decir para cada $M = 0, 1, \dots, N$ espines orientados hacia abajo.

4.2.1. Cálculo de la energía del estado base $M = 0$ y la aplicación Ansatz de Bethe primer estado excitado $M = 1$

Se recordará la definición del estado base de la ecuación (4.7). Calculándolo para la ecuación de Schrödinger (4.8) correspondiente a la cadena de espines de Heisenberg XXZ, se tiene

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \mathcal{H}(\Delta) | 0 \rangle &= \langle 0 | -\frac{\Delta N}{2} + \sum_{n=1}^N H_{n,n+1} | 0 \rangle \\
\langle \mathcal{H} \rangle &= -\frac{\Delta N}{2} \langle 0 | 0 \rangle - \sum_{n=1}^N \langle 0 | [(\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) + \frac{1}{2} \Delta (\mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z - 1)] | 0 \rangle \\
&= -\sum_{n=1}^N \langle 0 | [(\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) | 0 \rangle + \frac{\Delta}{2} (\mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z - 1) | 0 \rangle] + \\
&\quad -\frac{\Delta N}{2} \\
&= -\sum_{n=1}^N \langle 0 | (\mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- + \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+) | 0 \rangle \\
&\quad -\frac{\Delta}{2} \sum_{n=1}^N \langle 0 | (\mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z - 1) | 0 \rangle - \frac{\Delta N}{2} \\
&= -\sum_{n=1}^N \langle 0 | \mathbf{S}_n^+ \mathbf{S}_{n+1}^- | 0 \rangle - \sum_{n=1}^N \langle 0 | \mathbf{S}_n^- \mathbf{S}_{n+1}^+ | 0 \rangle \\
&\quad -\frac{\Delta}{2} \sum_{n=1}^N \langle 0 | \mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z | 0 \rangle + \frac{\Delta}{2} \sum_{n=1}^N \langle 0 | 0 \rangle - \frac{\Delta N}{2} \\
&= -\sum_{n=1}^N \langle 0 | 0 | 0 \rangle - \sum_{n=1}^N \langle 0 | 0 | 0 \rangle \\
&\quad -\frac{\Delta}{2} \sum_{n=1}^N \langle 0 | 1 | 0 \rangle + \frac{\Delta N}{2} - \frac{\Delta N}{2} \\
&= -\frac{\Delta N}{2},
\end{aligned} \tag{4.111}$$

Es decir que la energía del estado base corresponde a

$$E_0 = -N \frac{\Delta}{2}. \tag{4.112}$$

Para el primer estado excitado, con $M = 1$ espines hacia abajo, la ecuación 4.109 debe ser,

$$\bar{E}a(n) = 2\Delta a(n) - a(n-1) - a(n+1). \tag{4.113}$$

La solución para esta ecuación es la onda plana,

$$a(n) = A e^{ikn}, \tag{4.114}$$

donde k se cuantiza según la condición de la ecuación (4.110) así,

$$e^{ikn} = 1, \quad (4.115)$$

y equivale a tener,

$$kN = 2\pi I, \quad (4.116)$$

con $I = 0, 1, \dots, N-1$. Este intervalo puede ser corrido por un número entero arbitrario. La energía se obtiene de sustituir la solución de la ecuación (4.114), que es el Ansatz, en la ecuación (4.113) así:

$$\begin{aligned} \left(E + \frac{N\Delta}{2}\right) Ae^{ikn} &= 2\Delta Ae^{ikn} - Ae^{ik(n-1)} - Ae^{ik(n+1)} \\ E + \frac{N\Delta}{2} &= 2\Delta - e^{-ik} - e^{ik} \\ E &= -\frac{N\Delta}{2} + 2(\Delta - \cos(k)). \end{aligned} \quad (4.117)$$

Nótese que este procedimiento involucra menos álgebra al no requerir de diagonalizar el hamiltoniano *a fuerza bruta*. También notemos la similitud entre el eigenvalor para $M = 1$ (4.50) del hamiltoniano XXX con el eigenvalor (4.117) para $M = 1$ del hamiltoniano XXZ.

4.2.2. Segundo estado excitado $M = 2$

Así como se consideraron en la sub sección (4.1) para el modelos de Heisenberg XXX, se tendrán dos casos separados, uno trata con los espines distintos y el otro con los espines adyacentes. Para el caso de los espines separados

$$\begin{aligned} \bar{E}a(n_1, n_2) &= 4\Delta a(n_1, n_2) - a(n_1 - 1, n_2) - a(n_1 + 1, n_2) + \\ &= -a(n_1, n_2 - 1) - a(n_1, n_2 + 1) \end{aligned}, \quad (4.118)$$

donde $n_2 \neq n_1 + 1$; La solución general de la ecuación (4.118) es,

$$a(n_1, n_2) = A_{12}e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + A_{21}e^{i(k_2 n_1 + k_1 n_2)}, \quad (4.119)$$

sustituyendo tenemos la forma general de la energía para este estado,

$$E = -N\frac{\Delta}{2} + 2(\Delta - \cos k_1) + 2(\Delta - \cos k_2). \quad (4.120)$$

Para espines adyacentes $n_2 = n_1 + 1$, la ecuación (4.109) toma la forma

$$\begin{aligned} \bar{E}a(n, n+1) &= 2\Delta a(n, n+1) - a(n-1, n+1) + \\ &- a(n, n+2). \end{aligned} \quad (4.121)$$

Se busca una solución a esta ecuación de la misma manera que en el caso $M=1$, donde los coeficientes A_{12} y A_{21} estarán condicionados porque la ecuación (4.121) puede ser representada

como en el caso de la ecuación (4.118) si existe una restricción con $a(n_1, n_2)$. Con este propósito extendemos la definición de $a(n_1, n_2)$ a sitios idénticos $n_1 = n_2$ sustituyendo $n_1 = n$ y $n_2 = n + 1$ en la ecuación (4.118),

$$\begin{aligned} \bar{E}a(n, n+1) &= 4\Delta a(n, n+1) - a(n-1, n+1) - a(n+1, n+1) + \\ &\quad - a(n, n) - a(n, n+2). \end{aligned} \quad (4.122)$$

Las ecuaciones (4.121) y (4.122) son equivalentes si se mantiene que

$$a(n+1, n+1) - 2\Delta a(n, n+1) + a(n, n) = 0. \quad (4.123)$$

Insertando la solución general (4.119) en la ecuación (4.123) se obtiene la relación de los coeficientes A_{12} y A_{21}

$$\frac{A_{12}}{A_{21}} = -\frac{e^{i(k_1+k_2)} - 2\Delta e^{ik_1} + 1}{e^{i(k_1+k_2)} - 2\Delta e^{ik_2} + 1} \equiv e^{i\theta_{12}}. \quad (4.124)$$

El factor de fase es

$$\cot\left(\frac{\theta_{12}}{2}\right) = \Delta \frac{\cot(k_1/2) - \cot(k_2/2)}{(\Delta + 1) + (\Delta - 1)\cot(k_1/2)\cot(k_2/2)}. \quad (4.125)$$

Este factor es antisimétrico con el cambio de índices

$$\theta_{12} = -\theta_{21}. \quad (4.126)$$

Nótese que los números de onda deben ser diferentes, $k_1 \neq k_2$, porque de lo contrario la amplitud $a(n_1, n_2) = (A_{12} + A_{21})e^{ik(n_1+n_2)}$ desaparece. Los números de onda k_1 y k_2 están cuantizados según la condición de frontera periódica de la ecuación (4.124), $a(n_1, n_2) = a(n_2, n_1 + N)$, así:

$$A_{12} = A_{21}e^{ik_1N}, A_{21} = A_{12}e^{ik_2N}. \quad (4.127)$$

Con respecto a la relación entre los coeficientes expresados en la ecuación (4.124), se pueden escribir de manera simple así:

$$Nk_1 = 2\pi I_1 + \theta_{12}, Nk_2 = 2\pi I_2 + \theta_{21}, \quad (4.128)$$

donde I_1 e I_2 son secuencias de N enteros consecutivos tales que $k_1 \neq k_2$. I_1 e I_2 son los números cuánticos de Bethe para este particular modelo de Heisenberg.

4.2.3. Tercer estado excitado $M = 3$

El tratamiento del sector del espectro correspondiente a $M = 3$ nos permite generalizar el formalismo de Bethe para M arbitrario. Para ello se requiere considerar todas las posibilidades que tienen los espines de ser adyacentes considerando los 3 sitios, ordenados como $n_1 < n_2 < n_3$:

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

4.2.4. Caso sin adyacencia (a)

Cuando no existen espines adyacentes, la ecuación de Schrödinger mostrada en la ecuación(4.109) toma la forma siguiente:

$$\begin{aligned} \bar{E}a(n_1, n_2, n_3) = & 6\Delta a(n_1, n_2, n_3) - a(n_1 - 1, n_2, n_3) - a(n_1 + 1, n_2, n_3) + \\ & -a(n_1, n_2 - 1, n_3) - a(n_1, n_2 + 1, n_3) + \\ & -a(n_1, n_2, n_3 - 1) - a(n_1, n_2, n_3 + 1). \end{aligned} \quad (4.129)$$

La solución a esta ecuación está representada por una superposición de ondas dada por,

$$\begin{aligned} a(n_1, n_2, n_3) = & A_{123}e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3)} + A_{132}e^{i(k_1 n_1 + k_3 n_2 + k_2 n_3)} + \\ & + A_{213}e^{i(k_2 n_1 + k_1 n_2 + k_3 n_3)} + A_{231}e^{i(k_2 n_1 + k_3 n_2 + k_1 n_3)} + \\ & + A_{312}e^{i(k_3 n_1 + k_1 n_2 + k_2 n_3)} + A_{321}e^{i(k_3 n_1 + k_2 n_2 + k_1 n_3)}. \end{aligned} \quad (4.130)$$

La energía correspondiente está dada por,

$$E = -N\frac{\Delta}{2} + 2(\Delta - \cos k_1) + 2(\Delta - \cos k_2) + 2(\Delta - \cos k_3). \quad (4.131)$$

4.2.5. Casos con adyacencia (b) (c) y (d)

En estos casos se utilizará lo hallado en la sub sección anterior cuando se tenía $M = 2$. El caso (b) implica que,

$$\frac{A_{123}}{A_{213}} = e^{i\theta_{12}}, \quad \frac{A_{132}}{A_{312}} = e^{i\theta_{13}}, \quad \frac{A_{231}}{A_{321}} = e^{i\theta_{23}}, \quad (4.132)$$

donde $\theta_{\alpha\beta}$ donde $\alpha, \beta = 1, 2, 3$ es la generalización de la función dada por las ecuaciones (4.124) y (4.125). Siguiendo el patrón, para el caso (c) se tiene

$$\frac{A_{123}}{A_{132}} = e^{i\theta_{23}}, \frac{A_{231}}{A_{321}} = e^{i\theta_{13}}, \frac{A_{312}}{A_{321}} = e^{i\theta_{12}}. \quad (4.133)$$

El caso (d) no implica nuevas relaciones entre los coeficientes $A_{\alpha\beta\gamma}$ donde $\alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3$. Utilizando la relación de simetría dada por la ecuación (4.126) para la fases $\theta_{\alpha\beta}$, la solución de las 6 relaciones homogéneas de las ecuaciones (4.132) y (4.133) para los 6 coeficientes $A_{\alpha\beta\gamma}$ puede ser expresada de la forma

$$\begin{aligned} A_{123} &= \exp\left[\frac{i}{2}(\theta_{12} + \theta_{13} + \theta_{23})\right] \\ A_{213} &= \exp\left[\frac{i}{2}(\theta_{21} + \theta_{23} + \theta_{13})\right] \\ A_{321} &= \exp\left[\frac{i}{2}(\theta_{32} + \theta_{31} + \theta_{21})\right]. \end{aligned} \quad (4.134)$$

La condición de frontera periódica de la ecuación (4.110) implica que

$$A_{123} = A_{231}e^{ik_1N}, A_{213} = A_{132}e^{i2N}, A_{312} = A_{123}e^{ik_3N}. \quad (4.135)$$

Recuérdese que los números de onda k_1, k_2 y k_3 deben ser necesariamente distintos, están cuantizados así

$$\begin{aligned} Nk_1 &= 2\pi I_1 + \theta_{12} + \theta_{13} \\ Nk_2 &= 2\pi I_2 + \theta_{21} + \theta_{23} \\ Nk_3 &= 2\pi I_3 + \theta_{31} + \theta_{32}, \end{aligned} \quad (4.136)$$

donde cada I_1, I_2 e I_3 son una secuencia de N números enteros consecutivos.

4.2.6. Para M arbitrario

Nótese que para el caso $M = 3$ se construyó la solución utilizando explícitamente resultados obtenidos en el procedimiento para hallar la solución para $M = 2$, empleando la función de fase $\theta_{\alpha\beta}$ definida en la ecuación (4.124). Esta propiedad se mantiene para los subsiguientes sectores del espectro de energía con $M = 4, 5, \dots, N$.

Se introdujo el grupo de simetría S_M de todas las permutaciones $M!$ de los números $(1, 2, 3, \dots, M)$. Denotaremos con P el elemento del grupo S_M , donde $P\alpha$ con $\alpha = 1, 2, 3, \dots, M$, denotará la posición α en P . Por ejemplo, para $M = 3$ y la permutación $P = (3, 2, 1)$ se tiene $P1 = 3, P2 = 2$ y $P3 = 1$.

El Ansatz de Bethe tiene la forma

$$a(n_1, n_2, \dots, n_M) = \sum_{P \in S_M} A_P \times \exp\left[i \sum_{\alpha=1}^M k P_\alpha n_\alpha\right]. \quad (4.137)$$

Esta solución nos resuelve la ecuación de Schrödinger cuando no hay espines adyacentes con dirección hacia abajo, es decir cuando $n_{\alpha+1} \neq n_\alpha + 1$ para cada $\alpha = 1, 2, 3, \dots, M$. La energía correspondiente está dada por

$$E = -N \frac{\Delta}{2} + \sum_{\alpha=1}^M 2(\Delta - \cos k_{\alpha}). \quad (4.138)$$

Cuando hay adyacencia, $n_{\alpha+1} = n_{\alpha} + 1$ para algún α , la ecuación análoga a la ecuación (4.123) que denota la condición de igualdad entre los casos de adyacencia y no adyacencia para el caso $M = 2$, es

$$a(\dots, n_{\alpha} + 1, n_{\alpha} + 1, \dots) - 2\Delta a(\dots, n_{\alpha}, n_{\alpha} + 1, \dots) + a(\dots, n_{\alpha}, n_{\alpha}, \dots) = 0. \quad (4.139)$$

Insertando el Ansatz de Bethe dado en la ecuación (4.137) en la ecuación de igualdad dada en (4.139), nos resulta que

$$\begin{aligned} & \sum_{P \in S_M} A_P [\exp [i(k_{P\alpha} + k_{P(\alpha+1)})] - 2\Delta \exp [ik_{P(\alpha+1)}] + 1] \times \\ & \times \exp [i(k_{P1}n_1 + \dots + i(k_{P(\alpha+1)})n_{\alpha} + \dots + ik_{PM}n_M)] = 0. \end{aligned} \quad (4.140)$$

En la sumatoria, cada permutación P está acoplada con la permutación $P(\alpha, \alpha + 1)$ la cual se genera de P al transponerse los vecinos adyacentes $P\alpha$ y $P(\alpha + 1)$ si

$$P = (P1, \dots, P\alpha, P(\alpha + 1), \dots, PM), \quad (4.141)$$

entonces

$$P(\alpha, \alpha + 1) = (P1, \dots, P(\alpha + 1), P\alpha, \dots, PM). \quad (4.142)$$

Dado que se están multiplicando los coeficientes A por el mismo exponencial en la ecuación de consistencia generalizada (4.140), se mantiene

$$\begin{aligned} & A_P [\exp [i(k_{P\alpha} + k_{P(\alpha+1)})] - 2\Delta \exp [ik_{P(\alpha+1)}] + 1] + \\ & + A_{P(\alpha, \alpha+1)} [\exp [i(k_{P\alpha} + k_{P(\alpha+1)})] - 2\Delta \exp [ik_{P(\alpha+1)}] + 1] = 0. \end{aligned} \quad (4.143)$$

Con respecto a la definición de fase de la ecuación (3.2.4), se tiene,

$$A_{P(\alpha, \alpha+1)} = A_P \exp(-i\theta_{P\alpha, P(\alpha+1)}), \quad (4.144)$$

lo cual implica que

$$A_P = \exp \left(\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^M \theta_{P\alpha, P\beta} \right), \alpha < \beta. \quad (4.145)$$

La condición de frontera periódica de la ecuación (4.110) es equivalente a las condiciones

$$A_P = A_{PC} \exp(ik_{P1}N), \quad (4.146)$$

para P arbitraria, donde PC es la transposición cíclica de P . cuando $P = (P1, P2, \dots, PM)$ entonces $PC = (P2, P3, \dots, PM, P1)$. Con respecto a las amplitudes A , tenemos,

$$\exp [ik_{P1}N] = \frac{A_P}{A_{PC}} = \exp \left(i \sum_{\alpha=2}^M \theta_{P\alpha, P\beta} \theta_{P1, P\alpha} \right) \quad (4.147)$$

para P arbitraria. En conclusión, los números de onda k_1, k_2, \dots, k_M se cuantizan acorde al conjunto de ecuaciones de Bethe

$$Nk_\alpha = 2\pi I_\alpha + \sum_{\beta=2}^M \theta_{P\alpha, P\beta} \theta_{\alpha\beta}, \alpha = 1, 2, \dots, M \quad (4.148)$$

donde cada I_α pertenece a una secuencia de N números enteros consecutivos tales que los números de onda arbitrarios k_α, k_β no sean idénticos.

El caso con $\Delta = 0$ es especialmente simple, dado que el factor de fase de la ecuación (4.125) está dado por $\exp(i\theta_{\alpha\beta}) = -1$. Las condiciones de frontera generalizadas de la ecuación (4.147) traen como consecuencia que

$$e^{ik_\alpha N} = (-1)^{M-1}, E = -2 \sum_{\alpha=1}^M \theta_{P\alpha, P\beta} \cos k_\alpha \quad (4.149)$$

Lo cual implica que se anula la energía para la región $-1 < \Delta < 1$. Lo mismo ocurre con la magnetización.

4.3. La parametrización de Orbach

Nos es útil parametrizar los números de onda k en rapidezces $\lambda, k = k(\lambda)$, de tal manera que la función θ dependa únicamente de la diferencia de las rapidezces correspondientes, $\theta_{\alpha\beta} = \theta(\lambda_\alpha - \lambda_\beta)$. La forma de la parametrización dependerá del valor de la anisotropía Δ , que puede ser $\Delta > 1, \Delta = 1, -1 < \Delta < 1, \Delta = -1, \Delta < -1$.

Enfocaremos el procedimiento en los casos en los que las cadenas de espines son ferromagnéticas, correspondientes a tener $\Delta = 1$, y antiferromagnéticas, correspondientes a tener $\Delta = -1$.

4.3.1. Caso ferromagnético $\Delta = 1$

Tomamos $\Delta = 1$ en la ecuación del factor de fase (4.125) para obtener:

$$\arctan \left(\frac{\theta_{\alpha\beta}}{2} \right) = \frac{1}{2} \left[\arctan \left(\frac{k_\alpha}{2} \right) - \arctan \left(\frac{k_\beta}{2} \right) \right]. \quad (4.150)$$

La parametrización requerida es:

$$\lambda_\alpha = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{k_\alpha}{2} \right), \arctan \left(\frac{\theta_{\alpha\beta}}{2} \right) = \lambda_\alpha - \lambda_\beta. \quad (4.151)$$

La relación inversa es:

$$k_\alpha = \frac{1}{i} \ln \left(\frac{2\lambda_\alpha + i}{2\lambda_\alpha - i} \right), \theta_{\alpha\beta} = \frac{1}{i} \ln \left(\frac{\lambda_\alpha - \lambda_\beta + i}{\lambda_\alpha - \lambda_\beta - i} \right), \quad (4.152)$$

y sus partes reales son:

$$0 < k_\alpha < 2\pi, -\infty < \theta_{\alpha\beta} < \infty. \quad (4.153)$$

Insertando las relaciones inversas de parametrización de la ecuación (4.152) en las ecuaciones de Bethe generalizadas (4.147), se obtiene

$$\left(\frac{\lambda_\alpha + i/2}{\lambda_\alpha - i/2} \right)^N = \prod_{\substack{\alpha, \beta=1 \\ \alpha \neq \beta}}^M \theta_{P\alpha, P\beta} \frac{\lambda_\alpha - \lambda_\beta + i}{\lambda_\alpha - \lambda_\beta - i}, \alpha = 1, 2, \dots, M. \quad (4.154)$$

Esto nos permite expresar la energía en términos de las rapidezces definidas en la parametrización, así:

$$E = -\frac{N}{2} + \sum_{\alpha=1}^M \theta_{P\alpha, P\beta} \frac{1}{\lambda_\alpha^2 + 1/4}. \quad (4.155)$$

4.3.2. Caso antiferromagnético $\Delta = -1$

Tomamos $\Delta = -1$ en la ecuación del factor de fase (4.125) para obtener,

$$\arctan \left(\frac{\theta_{\alpha\beta}}{2} \right) = \frac{1}{2} \left[\tan \left(\frac{k_\beta}{2} \right) - \tan \left(\frac{k_\alpha}{2} \right) \right]. \quad (4.156)$$

La parametrización requerida es:

$$\lambda_\alpha = \frac{1}{2} \tan \left(\frac{k_\alpha}{2} \right), \arctan \left(\frac{\theta_{\alpha\beta}}{2} \right) = \lambda_\beta - \lambda_\alpha. \quad (4.157)$$

La relación inversa es,

$$k_\alpha = \frac{1}{i} \ln \left(\frac{i - 2\lambda_\alpha}{i + 2\lambda_\alpha} \right), \theta_{\alpha\beta} = \frac{1}{i} \ln \left(\frac{\lambda_\beta - \lambda_\alpha + i}{\lambda_\beta - \lambda_\alpha - i} \right), \quad (4.158)$$

y sus partes reales son:

$$-\pi < k_\alpha < \pi, -\infty < \lambda_\alpha < \infty. \quad (4.159)$$

Insertando las relaciones inversas de parametrización de la ecuación (4.158) en las ecuaciones de Bethe generalizadas (4.147), obtenemos

$$\left(\frac{i/2 - \lambda_\alpha}{i/2 + \lambda_\alpha} \right)^N = \prod_{\substack{\alpha, \beta=1 \\ \alpha \neq \beta}}^M \frac{\lambda_\alpha - \lambda_\beta - i}{\lambda_\alpha - \lambda_\beta + i}, \alpha = 1, 2, \dots, M. \quad (4.160)$$

Esto nos permite expresar la energía en términos de las rapidezces definidas en la parametrización, así:

$$E = \frac{N}{2} - \sum_{\alpha=1}^M \frac{1}{\lambda_{\alpha}^2 + 1/4}. \quad (4.161)$$

Nótese que cuando N es un número par, las ecuaciones de Bethe para el caso ferromagnético (4.154) y para el caso antiferromagnético (4.160) coinciden, mientras que sus energías respectivas, dadas por las ecuaciones difieren por el signo, lo cual cumple con la hermiticidad de los hamiltonianos H_{Δ} y $-H_{-\Delta}$ de la ecuación (4.95).

4.4. Descripción del espectro de energía para la cadena de espines de Heisenberg XXZ

4.4.1. Estado base y su energía

Siempre que $\Delta \geq 1$, el estado base será ferromagnético, con la energía descrita en la ecuación (4.112), es decir

$$E_0 = -N \frac{\Delta}{2}, \Delta \geq 1. \quad (4.162)$$

En la región $\Delta < 1$ tenemos que el espín total de la cadena es 0, ya que pertenece al sector donde $M = N/2$, siempre considerando a N como número par. Para analizar las ecuaciones de Bethe (4.148) en esta región, debemos especificar los valores de los enteros I_{α} que corresponden a los estados base. En esta región el valor máximo que pueden tomar estos números es,

$$I_{max} = \frac{M-1}{2}. \quad (4.163)$$

Como mostraron C.N. Yang y C.P. Yang Yang, et al (1966,?), en el sector de M los enteros del estado base $\{I_{\alpha}\}_{\alpha=1}^M$ son distintos y están simétricamente distribuidos alrededor de cero, así:

$$-I_{max}, -I_{max} + 1, \dots, 0, \dots, I_{max} - 1, I_{max}. \quad (4.164)$$

Dado que no pueden ser iguales a M y deben ser necesariamente menores a M se debe cumplir:

$$I_1, I_2, \dots, I_M = -\frac{M-1}{2}, -\frac{M-1}{2} + 1, \dots, \frac{M-1}{2}. \quad (4.165)$$

Para el caso $\Delta = 0$ de la ecuación (4.149) $Nk_{\alpha} = 2\pi I_{\alpha}$, utilizando los enteros $\{I_{\alpha}\}$ dados por la ecuación (4.165) nos da como resultado estados de energía mínima asegurándonos que se cumpla la condición que los números de onda k_{α} y k_{β} sean distintos.

Las ecuaciones de Bethe (4.148) con los números cuánticos de Bethe $\{I_{\alpha}\}$ de la ecuación (4.165)

correspondientes al sector de cero espín $M = N/2$ son:

$$k_\alpha = 2\pi \frac{I_\alpha}{N} - \frac{1}{N} \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^{N/2} \theta_{\alpha\beta}, \alpha = 1, 2, \dots, N/2, \quad (4.166)$$

y llevan, en el límite $N \rightarrow \infty$, a números de onda k_α reales. Sea $I_\alpha/N = x$, donde $-1/4 < x < 1/4$, se obtiene de la ecuación (4.166):

$$k[\lambda(x)] = 2\pi x + \int_{-1/4}^{1/4} dy \theta[\lambda(x) - \lambda(y)]. \quad (4.167)$$

En esta ecuación, los números de onda k y la función θ están parametrizados por las rapidezces continuas $\lambda(x)$. Ahora se introduce la densidad de rapidezces alrededor de un valor dado por la relación $dx = \rho(\lambda) d\lambda$. Diferenciando la ecuación (4.167) con respecto a λ se obtiene

$$\frac{dk(\lambda)}{d\lambda} = 2\pi\rho(\lambda) - \int d\lambda' \rho(\lambda') \frac{\partial}{\partial \lambda} \theta(\lambda - \lambda'). \quad (4.168)$$

Donde los límites de integración dependen del valor de la anisotropía Δ .

Para el caso antiferromagnético $\Delta = -1$, la parametrización de la ecuación (4.157) nos da como resultado al derivarse con respecto a λ

$$\frac{dk(\lambda)}{d\lambda} = \frac{4}{1 + 4\lambda^2}, \quad (4.169)$$

y con respecto a θ

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \theta(\lambda - \lambda') = \frac{2}{1 + (\lambda - \lambda')^2}. \quad (4.170)$$

Tomando en cuenta los intervalos de (4.159), la rapidez da valores reales en todo el eje, por lo tanto se puede rescribir la ecuación (4.168) así:

$$\frac{2}{1 + 4\lambda^2} = \pi\rho(\lambda) + \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda' \frac{\rho(\lambda')}{1 + (\lambda - \lambda')^2}. \quad (4.171)$$

Aplicando en esta ecuación la transformada de Fourier dada por

$$\rho(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-i\lambda\xi} \hat{\rho}(\xi), \quad (4.172)$$

y luego usando la fórmula integral del teorema del residuo

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \frac{e^{-i\lambda\xi}}{1 + \lambda^2} = \frac{1}{2} e^{-|\xi|}, \quad (4.173)$$

se llega a expresar

$$\hat{\rho}(\xi) = \frac{1}{2 \cosh(\xi/2)}, \quad (4.174)$$

y

$$\rho(\lambda) = \frac{1}{2 \cosh(\pi\lambda)}. \quad (4.175)$$

Por lo tanto se puede escribir la energía del estado base de la ecuación (4.161), que estaba en términos de la rapidez, así:

$$E_0 = \frac{N}{2} - N \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \rho(\lambda) \frac{1}{\lambda^2 + 1/4} = \frac{N}{2} - N 2 \ln 2. \quad (4.176)$$

4.4.2. Estados excitados

Sucede que el análisis de las ecuaciones de Bethe es complicado para un retículo con un número finito de partículas. Cuando este número tiende a infinito, $N \rightarrow \infty$, el análisis es más simple.

Consideremos la cadena de espines ferromagnética con $\Delta = 1$. Su parametrización de Orbach correspondiente se presentó en la ecuación (4.151). Recordemos que el estado base corresponde a tener todos los espines orientados hacia arriba, $M = 0$, y tiene una energía $E_0 = -N/2$.

Para el primer estado excitado $M = 1$ se tiene que las ecuaciones (4.154), son:

$$\left(\frac{\lambda + i/2}{\lambda - i/2} \right)^N = 1, e^{ikN} = 1. \quad (4.177)$$

Y la energía correspondiente es $E = E_0 + 2(1 - \cos k)$. En el límite $N \rightarrow \infty$, el número de onda k cubre de manera continua todo el intervalo $\langle 0, 2\pi \rangle$ y las rapideces cubren el eje real $-\infty < \lambda < \infty$. Estas excitaciones son *magnones*. La energía de un magnon con número de onda k esta dada por $\epsilon_k = 2(1 - \cos k)$.

En el sector con dos espines hacia abajo $M = 2$, las ecuaciones (4.154) con $\alpha = 1$ y $\beta = 2$, se convierten en

$$\left(\frac{\lambda_1 + i/2}{\lambda_1 - i/2} \right)^N = \frac{\lambda_1 - \lambda_2 + i}{\lambda_1 - \lambda_2 - i}, \quad (4.178)$$

$$\left(\frac{\lambda_2 + i/2}{\lambda_2 - i/2} \right)^N = \frac{\lambda_2 - \lambda_1 + i}{\lambda_2 - \lambda_1 - i}. \quad (4.179)$$

Estas se llaman Ecuaciones de Bethe. Se analizarán primero las partes reales. Se denotará $(\lambda_1 - \lambda_2 + i)/(\lambda_1 - \lambda_2 - i) = \exp(i\varphi)$, donde $\varphi \in \mathbb{R}$. Entonces se reescribirán las ecuaciones (4.178) y (4.179) así

$$e^{ik_1 N} = e^{i\varphi}, e^{ik_2 N} = e^{-i\varphi}. \quad (4.180)$$

Analizando para el límite $N \rightarrow \infty$ se nota que k_1 y k_2 cubren continuamente el intervalo $[0, 2\pi)$ y que se tiene un estado con 2 magnones independientes con energía $E = E_0 + \epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2}$.

Con respecto a la parte imaginaria de las ecuaciones (4.178) y (4.179), existen dos soluciones complejas

$$\lambda_1 = x_1 + iy_1, \lambda_2 = x_2 + iy_2. \quad (4.181)$$

donde $x_1, x_2, y_1, y_2 \in \mathbb{R}$. Comparando los módulos de la ecuación (4.178), nos resulta en:

$$\left[\frac{x_1^2 + (y_1 - 1/2)^2}{x_1^2 + (y_1 + 1/2)^2} \right]^N = \frac{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2 - 1)^2}{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2 + 1)^2}. \quad (4.182)$$

Asumiendo que $y_1 > 0$, mientras $N \rightarrow \infty$ la parte izquierda de la ecuación (4.182) tiende exponencialmente a 0, esto implica que:

$$x_1 = x_2, y_1 - y_2 = 1. \quad (4.183)$$

Se puede tomar un tratamiento similar para la ecuación (4.179). Multiplicando las ecuaciones (4.178) y (4.179) se obtiene:

$$\left[\frac{x_1 + (y_1 - 1/2)}{x_1 + (y_1 + 3/2)} \right]^N = 1, \quad (4.184)$$

lo que es equivalente a tener $y_1 = 1/2$ y que $-\infty < x_1 < \infty$, entonces se reescriben las ecuaciones (4.181) así:

$$\lambda_1 = x + i/2, \lambda_2 = x - i/2. \quad (4.185)$$

Este es el estado asociado de dos magnones. Su energía es $\epsilon_{k_1, k_2} = 1 - \cos(k_1 + k_2)$ y será siempre menor que la energía de dos magnones independientes $E = \epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2}$.

En el espacio de las rapideces, tomando un valor arbitrario para Δ y tomando el límite $N \rightarrow \infty$, los estados de la cadena de espines de Heisenberg XXZ exhiben una estructura de cuerda. Es decir que los estados están agrupados en cadenas complejas

$$\lambda_\mu = x + i\mu, \mu = -m, -m + 1, \dots, m - 1, m \quad (4.186)$$

Dado que $2m - 1$ es el número de estados entero y positivo, se tiene que $m = 1, 1/2, 3/2, \dots$. La estadística de las cuerdas complejas permite derivar la termodinámica de la cadena de espines de Heisenberg para una temperatura arbitraria T , como nos explica Baxter (1982).

5 Fases cuánticas y transiciones de fase cuánticas

5.1. Transiciones de fase

Suponiendo que se conocen las fuerzas entre moléculas de agua. Entonces se debería poder predecir el valor de la densidad del agua dentro de una cubeta a temperatura y presión ambiente. Más interesante, se debería predecir que la densidad del agua va a cambiar dramáticamente y de repente cuando la temperatura se incrementa de $99C$ a $101C$: La densidad decrecerá por un factor de 1600 mientras el agua se convierte en vapor de agua. Esto se conoce como una transición de fase Baxter (1982).

Variando la presión y la temperatura del agua, esta puede existir de forma sólida, líquida o gaseosa Yeomans (1992). Existen fronteras entre las fases bien definidas que separan estas regiones en las cuales cada estado es estable. El cruzar estas fronteras representa un salto en la densidad y un calor latente, signos de una transición de primer orden. El diagrama de fase de la Figura 5.1, corresponde a un fluido típico.

Considérese tener agua líquida y vapor coexistiendo, y empiécese a variar la presión y la temperatura. Mientras la temperatura se incrementa, la diferencia de densidad entre el líquido y el gas decrece continuamente hasta cero, como se muestra en la 5.2. La densidad se vuelve cero más allá del punto crítico C , a partir del cual es posible moverse continuamente de un fluido parecido a un líquido hacia un fluido parecido a un gas. La diferencia de las densidades, que es distinta de cero por debajo de la temperatura crítica, se llama *el parámetro de orden* de la transición líquido a gas. Si se observa el punto C en el diagrama de la Figura 5.2 parece ser insignificante.

Según Baxter (1982), pueden ocurrir efectos más extraños. Considérese una barra de hierro en un fuerte campo magnético H , paralelo a su eje de magnetización. La barra estará casi completamente magnetizada: en las unidades apropiadas se puede decir que la magnetización M es $+1$. Ahora, si se decrece el valor de H a cero, M decrecerá, pero no a cero. De hecho, al remover el campo magnético externo, la barra tendrá una magnetización espontánea con magnitud M_0 . Se espera que las fuerzas moleculares sean invariantes con respecto a un retroceso en el tiempo, esto implica que al revertir el campo se revertirá la magnetización, por lo que M debe ser una función impar de H . $M(H)$ debe tener una gráfica como la que se muestra en 5.3(a), con una discontinuidad en $H = 0$.

Cuando $T < T_C$, los límites $H \rightarrow 0_+$ y $H \rightarrow 0_-$ dan distintos valores para la magnetización

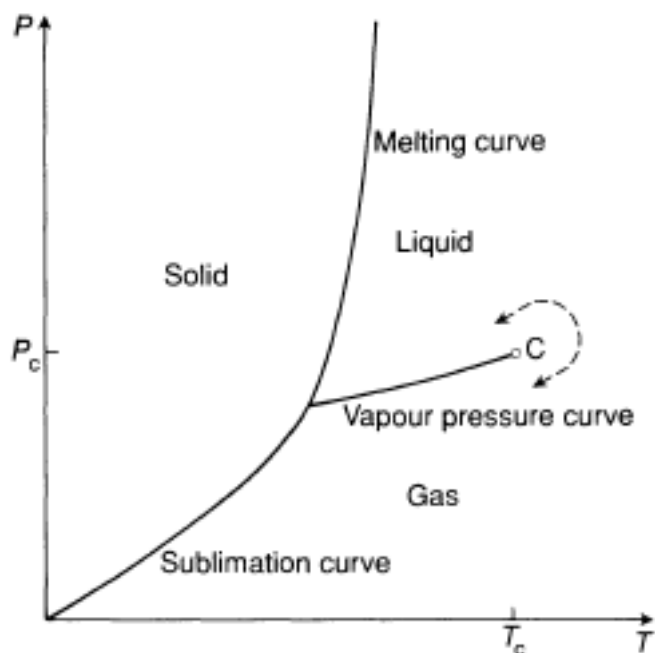


Figura 5.1: Diagrama de fase de un fluido.

Todas las transiciones de fase son de primer orden, excepto en el punto crítico C . Es posible moverse continuamente de líquido a gas más allá de C .

Fuente: Yeomans (1992).

espontánea; el valor que tome el sistema depende de su historia previa. Este es un ejemplo de un rompimiento espontáneo de simetría.

Se puede considerar la barra de hierro como que está pasando por una transición de fase en $H = 0$, cambiando espontáneamente su magnetización de negativa a positiva. En la experimentación se ha mostrado, según Baxter (1982), que esta discontinuidad desvanece y ocurre el fenómeno llamado histéresis: Esto se debe a que la barra no está en equilibrio termodinámico real. Si el hierro es suave y está sujeto a perturbaciones mecánicas, se puede obtener una gráfica muy similar a la Figura 5.3(a).

Siguiendo la explicación de Baxter (1982), consideremos un cambio continuo en la temperatura T . Al incrementar levemente la temperatura T , se encuentra que la magnetización $M(H)$ presenta una gráfica similar, pero la magnetización espontánea M_0 decrece, como se muestra en la Figura 5.3(b). Finalmente, si la temperatura se incrementa al punto crítico T_c , conocido como el punto de Curie, la magnetización espontánea M_0 desaparece y $M(H)$ se convierte en una función continua con pendiente infinita (susceptibilidad) en $H = 0$, como se muestra en la Figura 5.3(c). Si se incrementa aún más la temperatura T , $M(H)$ sigue siendo una función continua que se convierte en función analítica en $H = 0$.

Las explicaciones anteriores se pueden resumir construyendo una gráfica plana (T, H) , como

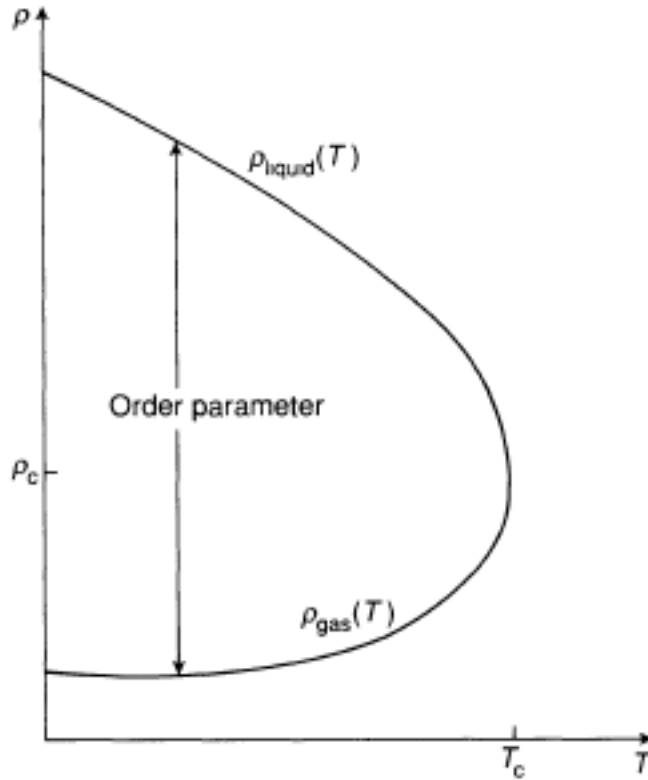


Figura 5.2: Curva de presión de vapor.

Valores de las densidades de líquido y gas coexistiendo a lo largo de la curva de presión de vapor. $(\rho_{liquid}(T) - \rho_{gas}(T))$ es el parámetro de orden para la transición de líquido a gas. Fuente: Yeomans (1992).

en la Figura 5.4, en la cual existe un corte a lo largo del eje de la temperatura T , de 0 a T_c . La magnetización M es una función analítica de T y de H en todos los puntos del plano derecho, excepto en esos puntos en el corte. M es discontinua en esos puntos. Esta gráfica es un diagrama de fase simple; todas las cantidades termodinámicas, como el calor específico o la susceptibilidad, son funciones analíticas suaves de T y H en todo el plano, con excepción de la recta $H = 0$, $T \leq T_c$. A lo largo de esta recta la magnetización es discontinua, como se muestra en la Figura 5.3(a). Esta discontinuidad es característica de una transición de fase de primer orden, con longitud finita de correlación.

El corte es una línea de transiciones de fase. El punto final $(T_c, 0)$ se conoce como punto crítico. Claramente la función $M(H, T)$ debe ser singular en este punto.

La magnetización espontánea es una función de la temperatura T y puede ser definida así

$$M_0(T) = \lim_{H \rightarrow 0^+} M(H, T) \tag{5.1}$$

Llevando el límite por los valores positivos de H . Tiene una gráfica del tipo mostrado en la Figura

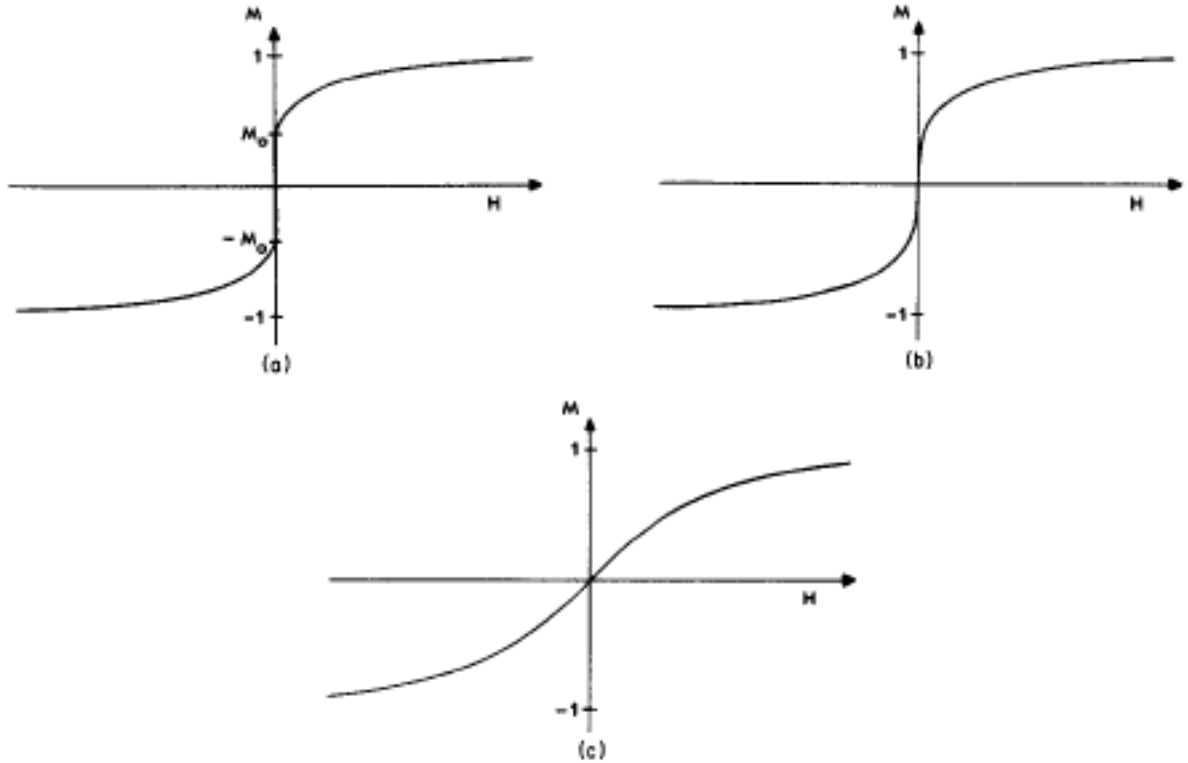


Figura 5.3: Gráficas de magnetización Vs. Campo magnético externo.

Para varias temperaturas: (a) $T < T_c$ (b) $T = T_c$ (c) $T > T_c$.

Fuente: Baxter (1982)

5.5, siendo positiva para $T < T_c$ y cero para $T > T_c$.

Al cruzar la frontera de fase a temperaturas menores que la temperatura crítica T_c , se encuentra que hay un salto en el valor de la magnetización. Es posible moverse continuamente de un estado de magnetización negativa hacia un estado de magnetización positiva si se está arriba del punto crítico $(T_c, 0)$. Este punto crítico divide estas dos tendencias; la magnetización es continua pero sus derivadas son discontinuas. Esto se manifiesta, justo como en el caso del fluido, por divergencias en las funciones de respuesta, el calor específico y la susceptibilidad Yeomans (1992).

El parámetro de orden para la transición de fase ferromagnética es la magnetización. Su variación con respecto a la temperatura a lo largo de la curva de coexistencia $H = 0$, como se muestra en la Figura 5.6. Al comparar esta gráfica con la Figura 5.2, la única diferencia es la simetría adicional en el caso magnético.

5.2. Transiciones de fase cuánticas

Según Sachdev (2011), la diferencia entre las transiciones de fase cuánticas y las transiciones de fase clásicas, como las ilustradas en la sección 5.1, es que las últimas suceden únicamente por fluctuaciones térmicas, dado que los sistemas que no consideran la mecánica cuántica caen en un

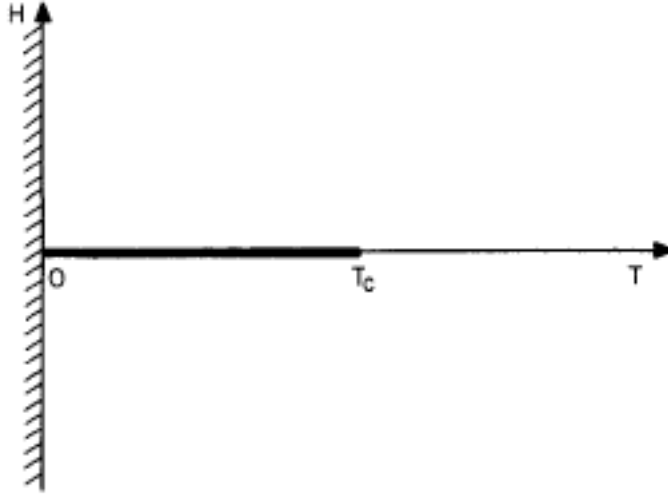


Figura 5.4: Diagrama de fase de un magneto uniaxial.

Esta gráfica muestra el campo magnético vs. la temperatura crítica. El plano (T, H) mostrando el corte a lo largo de T , en el cual M es discontinua. En el resto del medio plano, M es función analítica de T y H .

Fuente: Baxter (1982)

estado congelado sin fluctuación al llegar al cero absoluto. Esto contrasta con las transiciones de fase cuánticas, las cuales se dan a causa del principio de incertidumbre de Heisenberg, incluso en el estado base, y puede causar transiciones de fase interesantes en $T = 0$. Por lo tanto, la región $T > 0$ en la vecindad de un punto crítico cuántico ofrece entonces una composición de efectos derivados de las fluctuaciones térmicas y cuánticas; algunas veces se encuentran algunos dominantes grados de libertad efectivos cuyas fluctuaciones son puramente clásicas y térmicas, por lo tanto la teoría clásica aplica a ellas.

Siguiendo el planteamiento de Sachdev (2011), considérese un hamiltoniano $\mathcal{H}(g)$, cuyos grados de libertad residen en sitios dentro de un retículo, y que varía en función de la constante adimensional de acoplamiento g . Al seguir la evolución de la energía de estado base de $\mathcal{H}(g)$ en función de g . En el caso de un retículo de tamaño finito, esta energía del estado base será un función analítica suave de g . La principal probabilidad para que se encuentre una excepción emana del caso cuando g se acople únicamente a una cantidad conservada, por ejemplo, $\mathcal{H}(g) = \mathcal{H}_0 + g\mathcal{H}_1$ donde \mathcal{H}_0 y \mathcal{H}_1 conmutan. Esto significa que \mathcal{H}_0 y \mathcal{H}_1 pueden ser diagonalizados simultáneamente y entonces las eigenfunciones de ellos serán independientes de g aunque los eigenvalores varíen en función de g ; entonces, puede haber un salto de nivel donde un estado excitado se convierte en un estado base con $g = g_C$, creando un punto no analítico en el estado base en función de g , como se muestra en la Figura 5.7.

Cuando se tiene un retículo infinito, las posibilidades son más ricas. Un cruce evitado entre el estado base y el primer estado excitado en un retículo finito puede convertirse progresivamente

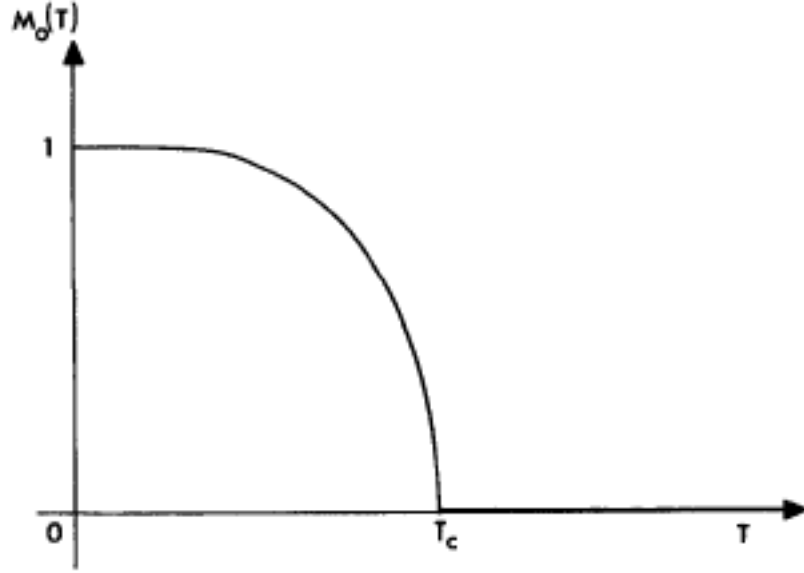


Figura 5.5: Magnetización espontánea Vs. Temperatura crítica.
Fuente: Baxter (1982)

más afilado, en el sentido que se muestra en la Figura 5.8, mientras crece el tamaño del retículo, derivando en un punto no analítico en $J = J_C$ en el límite hacia el infinito del retículo. Se identifica cualquier punto no analítico en el estado base de la energía en un sistema reticular infinito como una transición de fase: La no analiticidad de puede ser un caso limitante de un cruce de niveles evitado, o puede ser un cruce de niveles. La transición de fase cuántica es acompañada usualmente por un cambio cualitativo en la naturaleza de las correlaciones en el estado base.

Siguiendo con el razonamiento de Sachdev (2011), las transiciones de fase cuánticas de segundo orden se caracterizan por que su escala característica de las fluctuaciones que suceden por encima del estado base desaparecen mientras g se acerca a g_C . Se debe hacer que δ represente una escala caracterizando alguna significativa densidad de fluctuaciones a temperatura cero para $g \neq g_C$. Por lo tanto δ puede ser la la energía de la excitación más baja por encima del estado base, si este no es cero, y por lo tanto existe una brecha energética δ ; o si existen excitaciones a energías arbitrariamente bajas al límite hacia el infinito en el tamaño del retículo, δ es la escala a la cual existe un cambio cualitativo en la naturaleza del espectro de frecuencias desde su frecuencia más baja hasta su comportamiento de más alta frecuencia Sachdev (2011). En muchos casos, se encuentra que mientras g se aproxima a g_C , δ desaparece así

$$\delta \sim J |g - g_C|^{Z\nu}, \quad (5.2)$$

Acá J representa la escala de energía de un acoplamiento microscópico característico, y $Z\nu$ es un exponente crítico Sachdev (2011). Su valor es universal en la mayoría de los casos, como apunta

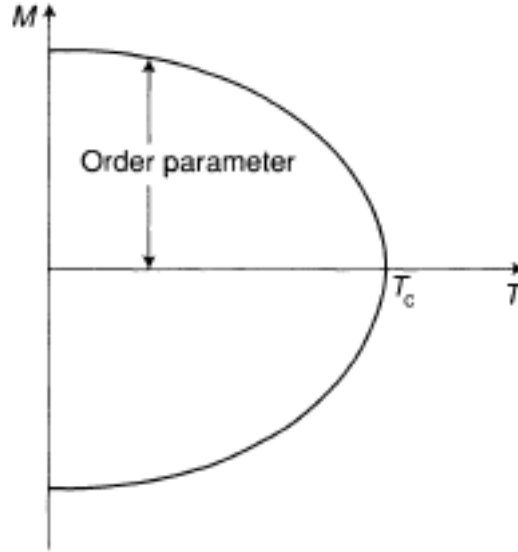


Figura 5.6: Magnetización en campo externo nulo Vs. Temperatura crítica
 Debajo de la temperatura crítica existe magnetización espontánea $\pm M(T)$.
 Fuente: Yeomans (1992).

Cardy (1996), significando que este valor es independiente de la mayoría de los detalles microscópicos del hamiltoniano $\mathcal{H}(g)$. Además de desvanecerse la escala de energía, las transiciones de fase cuánticas de segundo orden tienen invariablemente una longitud de correlación ξ divergente. Esta puede ser la escala de longitud que determina el decaimiento exponencial de las correlaciones coetáneas en el estado base o puede ser la escala de longitud a la cual le ocurre a las correlaciones algún cambio en las distancias más largas. Esta longitud diverge así:

$$\xi^{-1} \sim \Lambda |g - g_C|^\nu, \quad (5.3)$$

donde ν es un exponente crítico, y Λ es una escala de longitud inversa de orden del espaciamiento inverso del retículo. La razón de los exponentes de las ecuaciones 5.3 y 5.2 es Z , el exponente crítico dinámico. La escala de energía característica se desvanece como la Z potencia de la escala de longitud inversa

$$\delta \sim \xi^{-Z}. \quad (5.4)$$

Se debe notar que las singularidades a las cuales se hace referencia existen en el estado base del sistema reticular. De manera estricta, las transiciones de fase cuánticas ocurren únicamente a temperatura cero.

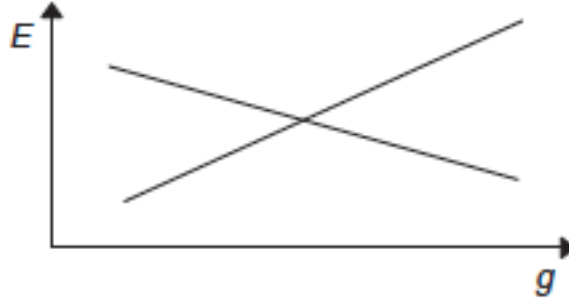


Figura 5.7: Energía Vs. Constante de acoplamiento, con cruce de nivel.

Eigenvalores bajos, E , de un hamiltoniano $\mathcal{H}(g)$ en un retículo finito, en función de g . Cuando $\mathcal{H}(g) = \mathcal{H}_0 + g\mathcal{H}_1$ y donde \mathcal{H}_0 y \mathcal{H}_1 conmutan y son independientes de g , puede haber un cruce de nivel.

Fuente: Sachdev (2011).

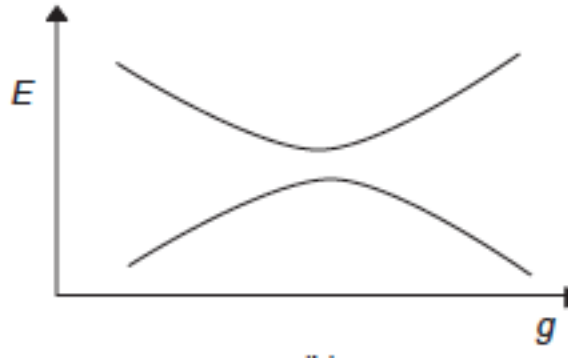


Figura 5.8: Energía Vs. Constante de acoplamiento, sin cruce de nivel.

Eigenvalores bajos, E , de un hamiltoniano $\mathcal{H}(g)$ en un retículo finito, en función de g . Aunque $\mathcal{H}(g) = \mathcal{H}_0 + g\mathcal{H}_1$ y \mathcal{H}_0 y \mathcal{H}_1 conmuten y son independientes de g , generalmente sucede un cruce de nivel evitado.

Fuente: Sachdev (2011).

5.3. Transiciones de fase cuánticas en el modelo de Heisenberg XXZ

Para esta sección se tomó como referencia una cadena de espines de Heisenberg XXZ de 8 sitios. Las transiciones de fase que se pueden estudiar de este modelo, corresponden a un cambio abrupto en la magnetización de la cadena de espines, por lo cual se entiende que la magnetización es el parámetro de orden de la transición de fase. Dado que se considera el caso en el cero absoluto y que la energía del estado base a esta temperatura no es cero, se tiene que

$$M = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle = M\hat{n}, \quad (5.5)$$

donde M es un vector en tres dimensiones por lo cual el parámetro de orden tiene 3 dimensiones

Delcompare (2017). El hamiltoniano en campo externo cero tiene simetría $O(3)$, lo que implica

$$\mathcal{H}\{S_i\} = \mathcal{H}\{RS_i\}, \mathcal{H} = 0, \quad (5.6)$$

donde R es una matriz de rotación arbitraria en tres dimensiones, actuando sobre todos los $\{S_i\}$. El hamiltoniano, en ausencia de campo externo, es invariante bajo esta rotación global arbitraria en el espacio de espín porque sólo depende del producto escalar $S_i S_{i+1}$, es decir, en el ángulo entre S_i y S_{i+1} . Si se toma en cuenta que R rota todos los espines en la misma cantidad, implica que no hace girar el retículo en que están los espines colocados. Con el campo externo igual a cero, la simetría $O(3)$ del modelo de Heisenberg se rompe espontáneamente con $T < T_C$ Delcompare (2017).

Cuando $\mathcal{H} \neq 1$, el hamiltoniano sigue siendo invariante ante las rotaciones de los espines en el plano perpendicular a \mathcal{H} . En el caso de considerar a temperatura cero absoluto, sucede que se tiene orden ferromagnético u orden antiferromagnético. Si el sistema se encuentra en fase antiferromagnética, la magnetización total es cero; mientras que si la cadena se encuentra en una fase ferromagnética la magnetización total tiene un valor finito. En este caso la magnetización es

$$M = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle \quad (5.7)$$

Para $\Delta < -1$, la cadena de Heisenberg XXZ presenta un estado base con todos los espines alineados en la dirección $-z$ con energía dada por, lo que significa que el este estado presenta una magnetización negativa

$$M = -\frac{1}{8} \sum_i \langle \mathbf{S}_i^z \rangle, \quad (5.8)$$

donde $N = 8$ es el número de sitios. y la magnetización por sitio es -1 . Como se determinó en la sección la región $-1 < \Delta < 1$ la energía es cero, por lo que la magnetización también lo es. En esta región se tiene un metal antiferromagnético.

Con el propósito de mostrar diagramas de fase correspondiente a la cadena cuántica de espín $1/2$ de Heisenberg XXZ, se utilizó un programa escrito en Python, que opera un sistema de 8 sitios. El programa elabora la cadena periódica en estado base de dicha longitud. Luego, haciendo variar la anisotropía desde -2 hasta cero y luego desde cero hasta $+2$ en pasos de tamaño $0,01$, va guardando las eigenfunciones y sus respectivos eigenvalores para cada paso. Ya teniendo dichos valores, calcula la magnetización para cada conjunto de eigenfunciones y eigenvalores. Luego grafica la magnetización contra la anisotropía. De esta forma se obtienen los diagramas de fase mostrado en las Figuras 5.9 y 5.10.

Interpretando estas gráficas se puede decir que en el estado base de la cadena cuántica de espín $1/2$ de Heisenberg XXZ de 8 sitios a cero absoluto, presenta un cambio abrupto en la magnetización,

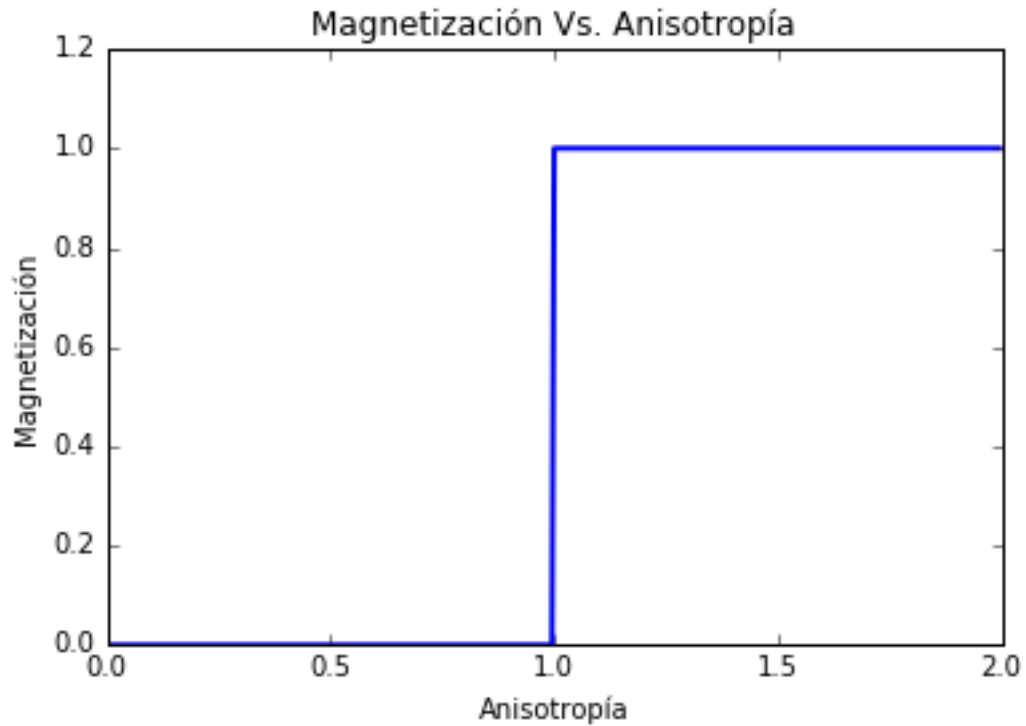


Figura 5.9: La magnetización por sitio vs. la anisotropía Δ para una cadena de 8 sitios.
 La gráfica muestra la transición de fase cuántica en el cuadrante positivo del diagrama de fase.
 Fuente: Elaboración propia.

cuando $\Delta \rightarrow -1$, cuya magnitud pasa de $M = 0$ a $M = -1$. De manera similar, se observa que la magnetización de la cadena cuántica de espín 1/2 de Heisenberg XXZ de 8 sitios presenta otro cambio abrupto cuando $\Delta \rightarrow +1$, donde la magnitud de la magnetización pasa de ser $M = 0$ a $M = 1$. Este hecho nos permite afirmar que existen dos transiciones de fase cuánticas en el estado base de una cadena cuántica de espín 1/2 de Heisenberg XXZ. Considerando el razonamiento presentado en las secciones 4.2, 4.3 y 4.4, se puede decir que existen siempre estas transiciones de fase sin importar la longitud de la cadena.

El acoplamiento en el plano x - y del espín compite con el acoplamiento en la eje z , por lo que este último depende del valor de las constantes. Habiendo tomado $j = 1$ tenemos que anisotropía puede ser menor, igual o mayor, cambiando el ordenamiento de los espines y así cambiando el estado y la energía.

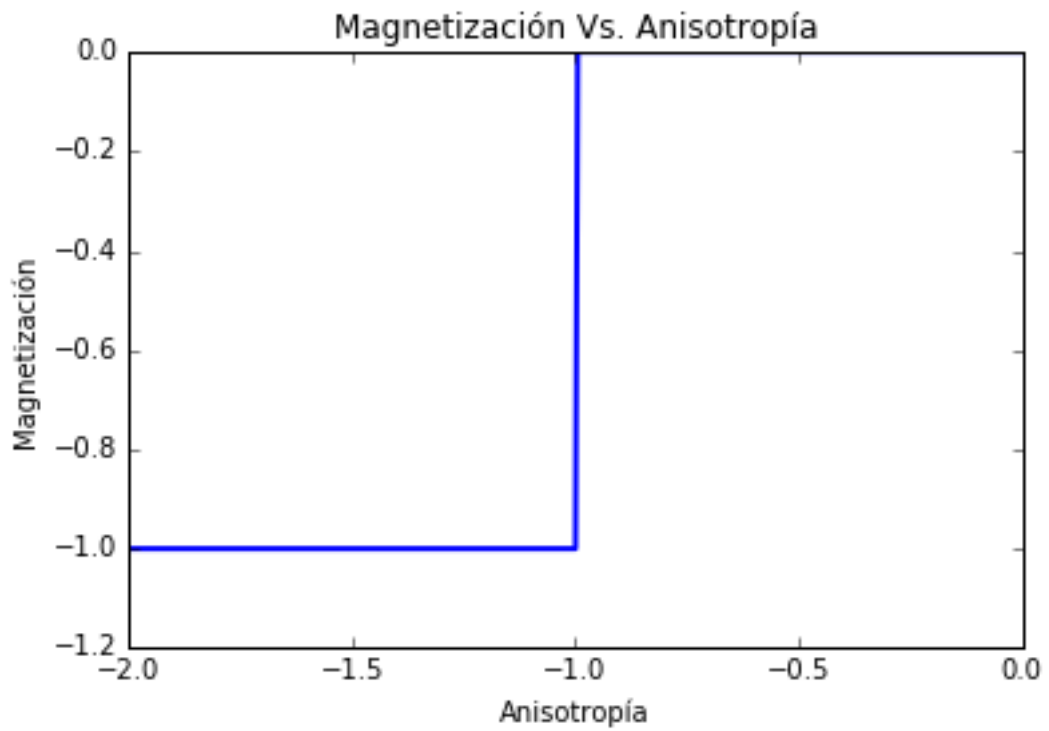


Figura 5.10: La magnetización por sitio vs. anisotropía $-\Delta$ para una cadena de 8 sitios. La gráfica muestra la transición de fase cuántica en el cuadrante negativo del diagrama de fase. Fuente: Elaboración propia.

6 Conclusiones

6.1. El espectro de energía de una cadena cuántica de espín 1/2 de Heisenberg XXZ

Una cadena cuántica de espín 1/2 descrita por el modelo de Heisenberg XXZ presenta un espectro de energía, obtenido a través del método Ansatz de Bethe, que se puede determinar con precisión arbitraria: Teniendo N y el número M de sitios con espín hacia abajo podemos descartar todas las configuraciones del estado de la cadena $|n\rangle$ que no cumplan con tener M cantidad de espines hacia abajo y así reducir la cantidad de eigenestados y eigenvalores. Teniendo los número N , M y la anisotropía Δ podemos enfocar nuestro espectro en un caso más específico, como se presentó en la sección 4.3, resolviendo un sistema de ecuaciones algebraicas dadas por 4.160.

El problema de encontrar el espectro de energías se simplifica porque todas las posibilidades de que se dispersen los magnones dentro de la cadena consisten de muchas dispersiones de dos partículas, por lo cual se concluye que este modelo es reducible a dos cuerpos.

Con estas conclusiones se cumple con el objetivo general de este trabajo, que es describir el espectro de energías de una cadena cuántica de espines de Heisenberg XXZ, listado en (2).

6.2. Descripción del modelo de Heisenberg.

El hamiltoniano general para el modelo de Heisenberg utilizado en este trabajo es:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= J[\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \dots + \mathbf{S}_N \cdot \mathbf{S}_1] \\ &= J \sum_{n=1}^N \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1},\end{aligned}$$

donde la constante J expresa la naturaleza del acoplamiento y $\mathbf{S}_n = (\mathbf{S}_n^x, \mathbf{S}_n^y, \mathbf{S}_n^z)$. Existen variantes de este modelo, dependiendo de la restricción que puedan tener los ejes en el espacio del espín.

6.3. Las interacciones entre partículas de espín 1/2 y su influencia en la dinámica de una cadena de espines.

Como se detalló en la sección (3.2.4) del capítulo (3), los materiales de uso práctico tienen sus magnetos atómicos alineados por medio de una *interacción de intercambio*. Las fuerzas eléctricas entre electrones son mucho más fuertes que las de origen magnético. La interacción con el campo magnético es $I = \vec{\mu} \cdot \vec{\mathbf{B}}$ y el momento magnético total es $\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}$, donde $\vec{\mathbf{L}}$ es el momento magnético orbital y es $\vec{\mathbf{S}}$ es el momento de espín. Se mostró en la subsección (3.2.1) que

$I = \beta(\tilde{\mathbf{L}} \otimes \mathbf{I}_L) \cdot \tilde{\mathbf{B}} + \beta(\mathbf{I}_S \otimes \tilde{\mathbf{S}}) \cdot \tilde{\mathbf{B}}$, por lo tanto se puede factorizar el intercambio en parte orbital y parte de espín, por lo que se escogió trabajar únicamente con el intercambio de espín.

6.4. Análisis del método de Ansatz de Bethe utilizando el modelo de Heisenberg en su variante XXX.

Como se mostró en la sección (4.1), se aplica el método Ansatz de Bethe al modelo de Heisenberg XXX iniciando con el cálculo de la energía de un estado basal y luego se empieza a sectorizar el hamiltoniano en regiones caracterizadas por tener, en primer lugar, un espín con la orientación cambiada con respecto a los demás en el estado base; luego en segundo lugar, se sectoriza el hamiltoniano en regiones con dos espines con la orientación cambiada hallando en el proceso los casos de espines adyacentes y espines no adyacentes; luego se sigue sectorizando el hamiltoniano para tres espines, mostrando que el planteamiento sigue un patrón, y que se puede resolver por sectores el la totalidad del hamiltoniano del modelo, simplemente escogiendo qué partes se quieren resolver, sin tener que diagonalizarlo completamente. Por lo tanto se puede describir el espectro de energías del hamiltoniano del modelo de Heisenberg XXX de manera exacta por medio de ecuaciones algebraicas.

Con el análisis detallado del método del ansatz de Bethe presentado en la sección (4.1), cumplimos con el objetivo específico número dos de los listados en (2).

6.5. Aplicación del método de Ansatz de Bethe al modelo de Heisenberg en su variante XXZ.

De manera similar a como se procedió con el modelo de Heisenberg XXZ, se mostró en la sección 4.2, se aplica el método Ansatz de Bethe al modelo de Heisenberg XXZ de la misma manera que con el modelo de Heisenberg XXX. La diferencia radica en las simetrías que presenta el hamiltoniano XXZ, las cuales nos permiten eliminar sectores del hamiltoniano desde un principio. De similar manera se concluye que el método nos permite sectorizar el hamiltoniano XXZ en regiones de igual energía con igual número de espines con dirección cambiada permitiendonos encontrar los eigenvalores y eigenfunciones según nuestra conveniencia.

Con el análisis detallado del método del ansatz de Bethe presentado en la sección 4.77 y con la parametrización de las ecuaciones en la sección 4.3 se cumplió con el objetivo específico número dos de los listados en (2). Con estas conclusiones se aplicó el método del ansatz de Bethe, por lo que se cumplió con el objetivo específico número tres de este trabajo, listado en (2).

6.6. Aplicaciones recientes del modelo de Heisenberg.

En la sección (3.5) se abordaron tres campos de la física en los cuales se usó el modelo de Heisenberg dentro de la pasada década hasta el año pasado.

6.6.1. Información cuántica

En el campo de la información cuántica, algunas de las simulaciones del transporte de información en cadenas de espines con alguna de las variantes del modelo de Heisenberg también se realizan con técnicas como RMN (Resonancia Magnética Nuclear). También se hacen simulaciones con modelos de Heisenberg antiferromagnéticas para cristales simples probando distintos métodos como el de Monte Carlo cuántico, protocolos de percolación, etc.

6.6.2. Computación cuántica

Las computadoras cuánticas aún no son comprendidas a totalidad aunque desde hace algunos años se vienen estudiando distintos problemas en los que se podrían poner a prueba. También se estudian las características de los dispositivos que podrían realizar el procesamiento. El modelo de Heisenberg se usa para caracterizar el confinamiento de cúbits acoplados usando una cadena cuántica con espín $1/2$ anisotrópica de Heisenberg, construyendo una secuencia ligada de energía por sitios en un retículo que resulta en el confinamiento de partículas en sitios individuales.

6.6.3. Redes tensoriales

Otro campo en el que se usa el modelo de Heisenberg son las redes tensoriales. Estas son representaciones de estados cuánticos de múltiples partículas que se basan en la estructura local de entrelazamiento. Utilizamos el entrelazamiento para construir la función de onda para el sistema. Un sistema cuántico con N partículas de espín $1/2$ cuyo eigenestado se pueden escribir de la forma,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N C_n |n\rangle. \quad (6.1)$$

Se puede describir cualquier función de onda del sistema con los coeficientes complejos C_n mientras se escoja una base individual $|n\rangle$ para los espines $n = 1, 2, \dots, N$. Estos coeficientes se pueden entender como elementos de un tensor C con N índices, donde cada uno de los índices puede tomar dos valores espín arriba o espín abajo. El modelo de Heisenberg se utiliza dentro de las redes tensoriales para representar estados cuánticos conocidos y así poder extraer información intrínseca de los sistemas cuánticos como parte de una red tensorial y también para comparar los resultados de métodos alternativos aplicados a los mismo sistemas.

Al describir estos temas en la sección (3.5) se cumplió el objetivo de introducir al lector a un conjunto de aplicaciones recientes del modelo de Heisenberg, cumpliendo así con el objetivo específico número cinco de este trabajo, listado en (2).

6.7. Las transiciones de fase clásicas y cuánticas

Como se expuso en la sección (5.1), las transiciones de fase clásicas se refieren a un cambio abrupto en el parámetro de orden de un material al variar las condiciones externas en el que se encuentra, como puede ser la temperatura, la presión o el campo magnético. El material pasa de

estar en un estado a estar en otro con un salto en el valor del parámetro de orden, como ocurre con la densidad del agua al pasar de líquido a gas variando su temperatura de 99 a 101. El cruce de un estado a otro se denomina transición de fase.

En la sección (5.2) se mostró que las transiciones de fase cuánticas ocurren si se considera un hamiltoniano $\mathcal{H}(g)$ con sus grados de libertad residiendo en sitios dentro de un retículo, y se hace variar en la constante adimensional de acoplamiento g entre las partículas pertinente. Dentro de este contexto, la energía del estado base será un función analítica suave de g . La principal probabilidad para que se encuentre una excepción viene del caso cuando g se acople únicamente a una cantidad conservada. Cualquier punto de no analiticidad en la energía del estado base se considera una transición de fase.

La diferencia entre las transiciones de fase cuánticas y las transiciones de fase clásicas, como las ilustradas en la sección 5.1, es que las últimas suceden únicamente por fluctuaciones térmicas, dado que los sistemas que no consideran la mecánica cuántica caen en un estado congelado sin fluctuación al llegar al cero absoluto. Esto contrasta con las transiciones de fase cuánticas, las cuales se dan a causa del principio de incertidumbre de Heisenberg, incluso en el estado base, y puede causar transiciones de fase interesantes en $T = 0$.

Describiendo cómo funcionan las transiciones de fase clásicas y las transiciones de fase cuánticas, cumplimos con el objetivo específico número seis de los listados en (2).

6.8. Las transiciones de fase cuánticas de cadena cuántica de espín 1/2 descrita por el modelo de Heisenberg XXZ

Se utilizó un programa desarrollado en entorno Python, que sirvió para realizar las gráficas (5.9) y (5.10). Se encontró que variando el valor de la anisotropía de una cadena de espín 1/2 de Heisenberg XXZ con respecto la magnetización, se muestra que existe transición de fase a cero absoluto en la frontera cuando pasamos de $\Delta \leq -1$ a $-1 < \Delta$. La magnetización por sitio pasa de ser -1 a ser cero de forma abrupta. Esto obedece a un cambio igualmente abrupto en el ordenamiento de los espines, ya que estos pasan de tener un grupo de $M < N$ espines orientados hacia abajo a tener igual número de espines orientados hacia abajo que espines orientados hacia arriba lo cual causa que la magnetización se anule. La transición de fase cuántica sucede también para el caso $\Delta < 1$ a $1 \leq \Delta$. Es de notar que estas transiciones ocurren en el estado base de la cadena.

En la sección 5.3, se utilizó un programa en Python para simular una transición de fase cuántica e interpretamos el resultado de la simulación, cumpliendo así con el objetivo específico número siete de este trabajo, listado en (2).

7 Recomendaciones

1. Continuar con el estudio analítico de la cadena cuántica de espín 1/2 de Heisenberg XXZ en el sector $-1 < \Delta < 1$, realizando su respectiva parametrización de Orbach.
2. Dado que el ansatz de Bethe no nos explica por qué soluciona exactamente este modelo, por lo que se recomienda profundizar el estudio de los sistemas cuánticos integrables para entender el por qué.

Bibliografía

- Altland, Alexander; Simmons, Ben. 2001. *Concepts of Theoretical Solid State Physics*. 412 págs.
- Ashcroft, Neil; Mermin, David. 1976. *Solid State Physics*. Saunders College Publishing. 826 págs.
- Arfken, George; Weber, Hans. 2005. *Mathematical Methods for Physicists*. Sexta edición. Burlington, Massachusetts: Elsevier Academic Press. 1182 págs.
- Baxter, Rodney. 1982. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. New York: Academic Press. 486 págs.
- Batchelor, Murray. 2007. «The Bethe Ansatz After 75 Years» *Physics Today*. LX (1): 36:40
- Bellucci, Stefano; Cini, Michele; Onorato, Pasquale; Perfetto, Enrico. *Correlated Nanoscopic Josephson Junctions*. 2006. J. Phys.: Condens. Matter 18 S2069. arXiv:cond-mat/0603854 [cond-mat.supr-con] <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0603854>
- Bethe, Hans. 2011. *On the Theory of Metals*. Traducido al Inglés por T.C. Dorlas. Dublin: Dublin Institute for Advanced Studies. 24 págs.
- Blundell, Stephen. 2011. *Magnetism in Condensed Matter Physics*. Oxford: Oxford University Press. 238 págs.
- Cappellaro, Paola; Ramanathan, Chandrasekhar; Cory, David. *Simulations of Information Transport in Spin Chains*. 2017. Phys Rev A 76 032317. <https://arxiv.org/abs/0706.0342>
- Cardy, John. 1996. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Cambridge: Cambridge University Press. 238 págs.
- Castillo, Rodrigo. 2015. *Holografía, Entrelazamiento Cúantico y Hoyos Negros*. Universidad del Valle de Guatemala. 101 págs.
- Chandler, David. 1987. *Introduction to modern statistical mechanics*. New York: Oxford University Press. 274 págs.
- Cohen-Tannoudji, Claude; Diu, Bernard; Laloe, Frank. 1996. *Quantum Mechanics, Volume 1*. Berlin: Wiley-VCH. 613 págs.
- Cubitt, Toby; Montanaro, Ashley; Piddock, Stephen. *Universal Quantum Hamiltonians*. 2017. arXiv:1701.05182 [quant-ph] <https://arxiv.org/abs/1701.05182>

- De Raedt, H.; Hams, A.H.; Michielsen, K.; Miyashita, S.; Saito, K.. *Quantum Statistical Mechanics on a Quantum Computer*. 2016. arXiv:quant-ph/9911037
- Delcompare, Paola. 2017. *Métodos computacionales basados en entrelazamiento cuántico para el análisis de transiciones de fase en cadenas cuánticas de espín 1/2*. Instituto de ciencias físicas y matemáticas, Universidad de San Carlos de Guatemala. 139 págs.
- Dykman, M.I.; Santos, L.F.; Shapiro, M.. 2005. *Many Particle Confinement by Constructed Disorder and Quantum Computing*. AIP Conference Proceedings 777, 148. arXiv:cond-mat/0507493 [cond-mat.mes-hall] <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0507493>
- Eisberg, Robert; Resnick, Robert. 1999. *Física Cuántica*. Decimocuarta reimpression. México: Editorial Limusa, S.A. de C.V.. 831 págs.
- Feynman, Richard. *Statistical Mechanics: A Set Of Lectures*. 1982. Séptima reimpression. Reading, Massachusetts: The Benjamin/Cummings publishing company, Inc. 354 págs.
- Franchini, Fabio. 2016. *An Introduction to integrable techniques for one-dimensional quantum systems*. Zagreb: Ruder Boskovic Institute; Trieste: SISSA. 134 págs.
- Goldenfeld, Nigel. 1992. *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*. Reading, Massachusetts: Perseus Books. 394 págs.
- Karbach, Michael; Müller, Gerhard. 1997. Introduction to the Bethe Ansatz I. Computers in Physics 11. Rhode Island: University Of Rhode Island. Págs. 36-43.
- E. Lieb, D. Robinson. 1972. *The finite group velocity of quantum spin systems*. Commun. Math. Phys. 28, 251–257.
- Marder, Michael. 2011. *Condensed Matter Physics*. 2da edición. New Jersey, John Wiley & Sons, Inc. 954 págs.
- Nachtergaele, Bruno; Sims, Robert; Young, Amanda. 2018. *Quasi-Local Bounds for Quantum Lattice Systems. Part I. Lieb-Robinson Bounds, Quasi-Local Maps, and Spectral Flow Automorphisms*. arXiv:1810.02428 [math-ph] <https://arxiv.org/abs/1810.02428>
- Nielsen, Michael; Chuang, Isaac. 2011. *Quantum Computation and Quantum Information*. Edición del Décimo Aniversario. Cambridge University Press. Cambridge. 675 págs.
- Orús, Román. 2014. *Advances on Tensor Network Theory: Symmetries, Fermions, Entanglement, and Holography*. Institute of Physics, Johannes Gutenberg University, 55099 Mainz, Germany. 31 págs.

- J. B. Parkinson; J. D. Farnell. *An Introduction to Quantum Spin Systems*. 1era. edición. Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag. 151 págs.
- Pathria, Raj Kumar; Beale, Paul. 2011. *Statistical Mechanics*. 3era edición. Elsevier. 718 págs.
- Royal Swedish Academy of Sciences. *Topological phase transitions and topological phases of matter. Scientific Background on the Nobel Prize for Physics 2016*. 2016.
- Sachdev, Subir. 2011. *Quantum Phase Transitions*. Segunda edición. Cambridge: Cambridge University Press. 470 págs.
- Samaj, Ladislav. *Introduction to Exactly Solvable 1D Quantum Lattice Models of Solid-State Physics*. Bratislava: Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences. 50 págs.
- Sakurai, Jun John; Napolitano, Jim. 2011. *Modern Quantum Mechanics*. 2da edición. San Francisco: Addison-Wesley. 550 págs.
- Shankar, Ramamurti. 1994. *Principles of Quantum Mechanics*. 2da Edición. New York: Plenum Press. 676 págs.
- Stanescu, Tudor. 2017. *Introduction to Topological Quantum Matter & Quantum Computation*. Primera Edición. Boca Ratón. CRC Press. 380 págs.
- Staudacher, Matthias. 2011. *Review of AdS/CFT integrability, Chapter III.1: Bethe Ansatz and the R-Matrix Formalism*. 17 págs.
- Ueda, Hiroshi. 2018. *Infinite-Size Density Matrix Renormalization Group with Parallel Hida's Algorithm*. Journal of the Physical Society of Japan. 7 págs.
- Vajk, O. P.; Greven, M.; Mang, P. K.; Lynn, J. W.. *Neutron Scattering, Magnetometry, and Quantum Monte Carlo Study of the Randomly-Diluted Spin-1/2 Square-Lattice Heisenberg Antiferromagnet*. 2003. Solid State Communications 126, 93. arXiv:cond-mat/0211033 [cond-mat.str-el] <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0211033>
- Yang, C.N; Yang, C.P. 1966. *One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. I. Proof of Bethe's Hypothesis for Ground State in a Finite System*. Physical Review, Vol. 150, Num. 1. Págs. 322 a la 327.
- Yang, C.N; Yang, C.P. 1966. *One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. II. Properties of the Ground-State Energy Per Lattice Site for an Infinite System*. Physical Review, Vol. 150, Num. 1. Págs. 327 a la 339.
- Yang, C.N; Yang, C.P. 1966. *One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. III. Applications*. Physical Review, Vol. 151, Num. 1. Pag. 258 a la 264.

Yeomans, Julia. 1992. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford: Oxford University Press.
153 págs.

9 Anexos

9.1. Programa para diagonalización del hamiltoniano de Heisenberg XXZ

```

#!/usr/bin/env python3
# -*- coding: utf-8 -*- """ Created on Tue Sep 4 12:03:45 2018
"""
import numpy as np
from numpy import linalg as LA
import matplotlib.pyplot as plt
import time
start = time.time() #guarda el tiempo inicial al iniciar el proceso
dhx = 0.01
#matrices de Pauli
sx = [[0.,1.],[1.,0.]]
sy = [[0.,-1.0j],[1.0j,0.]]
sz = [[1.,0.],[0.,-1.]]
s0 = [[0.,0.],[0.,0.]]
sid = [[1.0,0.0],[0.0,1.0]]
#Base en sz
up = [[1.0],[0.0]]
down = [[0.0],[1.0]]
#Parametros de la cadena
N = 8 #tamaño de la cadena
#Jx, Jy, Jz son las constantes de acoplamiento
Jx = 1.
Jy = 1.
Jz = 2.
H = np.zeros((2**(N),2**(N)))
SXtot = np.zeros((2**(N),2**(N)))
times = np.int(2*np.abs(2*Jx)/dhx) JZ = [] hX = [] mag = []
#-----
#Función de operadores 1/2
#N es el tamaño de la cadena +1
#alfa es la matriz de Pauli: 1->x, 2->y, 3->z
#-----
def S(N,alfa,n):
if alfa == 1:
if n == 0:
Sn = np.kron(sx,np.identity(2**(N-1)))
else:
Sn = np.kron(np.kron(np.identity(2**(n-1)),sx),np.identity(2**(N-n)))
elif alfa == 2:
if n == 0:
Sn = np.kron(sy,np.identity(2**(N-1)))
else:
Sn = np.kron(np.kron(np.identity(2**(n-1)),sy),np.identity(2**(N-n)))
elif alfa == 3:
if n == 0:
Sn = np.kron(sz,np.identity(2**(N-1)))
else:
Sn = np.kron(np.kron(np.identity(2**(n-1)),sz),np.identity(2**(N-n)))
return Sn
#Transicion de fase
for k in range(times):
#Utilizando condicion periodica de frontera, usamos N hasta N+1
SXtot = np.zeros((2**(N),2**(N)))
JZ.append((-2*Jx + float(k) * dhx)/(2*Jx)+1)
for n in range(1,N+1):
if n == N:
SXn = S(N,1,n)
SXn1 = S(N,1,1)
SYn = S(N,2,n)
SYn1 = S(N,2,1)
SZn = S(N,3,n)
SZn1 = S(N,3,1)
else:
SXn = S(N,1,n)
SXn1 = S(N,1,n+1)
SYn = S(N,2,n)
SYn1 = S(N,2,n+1)
SZn = S(N,3,n)
SZn1 = S(N,3,n+1)
#Definimos el hamiltoniano
H = H - 0.5*((Jx * np.dot(SXn,SXn1) + Jy * np.dot(SYn,SYn1) + 2 * JZ[k] * np.dot(SZn,SZn1)))
h = np.matrix(H)
SXtot = SXtot + SZn
#-----
#Funcion para diagonalizar el hamiltoniano:
#w es el arreglo de eigenvalores
#v es el arreglo de eigenestados
#-----
w,v = LA.eigh(h) #esta funcion computa las matrices hermiticas

```