



***UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA***  
***FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS***  
***DEPARTAMENTO DE FÍSICA***

---

***Trabajo de Tesis Doctoral:***

***Factorización y criticalidad en sistemas de espines***

---

***Marco Vinicio Sebastián Cerezo de la Roca***

***Director: Prof. Dr. Raúl Rossignoli***

***Codirectora: Prof. Dra. Norma Canosa***

***2018***



# Resumen

El objetivo general de esta tesis es examinar el comportamiento crítico y las correlaciones cuánticas de sistemas cuánticos interactuantes -en particular de sistemas de espines- en función de un parámetro de control.

Típicamente, los autoestados exactos de estos sistemas son estados entrelazados -cuánticamente correlacionados- aun en presencia de campos magnéticos externos. No obstante, bajo ciertas condiciones de los valores y orientaciones del campo aplicado, estos sistemas pueden poseer un estado fundamental exacto completamente separable. Este notable fenómeno es conocido como “factorización”. En esta tesis se determinan y estudian las condiciones de existencia de campos factorizantes en sistemas finitos de espines con acoplamientos cuadráticos generales inmersos en campos no necesariamente uniformes o transversos. En particular, se demuestra que las ecuaciones derivadas permiten descubrir nuevos fenómenos críticos en sistemas con interacciones de tipo  $XYZ$  y  $XXZ$ , entre otros. Mediante un estudio riguroso del entrelazamiento en la vecindad de los puntos de factorización se muestra que estos se corresponden con verdaderos puntos críticos cuánticos en sistemas finitos. Finalmente, se discute cómo estos resultados posibilitan inducir fenómenos críticos y nuevas formas de frustración; así como permiten diseñar esquemas de ingeniería de estados separables, aptos para ser utilizados como estados iniciales en algoritmos cuánticos.

# Abstract

The main goal of this thesis is to study the critical behavior and quantum correlation properties of interacting quantum systems -in particular of spin systems- when a control parameter is varied.

The exact ground state (GS) of interacting spin systems in an external magnetic field is typically an entangled state, i.e., a state with quantum correlations. However, under certain conditions for an applied field these systems can possess a completely separable exact GS. This remarkable phenomenon is known as “factorization”. In this thesis, we derive and study the conditions for the existence of factorization in finite spin arrays with general quadratic couplings immersed in magnetic fields, not necessarily uniform or transverse. In particular, it is shown that these equations allow for the determination of novel critical phenomena in systems with  $XYZ$  and  $XXZ$ -type couplings, among others. By rigorously studying the entanglement in the vicinity of factorization points it is proven that they correspond to quantum critical points in finite systems. We then discuss how these results enable the possibility to induce critical phenomena and new types of frustration. The present results also open the way for separable ground-state engineering, which can be useful for quantum information applications.

*A Alejandra, Nala y Amelie, quienes con amor me acompañaron en este viaje.*



# Agradecimientos

El principal y más merecido agradecimiento se lo debo a mi director, el Dr. Raúl Rossignoli, y a mi codirectora, la Dra. Norma Canosa; quienes me recibieron en su grupo de trabajo con gran calidez desde que era un estudiante de la Licenciatura. Por toda la paciencia, la sabiduría, pero principalmente por su calidad humana y por su sensibilidad.

En segundo lugar, quiero agradecerle y dedicarle este trabajo a Alejandra, por compartir este recorrido como mi compañera y mejor amiga. Hiciste que este ciclo de mi vida estuviera lleno de amor y aprendizajes que estarán conmigo por siempre. También quiero agradecerle a Nala, quien me acompaña en el día a día; y a Amelie, por el amor absoluto que nos dio durante su corta estancia en este mundo.

Quiero expresar también mi más profundo agradecimiento hacia mis padres, mi hermano y mi hermana, cuyo apoyo incondicional me ha acompañado con cada decisión que he tomado. Por ser uno de los más grandes pilares de vida y por su ayuda sin limitaciones.

Finalmente, quiero agradecer a mis compañeros y amistades del grupo de trabajo, de la oficina, de Dungeons and Dragons, y a tantas más con quienes compartí durante estos años.





# Lista de publicaciones

Las ideas desarrolladas en la presente tesis tuvieron como fruto las publicaciones científicas [1–5] indicadas a continuación. A su vez, fui coautor de un trabajo sobre un tema afín [6], y escribí una publicación académica sobre la enseñanza de la física [7]. Estas dos últimas no están incluida en esta tesis.

[1] *Nontransverse factorizing fields and entanglement in finite spin systems.*

M. Cerezo, R. Rossignoli, y N. Canosa.

Phys. Rev. B **92**, 224422 (2015).

[2] *Factorization in spin systems under general fields and separable ground-state engineering.*

M. Cerezo, R. Rossignoli, y N. Canosa.

Phys. Rev. A **94**, 042335 (2016).

[3] *Factorization and Criticality in Finite XXZ Systems of Arbitrary Spin.*

M. Cerezo, R. Rossignoli, N. Canosa, y E. Ríos.

Phys. Rev. Lett. **119**, 220605 (2017).

[4] *Quantum Discord and Entropic Measures of Quantum Correlations: Optimization and Behavior in Finite XY Spin Chains.*

N. Canosa, M. Cerezo, N. Gigena, y R. Rossignoli.

Capítulo del libro *Lectures on General Quantum Correlations and Their Applications*, Eds. F. F. Fanchini, D. Soares Pinto, y G. Adesso, Springer International Publishing AG. (2017).

- [5] *Inducing critical phenomena in spin chains through sparse alternating fields.*  
M. Cerezo, R. Rossignoli, N. Canosa, y C. A. Lamas.  
arXiv:1809.00743 (enviado para su publicación).
- [6] *System-time entanglement in a discrete-time model.*  
A. Boette, R. Rossignoli, N. Gigena, y M. Cerezo.  
Phys. Rev. A **93**, 062127 (2016).
- [7] *Inclusión de la computadora cuántica IBM 5Q Quantum Experience como recurso didáctico para la realización de experimentos y simulaciones con alumnos de la Licenciatura en Física.*  
M. Cerezo.  
1ras Jornadas Sobre Enseñanza Y Aprendizaje En El Nivel Superior En Ciencias Exactas Y Naturales (2017).

# Índice general

<b>Introducción y motivación</b>	<b>5</b>
De la historia de la computación y la computadora . . . . .	5
Sobre la mecánica cuántica y el entrelazamiento . . . . .	6
Sobre la información y computación cuántica . . . . .	7
Del rol de los sistemas de espines . . . . .	10
Sobre la factorización y la motivación de esta tesis . . . . .	11
De la organización del texto . . . . .	12
<b>1. Conceptos Básicos</b>	<b>15</b>
1.1. Conceptos de Mecánica Cuántica . . . . .	16
1.1.1. Postulados de la Mecánica Cuántica . . . . .	16
1.1.2. Sobre qubits y qudits . . . . .	19
1.1.3. De las paradojas y qubits correlacionados . . . . .	22
1.2. Medidas de correlaciones cuánticas: El paradigma LOCC . . . . .	25
1.3. Entrelazamiento en estados puros bipartitos . . . . .	26
1.3.1. De la descomposición de Schmidt . . . . .	27
1.3.2. Sobre la entropía de entrelazamiento . . . . .	28
1.3.3. Del espectro de entrelazamiento . . . . .	28
1.4. Entrelazamiento en estados mezcla . . . . .	29
1.4.1. Criterio de Peres o de la traspuesta parcial . . . . .	29
1.4.2. De las medidas de entrelazamiento . . . . .	30
1.5. Más allá del entrelazamiento . . . . .	33
1.5.1. Sobre la discordia cuántica . . . . .	34

1.5.2. Sobre el déficit de información . . . . .	36
1.6. Sistemas de espines . . . . .	37
1.6.1. ¿Qué son los sistemas de espines? . . . . .	37
1.6.2. De espines 1/2 y qubits . . . . .	41
1.6.3. Sobre sistemas compuestos de $N$ espines . . . . .	41
1.7. Modelos de sistemas de espines . . . . .	42
1.7.1. De las clasificación de los modelos de Heisenberg . . . . .	43
1.7.2. De cadenas y redes . . . . .	44
1.8. Consideraciones básicas . . . . .	45
<b>2. Factorización</b>	<b>47</b>
2.1. Ecuaciones generales de factorización . . . . .	48
2.1.1. De las ecuaciones independientes del campo (EIC) . . . . .	50
2.1.2. De las ecuaciones dependientes del campo (EDC) . . . . .	51
2.2. Comentarios sobre estas ecuaciones . . . . .	53
2.3. Propiedades de las ecuaciones de factorización . . . . .	55
2.3.1. Del estado fundamental . . . . .	55
2.3.2. De la existencia de constantes de acoplamiento . . . . .	55
2.3.3. De la existencia de direcciones de alineación . . . . .	59
2.3.4. De la existencia de campos factorizantes uniformes . . . . .	61
2.3.5. Del entrelazamiento en la vecindad de la factorización . . . . .	63
<b>3. Campos factorizantes no transversos en sistemas <math>XYZ</math></b>	<b>65</b>
3.1. Cadenas con interacción $XYZ$ , repaso . . . . .	67
3.1.1. De la interacción antiferromagnética . . . . .	67
3.1.2. De la interacción ferromagnética . . . . .	69
3.1.3. ¿Estados fundamentales separables? . . . . .	70
3.2. Cadenas con interacción $XYZ$ , revisitadas . . . . .	71
3.2.1. Sobre la solución uniforme . . . . .	72
3.2.2. Del estado fundamental uniforme . . . . .	75
3.2.3. Sobre la solución tipo Néel . . . . .	77

<b>4. Entrelazamiento y factorización en sistemas <math>XYZ</math></b>	<b>81</b>
4.1. Entrelazamiento en la vecindad del estado fundamental uniforme . . .	82
4.1.1. Entrelazamiento en la vecindad del campo factorizante transverso	83
4.2. Entrelazamiento en la vecindad del estado fundamental de Néel . . .	84
4.3. Resultados de Concurrencia, entropía de bloque y magnetización . . .	86
4.3.1. Concurrencia de pares en cadenas $XY$ . . . . .	87
4.3.2. Entropía de bloque . . . . .	87
4.3.3. Espectro de entrelazamiento . . . . .	88
4.3.4. Magnetización . . . . .	89
4.3.5. Gap entre el GS y el primer estado excitado . . . . .	90
4.4. Discordia cuántica y déficit de información . . . . .	92
<b>5. Factorización y criticalidad en sistemas <math>XXZ</math> finitos</b>	<b>95</b>
5.1. Factorización en cadenas con interacción $XXZ$ . . . . .	96
5.1.1. Sobre el estado fundamental . . . . .	98
5.1.2. De la magnetización y degeneración del estado fundamental .	99
5.2. Construyendo las soluciones separables . . . . .	100
5.2.1. De pares de espines... . . . .	101
5.2.2. ... a cadenas de espines... . . . .	101
5.2.3. ... y arreglos de espines. . . . .	103
5.2.4. Sobre los estados reducidos de magnetización definida . . . . .	103
5.2.5. Del estado fundamental en el plateau $M = \pm(Ns - 1)$ para campos alternantes y del comienzo del entrelazamiento . . . . .	104
5.3. Resultados: magnetización y entrelazamiento . . . . .	107
5.3.1. De la magnetización . . . . .	107
5.3.2. Del entrelazamiento . . . . .	109
5.4. Resultados: otras configuraciones de espines . . . . .	110
<b>6. Ingeniería de estados separables</b>	<b>113</b>
6.1. Ejemplos de ingeniería de estados separables . . . . .	116
6.1.1. De la espirales de espín y otras soluciones separables . . . . .	116

6.1.2. Sobre el entrelazamiento de pares . . . . .	119
6.2. Recetas para preparar estados separables . . . . .	121
6.2.1. Constantes de acoplamiento regulables . . . . .	122
6.2.2. Constantes de acoplamiento fijas . . . . .	125
6.3. Implementación para quantum annealing . . . . .	126
<b>7. Induciendo fenómenos críticos a través de campos <math>n</math>-alternantes</b>	<b>129</b>
7.1. De las configuraciones de campo $n$ -alternantes . . . . .	131
7.2. Sobre el borde de la fase alineada . . . . .	132
7.2.1. De los casos $n = 1, 2, 3$ (A, NA y NNA) . . . . .	133
7.2.2. Sobre los campos críticos . . . . .	135
7.2.3. Del borde y el comienzo del entrelazamiento . . . . .	136
7.3. Plateaus de magnetización . . . . .	137
7.3.1. Diagramas de magnetización en sistemas finitos... . . . .	138
7.3.2. ... y en cadenas grandes . . . . .	139
7.3.3. De las magnetización de espines individuales . . . . .	140
7.4. Entrelazamiento de pares . . . . .	143
<b>Conclusiones y perspectivas</b>	<b>145</b>
<b>A. Realización experimental</b>	<b>149</b>
<b>B. Negatividad de pares en sistemas con interacción <math>XXZ</math></b>	<b>153</b>
<b>C. Fase completamente alineada en cadenas de espines en campos <math>n</math>-alternantes</b>	<b>159</b>
<b>D. Solución exacta de la cadena <math>XX</math> en campos <math>n</math>-alternantes</b>	<b>163</b>
<b>E. Contando configuraciones de espines y campos factorizantes</b>	<b>167</b>

# Introducción y motivación

*¡Si lleváis una pipa encima, sentaos y tomad un poco de mi tabaco! ¡No hay prisa, tenemos todo el día por delante! —entonces Bilbo se sentó en una silla junto a la puerta, cruzo las piernas, y lanzó un hermoso anillo de humo gris que navegó en el aire sin romperse, y se alejó flotando sobre La Colina. —¡Muy bonito! —dijo Gandalf— Pero esta mañana no tengo tiempo para anillos de humo. Busco a alguien con quien compartir una aventura que estoy planeando, y es difícil dar con él.*

- Extracto de “*El Hobbit*” por J. R. R. Tolkien.

## De la historia de la computación y la computadora

La historia de la computación y de la computadora moderna ha involucrado una serie de cambios de un tipo de realización física a otra; desde engranajes a relés a transistores a circuitos integrados... Hace apenas 80 años, los mensajes de radio cifrados debían ser decodificados usando lo que se consideró como el primer ordenador totalmente programable, electrónico y digital: *el Colossus*. Una máquina del tamaño de una habitación -y con un peso de aproximadamente una tonelada- que estaba compuesta por cientos de tubos de vacío para almacenar información y cuya entrada de datos era por medio de tarjetas perforadas. Desde ese entonces, las computadoras han evolucionado para ser más rápidas, más pequeñas y más poderosas (en cuanto a procesamiento de información se refiere); y esta evolución ha sido acompañada por nuevos descubrimientos, técnicas y modelos físicos e ingenieriles.

En 1965, Gordon E. Moore, cofundador de Intel, postuló una observación que llegaría a ser conocida como la ley de Moore [8]. Según su postulado, la velocidad

de los procesadores -o su poder computacional- debería de duplicarse cada 18 meses; y sorprendentemente su predicción resultó ser acertada durante varias décadas. Sin embargo -y como todas las cosas buenas- este crecimiento exponencial está llegando a sus límites. Al disminuir el tamaño de los procesadores a la escala microscópica, los electrones empiezan a revelar su *naturaleza cuántica*, y los principios de la física clásica dejan de ser válidos. Así, para resolver este problema se presenta la siguiente cuestión: ya sea se desarrollan nuevos chips semiconductores que permitan “esquivar” la naturaleza cuántica de los electrones; o se utilizan los principios de la mecánica cuántica para desarrollar nuevas formas de procesamiento de información.

### **Sobre la mecánica cuántica y el entrelazamiento**

Por su lado, la mecánica cuántica es sin duda una de las teorías físicas más importantes del siglo *XX*. Hasta finales del siglo *XIX*, la mecánica Newtoniana era utilizada para entender fenómenos físicos ligados al movimiento de la materia; y el electromagnetismo de Maxwell para describir aquellos que se relacionan con la radiación. Sin embargo, existían muchos fenómenos que no podían ser descritos sin que aparecieran resultados teóricos en completa contradicción con la experiencia.

De esta forma, la *mecánica cuántica* surge para resolver estos problemas y describir así una gran variedad de fenómenos microscópicos. Si bien no existe una fecha exacta, muchos autores sugieren que esta nueva teoría nace en el año 1900 cuando el físico teórico alemán Max Planck introdujo el concepto de cuanto de energía para explicar los resultados experimentales de la distribución espectral del cuerpo negro [9]. Sin embargo, no fue sino hasta el año 1928 que los físicos Bohr y Dirac establecieron las bases teóricas y conceptuales de la mecánica cuántica.

Esta revolucionaria teoría llevó a la comunidad científica a reformular y reevaluar conceptos basados en las teorías físicas conocidas hasta ese momento; introduciendo así una manera completamente nueva de describir los sistemas físicos. Por ejemplo, se demostró que una característica inherente a la mecánica cuántica es el hecho que en general, el estado de un sistema cuántico no puede caracterizarse a partir del estado de sus constituyentes debido a la presencia de correlaciones cuánticas entre ellos.



Los primeros en resaltar la importancia de este nuevo tipo de correlaciones fueron Einstein, Podolski y Rosen, quienes en 1935 consideraron por primera vez qué es lo que ocurriría si se midieran las propiedades físicas de un sistema cuántico compuesto formado por dos subsistemas que hubiesen interactuado previamente entre sí; pero que, en el momento del experimento, ya no pudiesen influir de ninguna manera uno sobre otro [10]. Así, lograron demostrar que existen ciertos casos en los que las mediciones efectuadas sobre uno de los subsistemas permitían predecir el resultado de las mediciones realizadas sobre el segundo. Sin entrar en los detalles físicos, epistemológicos y filosóficos que este resultado implica, una cosa era segura: Einstein, Podolski y Rosen habían abierto la puerta para estudiar las correlaciones cuánticas.

Una año después del trabajo de EPR, Erwin Schrödinger acuñó el término de “*entrelazamiento*” para estas correlaciones, y al referirse a ellas dijo que “*Yo no llamaría esto “un” sino “el” rasgo característico de la mecánica cuántica*” [11]. Desde aquel entonces, el entrelazamiento ha sido considerado como uno de los fenómenos más particulares y sorprendentes de la mecánica cuántica; y es tal que, al igual que el principio de incertidumbre de Heisenberg, no tiene análogo clásico. No obstante, es importante mencionar que a pesar de todos los avances que se han hecho para estudiar las correlaciones cuánticas, el problema de identificar y cuantificar correctamente este tipo de correlaciones es aún un problema abierto.

## **Sobre la información y computación cuántica**

En el presente contexto, una de las más importantes consecuencias de la mecánica cuántica y la existencia del entrelazamiento está relacionada con la cantidad de información necesaria para caracterizar el estado de un sistema. En un sistema clásico, el número de parámetros que se necesitan para caracterizar un estado (o lo que es lo mismo, sus grados de libertad) es igual a la suma de los grados de libertad de cada uno de sus componentes. Mientras que para un sistema cuántico, el número de parámetros necesarios para describirlo crece exponencialmente con el número de constituyentes. Evidentemente, este resultado implica que la tarea de simular un sistema cuántico es un problema extremadamente complicado, puesto que los recursos computacionales

necesarios para simularlo (aún para sistemas con pocos constituyentes) devienen rápidamente inalcanzables mediante técnicas computacionales basadas en computadoras clásicas. Sin embargo, en 1982 el físico galardonado con el premio nobel Richard Feynman conjeturó que estas limitaciones podrían ser superadas utilizando computadoras basadas en sistemas cuánticos [12].

A partir de esta conjetura, se empezó a estudiar la posibilidad de aplicar la mecánica cuántica a las teorías de computación e informática; utilizando así el potencial de la mecánica cuántica para desarrollar nuevos tipos de ordenadores capaces no solo de simular sistemas físicos cuánticos, sino también de generar nuevas formas de transmisión de información y de resolver otros problemas que hasta ese momento eran intratables. De esta forma nace un nuevo campo interdisciplinario de investigación denominado “*Información cuántica*”.

Así, en 1985 David Deutsch propuso el primer *algoritmo cuántico*, y demostró que este podría realizar una tarea con mayor eficiencia que cualquier algoritmo clásico; a su vez, Deutsch describió una de las primeras computadoras cuánticas universales [13]. Después de este, se han propuesto cientos de algoritmos cuánticos [14], siendo uno de los más importantes el algoritmo que Peter Shor propuso en 1994. Con este famoso algoritmo Shor demostró que la computadora cuántica tiene la capacidad de factorizar números grandes reduciendo exponencialmente el número de pasos requeridos (en comparación con todos los algoritmos clásicos conocidos) [15]; probando así una vez más el potencial de la computación basada en la mecánica cuántica.

Adicionalmente, se ha demostrado que la mecánica cuántica puede ser también utilizada para generar nuevas formas de transmisión de información. Por ejemplo, el protocolo de teleportación cuántica [16] permite transmitir información cuántica de un lugar a otro de tal forma que esta no viaje por el espacio que separa al emisor del receptor. Finalmente, cabe mencionar que existe también todo un campo de *criptografía cuántica* [17] que estudia formas completamente seguras de intercambiar información mediante canales cuánticos; y donde la seguridad del mensaje está protegida por las mismas leyes de la mecánica cuántica.

Hasta hace algunos años muchos de estos importantes descubrimientos eran cono-

cidos y discutidos ya sea en el ámbito de la física teórica y experimental (con algunos experimentos muy básicos); o en el ámbito de la ciencia ficción, donde los entusiastas de la ciencia prometían que la computación cuántica revolucionaría el mundo de un día para el otro<sup>1</sup>.

Sin embargo, en los últimos años han habido importantes avances en las tecnologías de punta de control cuántico que nos permiten dar pasos de gigante en pos del desarrollo e implementación de la computación cuántica. En particular, se pueden nombrar el procesador cuántico D-Wave 2000Q, desarrollado por la empresa canadiense D-Wave y que actualmente cuenta con 2000 qubits para realizar ciertas tareas de optimización, machine learning y sampling, entre otras. Si bien este último no permite realizar computación cuántica universal, hay varias empresas y grupos de investigación que están desarrollando ordenadores cuánticos completamente programables: INTEL cuenta con un procesador cuántico superconductor de 49 qubits, IBM desarrolló uno de 50 qubits, y Google anunció que para finales del presente año tendrán un ordenador con 72 qubits. Cabe mencionar también que gracias a una colaboración científica entre científicos chinos y austriacos, hoy en día ya funciona en el espacio el satélite “*Micius*” que produce fotones entrelazados para generación de claves y comunicación cifrada cuánticamente.

A estas alturas, es importante resaltar que entre las principales características de la mecánica cuántica que posibilitan estos avances sobresale el entrelazamiento cuántico. Éste último es un recurso fundamental para resolver problemas computacionales con eficiencias muy superiores a las que se habían demostrado insuperables en la física clásica. Es por estos motivos que el estudio del entrelazamiento ha despertado un gran interés en los campos de estudio de la computación e información cuántica, materia condensada y mecánica estadística; proporcionando también una nueva perspectiva para el análisis de correlaciones, entropías y transiciones de fase [18].

---

<sup>1</sup>¡Aunque debemos hacer un *mea culpa* y admitir que muchas veces nosotros mismos realizábamos tales promesas con el fin de conseguir financiamiento!

## Del rol de los sistemas de espines

En las últimas décadas las cadenas y arreglos de espines interactuantes han ganado un renovado interés con el auge de las teorías de la información y computación cuántica. En particular, estos sistemas ofrecen un escenario atractivo para la investigación del entrelazamiento y otras medidas de correlaciones cuánticas en sistemas de muchos cuerpos interactuantes [19–21]. A su vez, se ha demostrado que los sistemas de espines permiten realizar representaciones escalables de qubits en las que se pueden explorar e implementar esquemas de procesamiento cuántico de información [22–24]. Finalmente, es de vital importancia resaltar que gracias a los recientes avances en técnicas de control de sistemas cuánticos se ha hecho posible simular espines interactuantes en diversos sistemas físicos.

Históricamente, los sistemas de espines en interacción tuvieron un papel clave en la teoría microscópica de los ferromagnetos. Si bien el magnetismo ya era conocido por los chinos y los griegos desde el siglo IV a.C., no fue sino hasta 1926 -poco después que Schrödinger formulara la ecuación diferencial de la mecánica cuántica- que W. Heisenberg y P. Dirac desarrollaron en forma casi simultánea modelos para explicar la teoría cuántica del ferromagnetismo [25, 26]. En sus trabajos descubrieron que, en el marco de la mecánica cuántica, la superposición de funciones de onda orbitales de electrones en átomos vecinos da lugar a un acoplamiento efectivo entre sus espines. Esta interacción fue llamada *interacción de intercambio*, y aparece debido al efecto combinado de la repulsión Coulombiana y del principio de exclusión de Pauli.

Desde ese entonces el llamado *modelo de Heisenberg* ha sido utilizado en mecánica estadística, materia condensada y en física del estado sólido para entender fenómenos críticos en sistemas de tipo ferromagnéticos y antiferromagnéticos, fenómenos colectivos de espines y transiciones de fase [27–31]. En este contexto, vale la pena mencionar que los modelos de espines sólo tienen solución analítica en ciertos casos particulares [32, 33]: los sistemas de mayor dimensión con espines y campos arbitrarios no son exactamente solubles.

Finalmente, cabe remarcar que en los últimos años los sistemas de espines han ser-

vido como modelos paradigmáticos para estudiar e identificar puntos críticos cuánticos aún en sistemas finitos de pocos constituyentes. Si bien los fenómenos críticos han sido históricamente estudiados en sistemas más grandes o termodinámicos, recientemente su estudio en sistemas finitos se ha visto impulsado con los grandes avances en tecnologías de control cuántico que permiten la simulación de sistemas finitos de espines con interacciones y campos controlables. Como se verá a continuación, existen ciertos fenómenos críticos que emergen en sistemas finitos y que son de gran interés en teoría de información, computación cuántica y materia condensada.

### **Sobre la factorización y la motivación de esta tesis**

Es sabido que -típicamente- los autoestados exactos de los sistemas de espines interactuantes son estados entrelazados, aun en presencia de campos magnéticos externos. Sin embargo, se ha demostrado que bajo ciertas condiciones los mismos pueden poseer un estado fundamental no trivial exactamente separable (es decir, sin ningún tipo de correlaciones). Este notable fenómeno es conocido como “factorización” y fue descubierto por J. Kurmann, H. Thomas, y G. Müller en 1982 [34].

Si bien durante varias décadas este resultado recibió poca atención, a principios del 2000 hubo un renovado interés en la factorización, debido al reconocimiento de que constituye un punto crítico cuántico en relación al entrelazamiento: este se anula en dicho punto, aunque al mismo tiempo adquiere largo alcance en su inmediata vecindad. No obstante, siempre fue estudiado en los mismos sistemas físicos y en condiciones relativamente restringidas. Así pues, el objetivo general de esta tesis será determinar y estudiar las condiciones de existencia de campos factorizantes en sistemas de espines con acoplamientos cuadráticos generales inmersos en campos no necesariamente uniformes o transversos. En particular, se demostrará que las ecuaciones derivadas permiten descubrir nuevos fenómenos críticos, tanto en sistemas finitos como infinitos.

A su vez, se intentará dar un nuevo punto de vista al fenómeno de factorización intentando responder a la siguiente pregunta: *¿Es posible utilizar los estados factorizados en protocolos de información y computación cuántica?*

Esta pregunta está fundamentada en el hecho que la gran mayoría de protocolos de

procesamiento de información cuántica [35] y de simulación cuántica [36, 37] están basados en la posibilidad de inicializar el sistema en un estado completamente separable, es decir factorizado. Este requisito forma parte de los *Criterios de DiVincenzo para computación cuántica*, enunciados en el año 2000 por David P. DiVincenzo -un físico trabajando para IBM- quien enumeró cinco requisitos para que un ordenador pueda funcionar basándose en efectos cuánticos [38]:

- 1) Capacidad para operar con un número suficientemente grande de qubits bien caracterizados.
- 2) Posibilidad de inicializar el estado de cada qubit con probabilidades arbitrarias de  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ .
- 3) Tiempos de vida (decoherencia) de los qubits lo bastante largos.
- 4) Un conjunto “universal” de puertas lógicas cuánticas.
- 5) Posibilidad de medir el estado de cada qubit individualmente.

Así pues, la posibilidad de obtener estados completamente separables en sistemas de espines en presencia de interacciones no nulas mediante campos finitos, resulta de interés también en esta área, ya que estos podrían ser utilizados como estados iniciales en algoritmos cuánticos.

### **De la organización del texto**

Para mantener la claridad de la discusiones se decidió organizar la presente tesis en tres partes. La primer parte, formada por el Capítulo 1 está destinada a dar un marco general de trabajo, donde se darán las definiciones de muchos de los conceptos que se utilizarán en el resto de la tesis. En la primer parte de este capítulo se realiza un breve repaso sobre conceptos y definiciones de mecánica cuántica y de teoría de información cuántica. En particular, dado que en el presente trabajo se estudiará el entrelazamiento en los sistemas de espines, se realizará una discusión en torno a las distintas medidas que existen para cuantificar el entrelazamiento en estados puros y en

estados mezcla. Además, se introducirán medidas de correlaciones cuánticas -como la discordia- que permiten determinar correlaciones más allá del entrelazamiento. Luego, en la segunda parte del capítulo se indagará sobre la importancia del estudio de las cadenas y redes de espines, y se presenta su descripción matemática; dando así el formalismo básico de los modelos que se estudiarán en la presente tesis.

La segunda parte, compuesta por los Capítulos 2, 3, 4 y 5, está dedicada al estudio de la factorización en sistemas cuánticos de espines interactuantes. En el Capítulo 2 se presenta la derivación de las condiciones de existencia de campos factorizantes en sistemas de espines con acoplamientos cuadráticos generales inmersos en campos no necesariamente uniformes o transversos. A su vez, se realiza un estudio riguroso de las propiedades matemáticas generales de estas ecuaciones, así como de su interpretación física. Cabe remarcar que los resultados presentados en este capítulo serán el eje central de la tesis. A continuación, en el Capítulo 3 se realiza un estudio de la factorización en cadenas y redes de espines con interacción de tipo  $XYZ$  en campos no transversos; para así mostrar que nuestras ecuaciones generales conducen a novedosos resultados y propiedades críticas. Luego, en el Capítulo 4 se examina el entrelazamiento y otras cantidades en la inmediata vecindad de los campos factorizantes no transversos de los sistemas tratados en el capítulo anterior. Finalmente, esta parte concluye con el Capítulo 5, en el que se analiza el fenómeno de factorización y las propiedades del entrelazamiento en sistemas generales con interacción  $XXZ$  en campos transversos no uniformes. Este caso resulta de gran interés ya que permite derivar propiedades críticas del modelo que son válidas para sistemas de cualquier tamaño, valor del espín y dimensión; así como para una amplia gama de configuraciones de campos no uniformes.

Finalmente, la tercer parte está conformada por los Capítulos 6 y 7 y presenta resultados que expanden las nociones previas de factorización. En el capítulo sexto se propone utilizar la factorización como punto de partida para realizar esquemas de ingeniería de estados separables que puedan ser utilizados como estados iniciales para computación cuántica. Y en el último capítulo de esta tesis (Cap. 7) se estudia una cadena de espines con interacción  $XXZ$  en campos dispersos periódicos. Aquí, se

toman como punto de partida los resultados del Capítulo 5 para mostrar cómo es que el fenómeno de factorización nos llevó a estudiar la posibilidad de inducir fenómenos críticos y nuevas formas de frustración en sistemas de espines a través de la aplicación de campos no uniformes.

Las conclusiones y perspectivas se presentan al final de la tesis, mientras que los Apéndices A–E contienen derivaciones matemáticas y discusiones adicionales que se decidió no incluir en el texto principal para facilitar la lectura del mismo. En particular, en el Apéndice A se discute detalladamente la factibilidad de realizar experimentalmente los resultados teóricos aquí presentados; mientras que en el Apéndice E se detalla cómo fue que el estudio de la factorización nos llevó a citar un trabajo sobre Origami.



# Capítulo 1

## Conceptos Básicos

*“Una toalla es lo más útil que un viajero intergaláctico puede tener. Te sirve de cobija en momentos de frío, como cubrebocas cuando visitas planetas pestilentes, para confundir a la sorprendentemente estúpida bestia de Traal que piensa que si tú no la puedes ver, ella no te puede ver a ti y claro, para secarte después de un baño (si es que sigue limpia). ”*

- Extracto de “*Guía del autoestopista galáctico*” por D. Adams.

En este capítulo introductorio se realizará un breve recorrido de los conceptos básicos que serán utilizados a lo largo del presente trabajo. En la Sección 1.1 se repasará el formalismo y los postulados de la Mecánica Cuántica, mientras que en 1.2 se introducirá el paradigma LOCC y la definición de separabilidad y entrelazamiento. Luego, en 1.3 y 1.4 se presentarán las herramientas fundamentales para el estudio de correlaciones cuánticas en estados puros y en estados mezcla. Finalmente, en la Sección 1.5 se introducirán medidas de correlaciones cuánticas más allá del entrelazamiento.

Por otro lado, dado que el objetivo de esta tesis es estudiar el comportamiento crítico y las correlaciones cuánticas en sistemas de espines interactuantes, en lo que resta del presente capítulo se intentará responder a la pregunta:

*¿Qué son los sistemas de espines?*

Para esto, en la Sección 1.6 se introducirá el formalismo matemático que permite estudiar espines como objetos matemáticos. Luego, en la Sección 1.7 se presentan algunos

modelos de espines que serán estudiados a lo largo de la presente tesis. Finalmente, en 1.8 se realizará una breve discusión sobre algunas propiedades de los sistemas de espines interactuantes que será de vital importancia para los capítulos subsiguientes.

Cabe mencionar que este capítulo presenta nociones básicas para que la presente tesis sea accesible a una audiencia amplia, aún proveniente de otras disciplinas. Así pues, se recomienda al lector familiarizado con estos conceptos saltar este capítulo y continuar directamente al siguiente.

## 1.1. Conceptos de Mecánica Cuántica

Para empezar este repaso se enunciarán los postulados fundamentales de la mecánica cuántica, ya que estos definen los objetos básicos de su formulación matemática, a la vez que explican su interpretación física y su conexión con los resultados de un proceso de medida. Finalmente, se introducirá la noción de qubits y de qudits y su relevancia en el contexto de las teorías de información cuántica.

### 1.1.1. Postulados de la Mecánica Cuántica

**Postulado 1:** *La interpretación matemática de un sistema cuántico es un espacio de Hilbert separable  $\mathcal{H}$   $d$ -dimensional.*

Es decir,  $\mathcal{H}$  es un espacio vectorial real o complejo completo con un producto interno. Si bien el espacio de Hilbert puede tener dimensión infinita, en esta tesis se considerarán solamente espacios finitos. Siendo los sistemas con  $d = 2$  los denominados como *qubits*.

**Postulado 2:** *El estado de cualquier sistema físico se puede representar mediante un operador  $\rho$ , también llamado matriz densidad; que es no negativo, autoadjunto y de traza unidad:*

$$\rho \geq 0, \quad \rho = \rho^\dagger, \quad \text{Tr } \rho = 1. \quad (1.1)$$

En particular, cuando se conoce toda la información física que concierne a dicho estado, se dice que es un estado *puro* y se representa (siguiendo la notación de Dirac)

por un vector unitario  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  conocido como *ket*. En este caso, el operador de densidad  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  será un proyector sobre  $|\psi\rangle$  y se tendrá que  $\rho = \rho^2$ . Por otro lado, en el caso más general cuando los estados no corresponden a información máxima se llaman *mezclas*. Esta situación se da, por ejemplo, cuando el sistema cuántico está en un estado  $|\psi_k\rangle$  con probabilidad  $p_k$ ; en cuyo caso el operador densidad será una mezcla estadística de proyectores  $P_k = |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$

$$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \sum_k p_k P_k. \quad (1.2)$$

Para estados mezcla, se verifica fácilmente que  $\rho^2 \leq \rho$  y  $Tr \rho^2 \leq 1$ ; con la igualdad válida solo para el caso del estado puro ( $p_k = \delta_{kj}$  para un dado  $j$ ).

**Postulado 3:** *A toda cantidad física u observable  $A$ , que puede medirse, le corresponde un operador lineal hermítico  $\mathcal{A}$  que actúa sobre  $\mathcal{H}$ , es decir,  $\mathcal{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ .*

**Postulado 4:** *El valor medio del observable  $A$  en el conjunto de estados igualmente preparados representados por el operador  $\rho$  es:*

$$\langle \mathcal{A} \rangle \equiv Tr \rho \mathcal{A}. \quad (1.3)$$

Escribiendo la descomposición espectral

$$\mathcal{A} = \sum_i a_i |i\rangle\langle i| = \sum_i a_i P_i, \quad (1.4)$$

con  $a_i \in \mathbb{R}$  y  $P_i$  los autovalores y proyectores ortogonales sobre el espacio de autovectores de  $\mathcal{A}$ , respectivamente; con esto (1.3) resulta

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \sum_i a_i Tr \rho |i\rangle\langle i| = \sum_i a_i p_i, \quad (1.5)$$

donde  $p_i = Tr \rho |i\rangle\langle i| = \langle i|\rho|i\rangle$ . De la Ec. (1.5) se interpreta a  $p_i$  como la probabilidad de obtener el resultado  $a_i$  al hacer una medida del observable  $\mathcal{A}$ . O, equivalentemente, a la probabilidad de encontrar al sistema en el estado  $|i\rangle$ .

**Postulado 5:** *La evolución temporal del estado de un sistema cuántico cerrado*

está descrita por la ecuación de Schrödinger

$$i\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle. \quad (1.6)$$

Siendo  $H$  un operador hermítico generador de la evolución temporal conocido como *Hamiltoniano* del sistema (por simplicidad en este trabajo se tomará  $\hbar = 1$ ). Este postulado indica que existe un operador hermítico unitario  $U(t_0, t)$  tal que  $U(t_0, t) = e^{-iH(t-t_0)}$  y  $|\psi(t)\rangle = U(t_0, t)|\psi(t_0)\rangle$ . Así, para estados mezcla, la matriz densidad del sistema  $\rho$  al tiempo  $t_0$  se relaciona con la matriz densidad  $\rho'$  al tiempo  $t$  a través de la siguiente ecuación

$$\rho' = U(t_0, t)\rho U^\dagger(t_0, t). \quad (1.7)$$

Si bien el Postulado 5 explica la evolución temporal para sistemas aislados, los procesos de medida involucran la interacción del sistema considerado con un aparato externo, resultando así en la modificación del estado del sistema.

**Postulado 6:** *Las medidas cuánticas están descritas por un conjunto de operadores de medida  $\{M_m\}$ , sobre el espacio de Hilbert del sistema medido. El índice  $m$  indica los posibles resultados del experimento, con lo que la probabilidad de obtener un dado  $m$  al medir es*

$$p_m = \text{Tr}\rho M_m^\dagger M_m. \quad (1.8)$$

Ya que los operadores  $\{M_m\}$  son tales que  $\sum_m M_m^\dagger M_m = \mathbb{1}$  -con  $\mathbb{1}$  el operador identidad en  $\mathcal{H}$ - y dado que el espectro de  $\rho$  es una distribución de probabilidad, entonces el conjunto  $\{p_m\}$  es a su vez una distribución de probabilidad. Inmediatamente después de una medida cuyo resultado es  $m$ , el sistema colapsará al estado

$$\rho' = \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{p_m}. \quad (1.9)$$

En caso de que no haya post-selección, es decir, cuando se desconoce el resultado de

la medida, el estado resultante será

$$\rho' = \sum_m p_m \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{p_m} = \sum_m M_m \rho M_m^\dagger. \quad (1.10)$$

**Postulado 7:** *Dados dos sistemas cuánticos A y B con espacios de Hilbert  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$ , entonces el espacio de Hilbert asociado al sistema compuesto A+B es el producto tensorial  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ .*

A partir del operador densidad  $\rho_{AB}$  del sistema conjunto se pueden determinar los estados *reducidos* o *marginales* de cada subsistema tomando las *trazas parciales*

$$\rho_A = Tr_B \rho_{AB} = \sum_{\lambda_B} \langle \lambda_B | \rho_{AB} | \lambda_B \rangle, \quad (1.11)$$

$$\rho_B = Tr_A \rho_{AB} = \sum_{\lambda_A} \langle \lambda_A | \rho_{AB} | \lambda_A \rangle, \quad (1.12)$$

siendo  $\{|\lambda_A\rangle\}$  y  $\{|\lambda_B\rangle\}$  bases de  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$  respectivamente. Dados dos operadores locales  $X_A$  y  $X_B$  que actúan sobre los subsistemas, su producto tensorial  $X_A \otimes X_B$  será un operador sobre  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ . De esta forma, el valor medio de un observable local puede expresarse como  $\langle X_A \rangle = Tr \rho_{AB} X_A \otimes \mathbb{1}_B = Tr_A \rho_A X_A$ . Cabe mencionar que, en general, aún para estados puros  $\rho_{AB}$ , los estados reducidos serán estados mezclas.

Este postulado se extiende trivialmente para sistemas formados por  $N$  partes distinguibles con espacios de Hilbert  $\mathcal{H}_i$ ,  $i = 1 \dots N$ . De forma que el espacio del sistema compuesto es  $\mathcal{H} = \otimes_{i=1}^N \mathcal{H}_i$ , y una base  $\{|\lambda\rangle\}$  de  $\mathcal{H}$  puede generarse con el producto tensorial de las bases  $\{|\lambda_i\rangle\}$  de los subsistemas.

### 1.1.2. Sobre qubits y qudits

Como se mencionó previamente, en el presente trabajo se estudiarán sistemas cuánticos de dimensión finita. En este sentido, el primer caso no trivial surge para un espacio de Hilbert con  $d = 2$ . Si bien este paradigmático caso es conocido en los cursos introductorios de mecánica cuántica como el “sistema de dos niveles”, no fue sino hasta 1995 que el término *quantum bit* o *qubit* fue acuñado por el físico

Ben Schumacher en su trabajo sobre codificación cuántica [39]<sup>1</sup>. Este término no solo es eufónico sino que remarca la profunda conexión que existe entre la teoría de información clásica y la teoría de información cuántica.

El *bit* es un concepto matemático utilizado como la unidad fundamental de la información clásica que puede estar en uno de dos estados posibles, usualmente denominados como 0 y 1. Análogamente, el qubit es la unidad básica de la información cuántica y puede estar en cualquiera de los estados de la llamada *base computacional*  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ .

Dado que el estado  $|\psi\rangle$  del qubit es un elemento de  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ , el estado puro más general será una *superposición* de la forma

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (1.13)$$

con  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ . La condición de normalización de  $|\psi\rangle$  implica  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . La Ec. 1.13 se puede reescribir como

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} \left( \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \right), \quad (1.14)$$

donde  $\gamma, \theta$  y  $\phi$  son números reales, y en general la fase  $e^{i\gamma}$  suele omitirse pues no deriva en efectos físicos observables. Como se muestra en la Figura 1-1, los parámetros  $\theta$  y  $\phi$  definen un punto en esa esfera tridimensional de radio unidad. Esta esfera es conocida como la “Esfera de Bloch”, en honor al físico suizo galardonado con el premio Nobel Felix Bloch, quien desarrolló originalmente esta representación en 1946 para modelar fenómenos de resonancia magnética nuclear. Sin embargo, los primeros en utilizar la esfera de Bloch para graficar el estado de un sistema de dos niveles fueron R. P. Feynman y F. L. Vernon Jr. en 1957 [40].

Vale la pena mencionar que el estado (1.14) se puede obtener rotando  $|0\rangle$  alrededor

---

<sup>1</sup>Como dato anecdótico, en los agradecimientos del trabajo el autor expone: “The term “qubit” was coined in jest during one of the author’s many intriguing and valuable conversations with W. K. Wootters, and became the initial impetus for this work.”

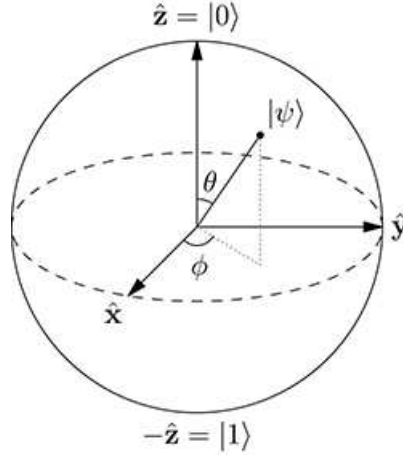


Figura 1-1: La esfera de Bloch permite representar gráficamente el estado de un qubit. Los estados puros se ubican sobre la superficie mientras que los estados mezcla se encuentran en el interior de la esfera. Imagen por [41].

del eje  $y$  en un ángulo  $\theta$ , seguido de una rotación en  $\phi$  alrededor del eje  $z$ . Es decir,

$$|\psi\rangle = R(\theta, \phi)|0\rangle, \quad R(\theta, \phi) = \exp[-i\phi\sigma^z/2] \exp[-i\theta\sigma^y/2], \quad (1.15)$$

siendo  $\sigma^\mu$  con  $\mu = z, y, x$  las matrices de Pauli. De esta forma, el estado resultante apunta en la dirección  $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta, \sin \phi, \cos \theta)$ .

En cuanto a estados mezcla de un qubit, la forma más general de  $\rho$  es

$$\rho = \frac{\mathbb{1} + \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2}, \quad (1.16)$$

siendo  $\mathbb{1}$  la identidad del espacio de Hilbert bidimensional,  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$  un vector con las matrices de Pauli, y  $\mathbf{r}$  un vector tridimensional de componentes reales tal que  $|\mathbf{r}| \leq 1$ . De la Ec. (1.16) se desprende que los estados con  $|\mathbf{r}| = 1$  corresponden a estados puros situados sobre la superficie de la esfera (que coinciden con  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  y  $|\psi\rangle$  dado por (1.14)), mientras que los estados con  $|\mathbf{r}| < 1$  a estados mezcla en el interior de la esfera. En particular, cuando  $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ , se obtiene el estado *máximamente mezclado*  $\rho = \mathbb{1}/2$  ubicado en el centro de la esfera. Así pues, resulta natural definir la *pureza* de un estado cuántico como

$$\gamma = \text{Tr } \rho^2, \quad (1.17)$$

que da información de cuan mezclado está el estado. En particular, dado  $\rho$  normalizado, la pureza satisface  $\frac{1}{d} \leq \gamma \leq 1$ , con  $d$  la dimensión del espacio de Hilbert. El límite superior se obtiene cuando  $\rho$  es un estado puro, mientras que el límite inferior se corresponde con el estado máximamente mezclado. Para un qubit en el estado (1.16),  $\gamma = (1 + |\mathbf{r}|^2)/2$ .

La generalización para *qudits*, o sistemas  $d$ -dimensionales (cuando  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^d$ ), es directa ya que se puede construir una base canónica computacional formada por el conjunto de estados  $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |d-1\rangle\}$ . Para  $d > 2$  no existe una representación gráfica equivalente a la esfera de Bloch.

Cabe mencionar que, al igual que su contraparte clásica, el qubit es un concepto matemático que no hace referencia a ningún sistema físico en particular. Sin embargo, no es difícil pensar en sistemas cuánticos de dos niveles que puedan realizar un qubit: la polarización de un fotón, el espín electrónico, un electrón atrapado en dos puntos cuánticos (quantum dot en inglés) o la corriente que circula por loops superconductores en junturas de Josephson, por nombrar algunos. De igual forma un qudit puede realizarse en un espín  $s$ , de modo que  $d = 2s + 1$ . Para una discusión más detallada sobre realizaciones físicas de qubits, ver el Apéndice A.

### 1.1.3. De las paradojas y qubits correlacionados

En el Postulado 7 presentado en la sección previa se introdujeron los objetos matemáticos necesarios para trabajar con sistemas compuestos. Así pues, como se verá en este trabajo, son precisamente los sistemas cuánticos interactuantes de los que derivan muchos de los fenómenos más interesantes de la Mecánica Cuántica.

Para el caso de un estado puro de dos qubits, la base computacional del espacio de Hilbert es  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ , es decir son estados producto  $|ij\rangle \equiv |i\rangle|j\rangle = |i\rangle \otimes |j\rangle$ , con  $i, j = 0, 1$ ; y el estado más general será

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |ij\rangle, \quad (1.18)$$

con  $\sum_{ij} |c_{ij}|^2 = 1$ . De esta forma, al realizar una medida sobre ambos qubits en la



base computacional, la probabilidad de obtener el resultado  $ij$  es  $|c_{ij}|^2$  y el sistema colapsará al estado  $|ij\rangle$ . Pero si se mide solo *uno* de los qubits, por ejemplo el segundo, según el Postulado 6 si el resultado de la medida es 0 el estado del sistema colapsará a

$$|\psi'\rangle = \frac{c_{00}|00\rangle + c_{10}|10\rangle}{\sqrt{|c_{00}|^2 + |c_{10}|^2}} = \frac{(c_{00}|0\rangle + c_{10}|1\rangle)}{\sqrt{|c_{00}|^2 + |c_{10}|^2}}|0\rangle. \quad (1.19)$$

Consideremos ahora los siguientes estados:

$$|\psi_1\rangle = \frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\psi_2\rangle = \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (1.20)$$

Aunque a priori podrían parecer como meras distintas combinaciones de los elementos de la base computacional, estos dos estados son *fundamentalmente* diferentes. Consideremos primero el caso en el que se mide uno de los qubits de  $|\psi_1\rangle$ . Además, supongamos que los dos qubits son enviados a dos laboratorios distintos (usualmente denominados Alice y Bob). Cuando Alice realiza una medida sobre el primer qubit, hay una probabilidad de  $1/2 - 1/2$  de que el resultado de esta sea 0 o 1; y es evidente que, *independientemente* de este resultado, cuando Bob mida el segundo qubit obtendrá siempre 0. Es decir, *una medida local sobre uno de los qubits no provee información sobre el resultado de una medida en el otro qubit*. Similarmente, cuando Bob mida el segundo qubit en  $|\psi_1\rangle$ , el resultado siempre será 0, mientras que para Alice el primer qubit seguirá teniendo un 50 % de probabilidad estar en 0 o en 1. Una vez más, no se gana información de un qubit al medir el otro.

Sin embargo, esta situación cambia completamente al considerar  $|\psi_2\rangle$ . Al igual que para  $|\psi_1\rangle$ , cuando Alice realiza una medida sobre el primer qubit tiene un  $1/2 - 1/2$  de probabilidad de resultar en 0 o 1. Ahora bien, si el resultado de la medida es 1(0), entonces la medida de Bob en el segundo qubit resultará en 0(1) (el mismo razonamiento aplica al medir primero el segundo qubit). Es decir, que en este caso *una medida local de Alice sobre uno de los qubits permite ganar información sobre el resultado de una medida que Bob haga en el otro qubit*. Dicho de otra forma, los resultados de las medidas están *correlacionados*; y este resultado es independiente de la distancia que separe sus laboratorios. Más aun, el mismo tipo de correlación se

obtiene midiendo en *otras bases locales no compatibles con la anterior*: Por ejemplo,  $|\psi_2\rangle$  puede también escribirse como  $|\psi_2\rangle = \frac{|++\rangle - |--\rangle}{\sqrt{2}}$ , con  $|\pm\rangle = \frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}}$  los autoestados de  $\sigma_x$ .

Este extraño fenómeno fue descubierto y reportado por primera vez en mayo de 1935 por Albert Einstein y sus dos becarios postdoctorales Boris Podolsky y Nathan Rosen (EPR) [10]; y fue Schrödinger quien un año después acuñó el término de *entrelazamiento* para estas correlaciones. El hecho de que las medidas de Alice parezcan tener un efecto *instantáneo* en el qubit de Bob perturbó profundamente a Einstein ya que la teoría de la relatividad impide que la información pueda viajar más rápido que la luz; y es por esto que se refirió al entrelazamiento como “*acción fantasmagórica a distancia*”. Así pues, EPR proponían que la mecánica cuántica era incompleta y que debía ser reemplazada por una teoría “local realista” que tuviera el mismo poder predictivo que la mecánica cuántica. En este contexto, “local” se refiere a que la información y la causalidad no puedan viajar más rápido que la luz; mientras que “realista” implica que los sistemas físicos deben tener propiedades definitivas y bien definidas (es decir que pueda ser una teoría de variables ocultas).

A estas alturas es importante resaltar en el experimento previamente mencionado -cuando Alice y Bob comparten el par de EPR  $|\psi_2\rangle$ - no se viola la localidad; es decir, no hay transferencia superlumínica de información entre ambas partes. Esto se debe a que desde el punto de vista de Bob, no es posible diferenciar si Alice realizó o no una medida. Para que Bob pueda inferir el estado de su qubit sin necesidad de medirlo es necesario que Alice se comunique con él (a través de un canal clásico por ejemplo).

A partir del trabajo de EPR se generó durante los siguientes meses un rico debate en el que Niels Bohr se oponía fervientemente a las conclusiones de Einstein; pues argumentaba que sería imposible concebir una teoría que completara el formalismo de la mecánica cuántica sin que esto destruyera su autoconsistencia [42]. Sin embargo, no fue sino hasta el año 1964 que el físico irlandés John S. Bell pondría fin a la llamada “paradoja de EPR”. En su trabajo [43], el autor realiza un sorprendente descubrimiento que demuestra que existen algunas predicciones de la mecánica cuántica que entran en conflicto con la visión local realista de Einstein. Estos resultados prueban

que la mecánica cuántica no puede ser descrita por teorías de variables ocultas y que que por ende la Mecánica Cuántica es irreduciblemente no-local.

Así pues, desde sus inicios el estudio de las correlaciones cuánticas nos ha llevado a un mejor entendimiento de mecánica cuántica. En las próximas secciones se presentarán distintas medidas para detectar y cuantificar las correlaciones cuánticas; y que permitirán distinguir estados no entrelazados (como  $|\psi_1\rangle$  o  $|\psi'\rangle$ ) de estados entrelazados ( $|\psi_2\rangle$ ).

## 1.2. Medidas de correlaciones cuánticas: El paradigma LOCC

Para entender por que el entrelazamiento es una correlación no clásica es necesario primero introducir y definir la noción de correlaciones clásicas. Retomemos el experimento discutido en la sección previa, en la que cada subsistemas de un sistema cuántico bipartito  $AB$  -con espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_{AB}$ - se encuentra en laboratorios distintos (y posiblemente distantes). A partir de las capacidades tecnológicas que actualmente poseemos, es muy natural introducir el paradigma de “*local operations and and classical communication*” (LOCC) [44]. En este último, se permite que tanto Alice como Bob puedan realizar operaciones locales y medidas sobre su parte del sistema (LO); y que tengan la posibilidad de comunicarse a través de un canal clásico (CC).

A partir de estas restricciones, es fácil de ver que mediante operaciones LOCC Alice y Bob pueden generar correlaciones clásicas entre sus subsistemas. Para esto supongamos que cada laboratorio cuenta con un dispositivo que permite generar  $k$  estados distintos  $\{\rho_i^A\}$  y  $\{\rho_i^B\}$ , con  $i = 1, \dots, k$ . Además, Alice y Bob cuentan con un dispositivo adicional que genera  $k$  números distintos al azar con alguna distribución de probabilidad  $\{p_k\}$ . Luego, cada vez que se realiza el experimento, se toma el número generado aleatoriamente y se prepara cada sistema en el estado producto  $\rho_k^A \otimes \rho_k^B$ . A

través de este protocolo el operador densidad del estado conjunto será

$$\rho_{AB} = \sum_k p_k \rho_k^A \otimes \rho_k^B. \quad (1.21)$$

Estos estados estarán en general correlacionados, ya que el valor medio de cualquier medida conjunta de observables locales  $\mathcal{O}_A$  y  $\mathcal{O}_B$  no se podrá escribir como el producto de los valores medios locales:  $\langle \mathcal{O}_A \otimes \mathcal{O}_B \rangle \neq \langle \mathcal{O}_A \rangle \langle \mathcal{O}_B \rangle$ . Pero no ha sido necesario una interacción cuántica para su generación. Es por esto que los estados de la forma (1.21) - que pueden ser generados mediante LOCC- se suelen denominar como *no entrelazados* o *separables* [45]. Esta definición puede extenderse para sistemas compuestos por  $N$  partes como  $\rho = \sum_k p_k \rho_k^1 \otimes \rho_k^2 \otimes \dots \otimes \rho_k^N$ .

Ahora bien, como se verá a continuación, existen estados que no son de la forma (1.21), y que por lo tanto no pueden ser preparados mediante LOCC. Esta es precisamente la definición de estado *entrelazado*.

Por completitud, se recuerda la siguiente clasificación de estados:

$$\text{Si } \rho = \rho^A \otimes \rho^B \text{ entonces es un estado no correlacionado (producto)} \quad (1.22)$$

$$\text{Si } \rho \neq \rho^A \otimes \rho^B \text{ entonces es un estado correlacionado} \quad (1.23)$$

y para distinguir si es entrelazado (aquí  $p_k \geq 0$ ,  $\sum_k p_k = 1$ )

$$\text{Si } \rho_{AB} = \sum_k p_k \rho_k^A \otimes \rho_k^B \text{ entonces es un estado separable} \quad (1.24)$$

$$\text{Si } \rho_{AB} \neq \sum_k p_k \rho_k^A \otimes \rho_k^B \text{ entonces es un estado entrelazado.} \quad (1.25)$$

### 1.3. Entrelazamiento en estados puros bipartitos

Sea un sistema compuesto por dos subsistemas  $A$  y  $B$  tal que  $\rho_{AB}^2 = \rho_{AB}$ , de forma que el operador densidad será un proyector sobre un vector  $|\psi_{AB}\rangle \in \mathcal{H}_{AB}$  ( $\rho_{AB} = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|$ ). Dadas las bases de cada subespacio  $\{|i\rangle_A, i = 1 \dots, \dim(\mathcal{H}_A)\}$  y  $\{|j\rangle_B, j = 1 \dots, \dim(\mathcal{H}_B)\}$ , siempre se puede expandir el estado del sistema en una

base producto

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{ij} C_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B, \quad (1.26)$$

con  $\sum_{ij} |C_{ij}|^2 = 1$ . Esta condición de normalización se puede reescribir como  $Tr C^\dagger C = 1$ , siendo  $C$  una matriz cuyas entradas complejas son  $C_{ij}$ .

En el presente contexto, de la Ec. (1.21) se puede ver que ahora  $|\psi_{AB}\rangle$  es *separable* si se puede escribir como producto tensorial de dos estados locales  $|\psi_A\rangle$  y  $|\psi_B\rangle$ ; y en caso contrario se dice que está *entrelazado*:

$$\text{Si } |\psi_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle |\psi_B\rangle \text{ entonces es un estado separable,} \quad (1.27)$$

$$\text{Si } |\psi_{AB}\rangle \neq |\psi_A\rangle |\psi_B\rangle \text{ entonces es un estado entrelazado.} \quad (1.28)$$

A continuación se presenta el primer resultado fundamental para sistemas puros bipartitos que permite determinar si un estado es separable o entrelazado.

### 1.3.1. De la descomposición de Schmidt

Cualquier estado puro bipartito  $|\psi_{AB}\rangle \in \mathcal{H}_{AB}$  puede ser escrito como

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i=1}^{n_s} \sqrt{\lambda_i} |\tilde{i}\rangle_A |\tilde{i}\rangle_B, \quad (1.29)$$

con  $\{|\tilde{i}\rangle_A, i = 1 \dots, \dim(\mathcal{H}_A)\}$  y  $\{|\tilde{i}\rangle_B, i = 1 \dots, \dim(\mathcal{H}_B)\}$  bases ortonormales de  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$  respectivamente, donde  $n_s$  es conocido como el *número de Schmidt* y con  $\sqrt{\lambda_i}$  los valores singulares de la matriz  $C$ , que satisfacen  $\lambda_i > 0$  y

$$\sum_i \lambda_i = 1. \quad (1.30)$$

A partir de esta descomposición se ve que si el número de Schmidt es igual a uno ( $n_s = 1$ ), entonces solo existe un coeficiente no nulo  $\lambda_1$  y el estado conjunto será simplemente un producto de estados puros de  $A$  y  $B$  (y por lo tanto será separable):  $|\psi_{AB}\rangle = |\tilde{i}\rangle_A |\tilde{i}\rangle_B$  ( $\rho_{AB} = |\tilde{i}\rangle\langle\tilde{i}|_A \otimes |\tilde{i}\rangle\langle\tilde{i}|_B$ ). Evidentemente, si  $n_s > 1$ , entonces el

estado no podrá ser escrito en la forma (1.21) y por lo tanto será entrelazado. Así pues, la descomposición de Schmidt permite determinar si un estado puro es separable o entrelazado, pero aún es necesario cuantificar el entrelazamiento que pueda existir en estos estados.

### 1.3.2. Sobre la entropía de entrelazamiento

Para sistemas puros bipartitos el entrelazamiento está generalmente cuantificado mediante la *entropía de entrelazamiento*, que se define como la entropía de von Neumann (en base 2) de la matriz densidad reducida de cualquier subsistema:

$$E(|\psi_{AB}\rangle) = S(\rho_A) = S(\rho_B) = - \sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i, \quad (1.31)$$

donde  $\lambda_i$  son los autovalores de  $\rho_A$  (o de  $\rho_B$ , ambos poseen el mismo espectro en un estado puro). Esta cantidad es además relevante en la teoría de información cuántica pues es igual al entrelazamiento que se puede destilar de cualquier estado puro [46]. En particular, de (1.29) se ve que los valores singulares  $\lambda_i$  se corresponden con los autovalores de  $\rho_{A(B)}$ ; de tal forma que un estado separable con  $n_s = 1$  tendrá  $E(|\psi_{AB}\rangle) = 0$ .

Con estos resultados, se puede ahora calcular el entrelazamiento de los estados  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  de la Ec. (1.20). La descomposición de Schmidt de  $|\psi_1\rangle = (\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}})|0\rangle$  muestra que  $n_s = 1$  y por lo tanto  $E(|\psi_1\rangle) = 0$ . Por el otro lado, para  $|\psi_2\rangle$  se ve que  $n_s = 2$ , con  $\lambda_1 = \lambda_2 = 1/2$  y  $\rho_A = \rho_B = \mathbb{1}/2$  -donde  $\mathbb{1}$  es la identidad de  $2 \times 2$ - y por lo tanto es un estado entrelazado con  $E(|\psi_2\rangle) = \log_2 2 = 1$ . De hecho,  $|\psi_2\rangle$  es conocido como uno de los *estados de Bell*, y está máximamente entrelazado.

### 1.3.3. Del espectro de entrelazamiento

Para terminar esta sección, cabe mencionar que el entrelazamiento en un sistema puro bipartito puede ser estudiado también a través del *espectro de entrelazamiento*, es decir, por los autovalores de la matriz densidad reducida  $\rho_A$  [47, 48]. La idea fundamental detrás de esta cantidad es que revela una información más completa que la

entropía de entrelazamiento.

En particular, resulta evidente que en un estado puro producto  $\rho_A$  tendrá un solo autovalor no nulo, e indicará que el estado  $|\psi_{AB}\rangle$  es no entrelazado. Por el otro lado, si  $\rho_A$  es máximamente mezclado entonces todos sus autovalores son iguales y  $|\psi_{AB}\rangle$  será máximamente entrelazado.

## 1.4. Entrelazamiento en estados mezcla

En la presente sección se presentarán varias medidas de entrelazamiento para estados mezcla. Cabe mencionar, que si bien es fácil calcular el entrelazamiento para estados bipartitos puros, el problema de identificar y cuantificar correctamente las correlaciones cuánticas en estados mezcla generales es aún un problema abierto.

A partir de la definición de separabilidad que se presentó en la sección previa se deriva que para determinar si un dado estado bipartito  $\rho_{AB}$  es separable, es necesario definir si este puede ser escrito como una combinación convexa de la forma (1.21). Resolver este problema es en general extremadamente difícil y sólo computable en ciertos estados o en sistemas de dimensiones reducidas; y de hecho, se ha demostrado que es un problema NP-HARD [49].

Sin embargo, se han desarrollado varias condiciones necesarias para la separabilidad de un estado; de tal forma que cuando un estado no las satisface, se puede asegurar que este está entrelazado. A continuación se presenta uno de los *criterios de separabilidad* más conocidos.

### 1.4.1. Criterio de Peres o de la traspuesta parcial

Si Alice y Bob comparten un estado puro bipartito

$$\rho_{AB} = \sum_{m,\mu,n,\nu} \rho_{m\mu,n\nu} |m\rangle\langle n| \otimes |\mu\rangle\langle\nu|, \quad (1.32)$$

sobre un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ , con  $\rho_{m\mu, n\nu} = \langle m\mu | \rho_{AB} | n\nu \rangle$ , se define la *traspuesta parcial* de  $\rho_{AB}$  con respecto a  $B$  como

$$\rho_{AB}^{t_B} \equiv \sum_{m, \mu, n, \nu} \rho_{m\mu, n\nu} |m\rangle \langle n| \otimes |\nu\rangle \langle \mu|, \quad (1.33)$$

tal que  $\rho_{m\nu, n\mu}^{t_B} \equiv \rho_{m\mu, n\nu}$ . Evidentemente, la forma del operador  $\rho_{AB}^{t_B}$  depende de la elección de bases locales  $\{|m\rangle\}$  y  $\{|\mu\rangle\}$ , pero sus autovalores serán independientes de la base elegida (y también del subsistema con respecto al que se realiza la trasposición parcial). A partir de esta definición, A. Peres derivó el siguiente criterio [50]:

*Si  $\rho_{AB}$  es separable, entonces  $\rho_{AB}^{t_B} \geq 0$ .*

En efecto, si  $\rho_{AB}$  es separable, se puede escribir como combinación convexa de la forma (1.21) y entonces su traspuesta parcial conduce al estado

$$\rho_{AB}^{t_B} = \sum_k p_k \rho_k^A \otimes (\rho_k^B)^t, \quad (1.34)$$

que es positivo si todos los  $p_k$  son positivos (y  $\rho_k^A, \rho_k^B$  operadores densidad). Dado que esta es una condición necesaria -pero no suficiente- entonces pueden existir estados entrelazados con traspuesta parcial positiva. El criterio es, no obstante, necesario y suficiente en el caso de estados puros y en estados mixtos generales qubit-qubit o qubit-qutrit [50, 51].

### 1.4.2. De las medidas de entrelazamiento

Como ya se mencionó, para los estados mezcla la tarea de cuantificar el entrelazamiento es más complicada; y de hecho, no existe una medida única. Sin embargo, se definen ciertas condiciones que una buena medida de entrelazamiento  $\varepsilon$  debe poseer:

- 1) Para sistemas cuánticos bipartitos descritos por  $\rho$ ,  $\varepsilon(\rho)$  es un mapeo de operadores densidad a números reales positivos.
- 2)  $\varepsilon(\rho) = 0$  si  $\rho$  es separable.



- 3) La cantidad de entrelazamiento presente en un estado  $\rho$  bipartito debe permanecer invariante ante cualquier transformación unitaria local  $U = U_A \otimes U_B$ ; es decir:  $\varepsilon(\rho) = \varepsilon(U_A \otimes U_B \rho U_A^\dagger \otimes U_B^\dagger)$ .
- 4) Para estados puros  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ , la medida de entrelazamiento debe reducirse a la entropía de entrelazamiento:  $\varepsilon(\rho) = S(\rho_A)$ .
- 5)  $\varepsilon(\rho)$  no debe incrementar bajo operaciones LOCC.

### Entrelazamiento de formación

De entre todas las medidas que se han propuesto, quizás una de las más utilizadas es el *entrelazamiento de formación*, que se define para un estado  $\rho$  como [52]

$$E_f(\rho) = \inf \left\{ \sum_i p_i E(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) : \rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right\}. \quad (1.35)$$

Para entender esta ecuación, es importante recordar que una matriz densidad  $\rho$  puede ser desarrollada en término de distintas combinaciones convexas de estados puros; es decir, que si  $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$  y los  $|\psi_i\rangle$  no son necesariamente ortogonales, el conjunto  $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$  no es único. Así pues el entrelazamiento de formación es el entrelazamiento promedio minimizado sobre todas las descomposiciones de  $\rho$  como combinación convexa de estados puros (denominado techo convexo de la entropía de entrelazamiento).

Ahora bien, dado que la Ec. (1.35) requiere una optimización sobre todas las posibles representaciones de  $\rho$ , entonces su evaluación es en general extremadamente difícil para estados arbitrarios. Sin embargo, W. K. Wootters demostró que para el caso particular de sistemas de dos qubits existe una fórmula cerrada [53, 54] para el entrelazamiento de formación.

### Concurrencia

Dado una matriz densidad  $\rho$  de un sistema de dos qubits, se obtiene que

$$E_f(\rho) = h \left( \frac{1 + \sqrt{1 - C^2(\rho)}}{2} \right), \quad (1.36)$$

donde  $h(p) = -p \log_2 p + (1-p) \log_2(1-p)$  es la entropía de una distribución binaria, y  $C(\rho)$  es la *Concurrencia* de  $\rho$ , definida como

$$C(|\psi\rangle) = |\langle\psi|\tilde{\psi}\rangle| = |\langle\psi|\sigma_y|\psi^*\rangle|, \quad (1.37)$$

$$= 2\lambda_{\max} - \text{Tr } M_{ij}, \quad (1.38)$$

con  $\lambda_{\max}$  el autovalor más grande de la matriz  $M_{ij} = [\rho_{ij}^{1/2} \tilde{\rho}_{ij} \rho_{ij}^{1/2}]^{1/2}$ , y donde  $\tilde{\rho}_{ij} = \sigma_y \otimes \sigma_y \rho_{ij}^* \sigma_y \otimes \sigma_y$  es el estado “spin-flipped” en las base estándar.

Cabe mencionar, que para estados de mayor dimensión no se conoce ninguna forma de generalizar inequívocamente la Concurrencia. Sin embargo, para estos casos aún es posible definir cuantificadores computables de entrelazamiento, como por ejemplo la Negatividad.

## Negatividad

Según el criterio de Peres (Sección 1.4.1), la positividad de la traspuesta parcial de la matriz densidad es una condición necesaria para la separabilidad. Así pues, se define la Negatividad como [55–57]

$$N = \frac{\text{Tr } |\rho^{\text{pt}}| - 1}{2}, \quad (1.39)$$

donde  $\rho^{\text{pt}}$  denota aquí la traspuesta parcial de  $\rho$  y  $|X|$  la norma  $|X| = \text{Tr } \sqrt{X^\dagger X}$ .

Así pues, la Negatividad intenta cuantificar que tan “negativo” es el espectro del operador traspuesto parcialmente. Si  $\lambda_i$  son los autovalores de  $\rho^{\text{pt}}$ , entonces  $N$  es el valor absoluto de la suma de los autovalores negativos:

$$N = \sum_i \frac{|\lambda_i| - \lambda_i}{2} = \sum_{\lambda_i < 0} |\lambda_i|. \quad (1.40)$$

## Monogamia del entrelazamiento

La monogamia del entrelazamiento es una de las propiedades más interesantes y fundamentales de estas correlaciones cuánticas. En su forma extremal puede ser expre-

sada de la siguiente manera: *Si dos qubits A y B están máximamente correlacionados cuánticamente, entonces no pueden estar correlacionados con un tercer qubit C.* En el caso general, siempre hay un intercambio entre la cantidad de entrelazamiento entre los qubits A y B, y entre el mismo qubit A con otro qubit C. Por ejemplo, para tres qubits esta relación puede ser matemáticamente expresada en la *desigualdad de monogamia de Coffman-Kundu-Wootters* [58, 59]:

$$C_{AB}^2 + C_{AC}^2 \leq C_{A(BC)}^2, \quad (1.41)$$

donde  $C_{AB}$  ( $C_{AC}$ ) es la Concurrencia entre los qubits A y B (A y C), mientras que  $C_{A(BC)}$  es la concurrencia entre los subsistemas A y BC.

## 1.5. Más allá del entrelazamiento

Como ya se ha mencionado, el estudio de las correlaciones cuánticas ha atraído considerable atención puesto que estas constituyen un ingrediente clave en el procesamiento de información cuántica [18]. A su vez, se ha demostrado que existen estados cuánticos *no entrelazados* que permiten realizar tareas como *quantum state preparation* [60] y *quantum state merging* [61]. Es por esto que en los últimos años se ha desarrollado el concepto de *cuanticidad de las correlaciones* [4, 62], donde se busca cuantificar el total de las correlaciones y separarlas entre aquellas que sean clásicas de las que son puramente cuánticas.

En las secciones pasadas se definió el estado separable como aquel que puede ser escrito como combinación convexa de estados producto, es decir,

$$\rho_{AB} = \sum_k p_k \rho_k^A \otimes \rho_k^B. \quad (1.42)$$

En este contexto, conviene definir un subconjunto de estados separables que llamare-

mos *estados clásicamente correlacionados*, y que se definen de la siguiente manera:

$$\rho_{AB} = \sum_{ij} p_{ij} P_i^A \otimes P_j^B, \quad (1.43)$$

donde  $P_i^A$  y  $P_j^B$  son proyectores ortogonales sobre  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$  ( $P_i^A P_{i'}^A = \delta_{ii'} P_i^A$ ,  $P_j^B P_{j'}^B = \delta_{jj'} P_j^B$ ). Por ejemplo, un estado de esta forma es  $\frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|)$ .

La diferencia fundamental entre (1.42) y (1.43) reside en el hecho que un estado separable general (1.42) no es necesariamente diagonal en una base producto de bases ortogonales, es decir, una base de la forma  $\{|ij\rangle = |i_A\rangle|j_B\rangle\}$ , con  $\{|i_A\rangle\}$ ,  $\{|j_B\rangle\}$  bases ortogonales de  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$ , como lo es (1.43). Por ejemplo, el estado  $\rho_{AB} = \frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |++\rangle\langle ++|)$ , donde  $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ , es separable, pero no de la forma (1.43). Debido a la mezcla en  $B$  de estados no ortogonales  $|0\rangle$  y  $|+\rangle$  este estado tiene “más *cuanticidad*” que los estados de la forma (1.43).

A continuación se presentan dos medidas de correlaciones que buscan cuantificar esta cuanticidad: la discordia cuántica y el déficit de información o déficit cuántico.

### 1.5.1. Sobre la discordia cuántica

El “quantum discord”, o discordia cuántica, fue introducido en [63, 64] para sistemas bipartitos  $\rho_{AB}$  como la mínima diferencia entre dos versiones cuánticas distintas de la información mutua, o equivalentemente, de la entropía condicional:

$$D(A|B) = \underset{M_B}{\text{Min}} [I(A, B) - I(A, B_{M_B})] \quad (1.44)$$

$$= \underset{M_B}{\text{Min}} S(A|B_{M_B}) - S(A|B). \quad (1.45)$$

La minimización se toma sobre todos las medidas POVM locales  $M_B$  en  $B$  [18], que pueden ser caracterizadas mediante un conjunto de operadores  $M_j = \mathbb{1}_A \otimes M_{jB}$  que satisfacen  $\sum_j M_j = \mathbb{1}_A \otimes \mathbb{1}_B$ . Aquí,  $I(A, B) = S(\rho_A) - S(A|B)$  representa la información mutua estándar [65] antes de la medida, mientras que  $I(A, B_{M_B}) = S(\rho_A) - S(A|B_{M_B})$  es una información mutua que depende de la medida local. Además, se han utilizado

las entropías condicionales

$$S(A|B) = S(\rho_{AB}) - S(\rho_B) \quad (1.46)$$

$$S(A|B_{M_B}) = \sum_j p_j S(\rho_{A/j}) \quad (1.47)$$

con

$$\rho_{A/j} = p_j^{-1} \text{Tr}_B \rho_{AB} M_j^\dagger M_j \quad (1.48)$$

el estado reducido de  $A$  luego de obtener el resultado  $j$  en  $B$  y  $p_j = \text{Tr} \rho_{AB} M_j^\dagger M_j$  la probabilidad de dicho resultado. La Ec. (1.46) es la entropía condicional cuántica usual, que puede ser negativa en estados entrelazados (por ejemplo, en todo estado puro entrelazado), mientras que la Ec. (1.47) es una entropía condicional dependiente de la medida, que es siempre positiva. En el caso de medidas proyectivas locales completas estándar  $M_j = P_j = \mathbb{1}_A \otimes P_{jB}$ , con  $P_{jB} \equiv |j_B\rangle\langle j_B|$  proyectores ortogonales unidimensionales ( $P_{jB}P_{kB} = \delta_{jk}P_{jB}$ ), entonces

$$S(A|B_{M_B}) = S(\rho'_{AB}) - S(\rho'_B) \quad (1.49)$$

con  $\rho'_{AB}$  el estado conjunto tras la medida local (sin post-selección)

$$\rho'_{AB} = \sum_j P_j \rho_{AB} P_j = \sum_j p_j \rho_{A/j} \otimes P_{jB} \quad (1.50)$$

y donde  $\rho'_B = \text{Tr}_A \rho'_{AB} = \sum_j p_j P_{jB}$  es el estado resultante en  $B$ .

Como es bien sabido, la información mutua  $I(A, B)$  es una medida de *todas* las correlaciones entre los subsistemas  $A$  y  $B$ ; es no negativa y se anula solamente para estados producto  $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$  [65]. Así pues, las Ecs. (1.42)–(1.43) pueden ser interpretadas como la diferencia entre todas las correlaciones presentes en el estado original y las correlaciones clásicas que quedan tras la medida local en  $B$ ; dando así como resultado las correlaciones puramente cuánticas. Puede demostrarse que para estados puros,  $D(A|B)$  se reduce a la entropía de entrelazamiento (1.31), siendo en este caso igual a  $D(B|A)$ . Por otro lado, en estados no puros  $D(A|B)$  puede ser no nulo

en estados separables, anulándose solo para los estados clásicamente correlacionados (1.43) o estados clásicamente correlacionados respecto de  $B$  (de la forma (1.50)).

Cabe mencionar que si bien en general el mínimo de (1.43) se obtiene para medidas proyectivas de rango uno  $M_{jB} \propto P_{jB}$  (no necesariamente ortogonales) [66, 67], el problema de calcular la discordia es en general muy complicado, siendo de hecho un problema NP completo [68].

### Entropías generalizadas y entropía cuadrática

Debido a la dificultad inherente en el problema de optimización de la discordia, muchas veces resulta conveniente considerar formas entrópicas más simples que permitan evaluar más fácilmente el mínimo de la entropía condicional [66, 67]:

$$S_f(A|B_{M_B}) = \sum_j p_j S_f(\rho_A/j) \quad (1.51)$$

donde  $S_f(\rho) = \text{Tr } f(\rho)$  es una forma entrópica generalizada tipo traza [65, 69]. Aquí  $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$  es una función suave estrictamente cóncava que cumple  $f(0) = f(1) = 0$ , tal que  $S_f(\rho) \geq 0$ , con  $S_f(\rho) = 0$  cuando el estado es puro.

En particular, podemos considerar formas entrópicas simples como la entropía cuadrática

$$S_2(\rho) = 2[1 - \text{Tr } \rho^2] \quad (1.52)$$

que surge de  $f_2(\rho) = 2\rho(\mathbb{1} - \rho)$ , y que también es conocida como la entropía lineal. Esta entropía es un caso particular de las entropías de Tsallis [70, 71]  $S_q(\rho) = \frac{1 - \text{Tr } \rho^q}{1 - 2^{1-q}}$ , que surgen para  $f_q(\rho) \propto \rho - \rho^q$ ,  $q > 0$ , y de donde se obtiene la entropía de Von Neuman si  $q \rightarrow 1$ .

### 1.5.2. Sobre el déficit de información

El déficit de información generalizado se define como [4, 72, 73]

$$I_f^B(\rho_{AB}) = \text{Min}_{M_B} S_f(\rho'_{AB}) - S_f(\rho_{AB}), \quad (1.53)$$

donde  $\rho'_{AB}$  es el estado del sistema tras una medida en  $B$  sin post-selección (Ec. (1.50)) y la minimización se toma sobre todas las medidas proyectivas completas en  $B$ . Esencialmente, los elementos no diagonales de  $\rho_{AB}$  en la base producto condicional  $\{|i_A^j\rangle|j_B\rangle\}$  (en la cual  $\rho'_{AB}$  es diagonal) se pierden durante la medida, y por lo tanto la Ec. (1.53) es una medida de la mínima cantidad de información que se pierde en un proceso de medida local.

Al igual que la discordia, la medida (1.53) se reduce a una entropía de entrelazamiento en el caso de estados puros [72], mientras que para estados no puros se anula solamente para los estados clásicamente correlacionados (1.43) o clásicamente correlacionados respecto de  $B$ , (1.50) [72, 73]. Una ventaja sobre la discordia es que las propiedades anteriores son válidas para toda forma entrópica  $S_f(\rho)$  [72]. Esto permite el uso de entropías más simples, tales como la entropía cuadrática (1.52), para la cual el proceso de minimización en (1.53) resulta más simple y puede incluso efectuarse en forma analítica en ciertos sistemas [73].

## 1.6. Sistemas de espines

En la segunda parte de este capítulo se realizará una breve discusión sobre sistemas de espines, su descripción matemática y su relevancia en el contexto de esta tesis.

### 1.6.1. ¿Qué son los sistemas de espines?

Si bien históricamente se definió el espín como una propiedad física de las partículas subatómicas, en el contexto de este trabajo se considerarán a los espines como objetos matemáticos. Así pues, estos permitirán definir modelos que describen los Hamiltonianos efectivos que surgen al estudiar diversos sistemas físicos. En este sentido, un *sistema de espines* se entiende como *un modelo matemático en el que cada grado de libertad está dado por una variable de espín*, es decir, que hay tres observables fundamentales  $\{S^x, S^y, S^z\}$  que representan las componentes del vector de espín  $\mathbf{S}$  y que transforman acorde a una representación unitaria de  $SU(2)$ . Esto quiere decir que cada espín  $s$  está representado por un operador sobre un espacio de Hilbert de

dimensión finita  $d = 2s + 1$  y cuya base es numerada mediante el número cuántico  $m = -s, \dots, s$ .

Si bien esta definición parece ser demasiado abstracta, en realidad permite independizarse de cualquier sistema físico en particular, ya que las variables de espín pueden provenir de: el espín de una sola partícula (como podría ser un electrón), el espín combinado de varios electrones acoplados (se habla de espín total), el resultado del acoplamiento del espín y de algún momento orbital, o de alguna variable efectiva que surge de la interacción del sistema en estudio (ver el Apéndice A para una discusión detallada de la simulación experimental de sistemas de espines). En cualquiera de los casos, si el Hamiltoniano del sistema tiene la misma *forma*, éste se comporta de la misma *manera* sin importar cual sea el origen de los espines en cuestión.

Así pues, los operadores de espín se representan en términos de sus componentes cartesianas hermíticas

$$\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z), \quad \mathbf{S}^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2, \quad (1.54)$$

que satisfacen el álgebra de Lie y la relación de conmutación

$$[S^\mu, S^\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\gamma}S^\gamma, \quad [\mathbf{S}^2, S^\mu] = 0, \quad (1.55)$$

con  $\mu, \nu, \gamma = x, y, z$  y  $\epsilon_{\mu\nu\gamma}$  el tensor de Levi-Civita.

Al igual que para el momento angular ordinario, dado que  $[\mathbf{S}^2, S^\mu] = 0$ , siempre se puede determinar una base de autoestados comunes al operadores  $\mathbf{S}^2$  y alguno de los operadores  $S^\mu$  (comúnmente se suele tomar  $S^z$ ). Los elementos de esta base pueden ser etiquetados de la forma  $|s, m\rangle$ , y se verifica que

$$\mathbf{S}^2|s, m\rangle = s(s + 1)|s, m\rangle, \quad S^z|s, m\rangle = m|s, m\rangle. \quad (1.56)$$

donde  $m = -s, \dots, s$ .



Al mismo tiempo, conviene definir los *operadores escalera*

$$S^+ = S^x + iS^y, \quad S^- = S^x - iS^y, \quad (1.57)$$

$$S^x = \frac{S^+ + S^-}{2}, \quad S^y = \frac{S^+ - S^-}{2i}, \quad (1.58)$$

que satisfacen las relaciones de conmutación

$$[S^z, S^+] = S^+, \quad [S^z, S^-] = -S^-, \quad [S^+, S^-] = 2S^z. \quad (1.59)$$

Éstos últimos actúan sobre los estados de la base según las siguientes reglas

$$S^+|s, m\rangle = \sqrt{s(s+1) - m(m+1)}|s, m+1\rangle, \quad (1.60)$$

$$S^-|s, m\rangle = \sqrt{s(s+1) - m(m-1)}|s, m-1\rangle. \quad (1.61)$$

Resulta a veces conveniente trabajar en la base  $\mathbf{S}^L = (S^+, S^-, S^z)$ , que se obtiene mediante la matriz de cambio de base

$$\mathbf{S} = U_L \cdot \mathbf{S}^L, \quad U_L = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ -i/2 & i/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.62)$$

Finalmente, vale la pena mencionar que cualquier estado de máximo espín se puede obtener a partir de una rotación sobre el estado  $|\uparrow\rangle \equiv |s, s\rangle$  al combinar una rotación alrededor del eje  $y$  seguida de una rotación al rededor del eje  $z$ . Por lo tanto, un estado rotado general que apunta en la dirección

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta). \quad (1.63)$$

se puede escribir como

$$|\Theta\rangle = R(\theta, \phi)|\uparrow\rangle = e^{-i\phi S^z} e^{-i\theta S^y} |\uparrow\rangle, \quad (1.64)$$

y los elementos de matriz de los operadores de espín cumplirán

$$\langle \Theta | S^\mu | \Theta \rangle = \langle \uparrow | [R^{-1}(\theta, \phi) S^\mu R(\theta, \phi)] | \uparrow \rangle. \quad (1.65)$$

Esta última ecuación implica que frente a la rotación, los elementos de matriz pueden también obtenerse utilizando los estados originales no rotados y los operadores rotados

$$S^\mu \rightarrow S^{\mu'} = R^{-1}(\theta, \phi) S^\mu R(\theta, \phi). \quad (1.66)$$

Utilizando la propiedad  $e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \dots$ , se obtienen los operadores rotados en función de los operadores originales

$$S^x \rightarrow S^{x'} = S^x \cos \theta \cos \phi - S^y \sin \phi + S^z \sin \theta \cos \phi, \quad (1.67)$$

$$S^y \rightarrow S^{y'} = S^x \cos \theta \sin \phi + S^y \cos \phi + S^z \sin \theta \sin \phi, \quad (1.68)$$

$$S^z \rightarrow S^{z'} = -S^x \sin \theta + S^z \cos \theta. \quad (1.69)$$

Estas ecuaciones se pueden reescribir en forma matricial

$$\mathbf{S}' = U_R(\theta, \phi) \cdot \mathbf{S}, \quad U_R(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi & -\sin \phi & \sin \theta \cos \phi \\ \cos \theta \sin \phi & \cos \phi & \sin \theta \sin \phi \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (1.70)$$

Así pues,  $U_R(\theta, \phi)$  es una matriz de rotación en el espacio tridimensional que tiene como columnas a los vectores ortogonales  $(\mathbf{n}'_x, \mathbf{n}'_y, \mathbf{n}'_z)$  definidos como

$$\mathbf{n}'_x = (\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, -\sin \theta), \quad (1.71)$$

$$\mathbf{n}'_y = (-\sin \phi, \cos \phi, 0), \quad (1.72)$$

$$\mathbf{n}'_z = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \equiv \mathbf{n}. \quad (1.73)$$

### 1.6.2. De espines 1/2 y qubits

En el caso particular de  $s = 1/2$  el espacio de Hilbert asociado al sistema no es más que  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ , lo que implica que el espín puede ser considerado como un qubit. Por convención, se suelen tomar como elementos de la base computacional los autoestados de  $S^z$ , es decir, aquellos que tienen espín bien definido en la dirección  $z$ :  $\{|0\rangle \equiv |\uparrow\rangle, |1\rangle \equiv |\downarrow\rangle\}$ . Los operadores de espín se escriben ahora en término de las matrices de Pauli  $S^\mu = \sigma^\mu/2$ :

$$S^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.74)$$

### 1.6.3. Sobre sistemas compuestos de $N$ espines

Sea un sistema compuesto de  $N$  espines  $s_i$  -no necesariamente iguales- con  $i = 1 \dots N$  un índice que indica el sitio del sistema. Como se mencionó previamente, cada espín tiene asociado un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_i$  de dimensión  $2s_i + 1$ ; de forma que el espacio de Hilbert del sistema estará dado por el producto tensorial  $\mathcal{H} = \otimes_{i=1}^N \mathcal{H}_i$  y tendrá dimensión  $\prod_{i=1}^N (2s_i + 1)$ . Los elementos de la base de  $\mathcal{H}$  son

$$|\psi\rangle = |s_1, m_1; s_2, m_2; \dots; s_N, m_N\rangle. \quad (1.75)$$

En el caso en que todos los espines sean idénticos  $s_i = s$ , la dimensión de  $\mathcal{H}$  será  $(2s + 1)^N$ , y por simplicidad los estados (1.75) se denotarán simplemente  $|m_1, m_2, \dots, m_N\rangle$ .

Los operadores individuales de espín  $S_i^\mu$  pueden ser generalizados trivialmente a operadores sobre  $\mathcal{H}$  como

$$S_i^\mu = (\otimes_{j<i} \mathbb{1}_j) \otimes S_i^\mu \otimes (\otimes_{j>i} \mathbb{1}_j). \quad (1.76)$$

Vale destacar que será de gran utilidad definir los operadores de *espín total*

$$S_T^\mu = \sum_{i=1}^N S_i^\mu, \quad (1.77)$$

con  $\mu = x, y, z$ .

## 1.7. Modelos de sistemas de espines

En esta tesis se estudiarán sistemas de espines con acoplamientos cuadráticos generales inmersos en campos no necesariamente uniformes o transversos; que están descritos por un Hamiltoniano de la forma

$$H = - \sum_i \mathbf{h}^i \cdot \mathbf{S}_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{S}_j \quad (1.78)$$

$$= - \sum_{i,\mu} h_\mu^i S_i^\mu - \frac{1}{2} \sum_{i,j,\mu,\nu} J_{\mu\nu}^{ij} S_i^\mu S_j^\nu, \quad (1.79)$$

donde  $i, j$  son índices que indican el sitio en el sistema;  $S_i^\mu$ ,  $\mu = x, y, z$  los operadores de espín (1.54) en el sitio  $i$ ;  $J_{\mu\nu}^{ij} = J_{\nu\mu}^{ji}$  las constantes de acoplamiento de la interacción de intercambio entre los sitios  $i$  y  $j$ . Con esta notación,  $J_{\mu\nu}^{ij}$  son los elementos de la matriz  $\mathcal{J}^{ij}$ .

El Hamiltoniano (1.79) se puede dividir en dos partes. La primer contribución, llamada de Zeeman, aparece debido a la presencia de un campo magnético externo. Si el campo aplicado es *uniforme*, entonces  $\mathbf{h}^i = \mathbf{h} \forall i$ ; en caso contrario, se dirá que el campo es *no uniforme*. Además, cuando el campo magnético externo es paralelo a algunos de los ejes principales (usualmente al eje  $z$ ) se dice que el campo es *transverso* o *longitudinal*; y cuando el mismo tiene alguna otra componente no nula se dice que es *no transverso*.

El segundo término de (1.79) es el llamado término de *interacción de intercambio*; y dado que involucra operadores sobre dos sitios se denomina también interacción cuadrática. En este, las constantes reales  $J_{\mu\nu}^{ij}$  tienen unidades de energía y dan idea de cuan “fuerte” es el acoplamiento entre los espines. Si se define la diferencia

$$l = |j - i|, \quad (1.80)$$

entonces se dirá que la interacción es de *primeros vecinos* cuando  $J_{\mu\nu}^{ij} = 0 \forall l > 1$ ; de

segundos vecinos si  $J_{\mu\nu}^{ji} = 0 \forall l > 2$ , etc.

Para concluir, vale la pena mencionar que muchas veces se suelen estudiar sistemas de espines con interacción *homogénea*; es decir que las constantes de acoplamiento son las mismas para cualquier par equidistante  $J_{\mu\nu}^{ij} = J_{\mu\nu}^{kl}$  si  $|j - i| = |l - k|$ . Cuando esta condición no se cumple, se suele decir que la interacción es *inhomogénea*.

### 1.7.1. De las clasificación de los modelos de Heisenberg

El Hamiltoniano de la Ec. (1.78) incluye una gran variedad de casos interesantes que se clasifican según las interacciones presentes en el sistema. A continuación se presentan algunos de los modelos más conocidos:

Interacción de Ising	$\mathcal{J}^{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J_z^{ij} \end{pmatrix}$
Interacción XY	$\mathcal{J}^{ij} = \begin{pmatrix} J_x^{ij} & 0 & 0 \\ 0 & J_y^{ij} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
Interacción XX	$\mathcal{J}^{ij} = \begin{pmatrix} J^{ij} & 0 & 0 \\ 0 & J^{ij} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
Interacción XYZ	$\mathcal{J}^{ij} = \begin{pmatrix} J_x^{ij} & 0 & 0 \\ 0 & J_y^{ij} & 0 \\ 0 & 0 & J_z^{ij} \end{pmatrix}$
Interacción XXZ	$\mathcal{J}^{ij} = \begin{pmatrix} J^{ij} & 0 & 0 \\ 0 & J^{ij} & 0 \\ 0 & 0 & J_z^{ij} \end{pmatrix}$
Interacción DM (Dzyaloshinskii-Moriya)	$\mathcal{J}^{ij} = \begin{pmatrix} 0 & D_z^{ij} & -D_y^{ij} \\ -D_z^{ij} & 0 & D_x^{ij} \\ D_y^{ij} & -D_x^{ij} & 0 \end{pmatrix}$

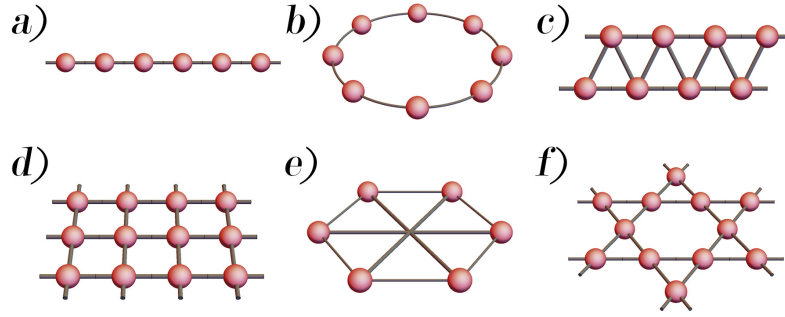


Figura 1-2: Representación esquemática de las siguientes geometrías de sistemas de espines: a) cadena abierta; b) cadena cerrada; c) cadena zigzag; d) red cuadrada; e) red panal de abeja (*honeycomb*); f) red de Kagomé.

Cuando la matriz de interacción es diagonal se suele denominar al modelo como un *modelo de Heisenberg*. Por otro lado, cabe mencionar que la interacción asimétrica no diagonal de Dzyaloshinskii-Moriya surge debido al acoplamiento espín-órbita entre dos espines  $\mathbf{S}_i$  y  $\mathbf{S}_j$  [74, 75].

### 1.7.2. De cadenas y redes

El formalismo que se ha introducido hasta ahora es completamente general y no supone ninguna condición sobre la forma en la que los espines están *espacialmente* ordenados y distribuidos; es decir, sobre la geometría del arreglo de espines. De hecho, la Ec. (1.79) describe tanto sistemas unidimensionales, como sistemas de dimensión mayor.

Cuando los sistemas de espines son  $1D$  se denominan *cadena*s, y pueden tener condiciones de contorno abiertas o periódicas. En el caso que la cadena sea cíclica y tenga condiciones de contorno periódicas, el índice del sitio  $i = 1, \dots, N$  es tal que  $N + 1 \equiv 1$ ; y por lo tanto  $S_{N+1}^\mu \equiv S_1^\mu$ .

Para arreglos de espines en dimensiones superiores existen configuraciones periódicas que han sido de particular interés a lo largo de los años. Algunos de los sistemas en  $2D$  más estudiados por sus propiedades críticas son [76, 77]: la red cuadrada, red triangular, la red panal de abeja (*honeycomb*) y red de Kagomé; entre otras. En la Figura 1-2 se muestran las representación esquemática de estos arreglos de espines.

## 1.8. Consideraciones básicas

Los estados de sistemas de espines interactuantes -así como de cualquier sistema cuántico de muchos cuerpos- están en definitiva caracterizados por las correlaciones entre observables. Por ejemplo, algunas de las preguntas básicas que surgen al estudiar un dado sistema de espines es: ¿qué sucede con el entrelazamiento entre dos espines o grupos de espines a medida que aumenta la distancia entre ellos? ¿Presenta algún comportamiento crítico cuando un parámetro externo es variado? El poder responder correctamente a preguntas como estas es fundamental para entender la distribución de entrelazamiento en sistemas interactuantes.

Consideremos un modelo de Heisenberg en ausencia de campos magnéticos externos. El estado fundamental (GS) del Hamiltoniano

$$H = - \sum_{i,\mu} h_{\mu}^i S_i^{\mu} - \frac{1}{2} \sum_{i,j,\mu,\nu} J_{\mu\nu}^{ij} S_i^{\mu} S_j^{\nu}, \quad (1.81)$$

será usualmente un estado entrelazado, donde el rango del entrelazamiento será típicamente del orden del rango de la interacción<sup>2</sup>. Es decir, si el sistema tiene interacción de primeros vecinos  $l = 1$ , entonces los espines en sitios adyacentes estarán típicamente entrelazados y para  $l > 1$  el entrelazamiento será pequeño o directamente nulo.

De modo idéntico, aún cuando el sistema sea inmerso en un campo magnético externo *finito* el GS seguirá siendo un estado entrelazado. De hecho, si quisiéramos que el GS sea un estado *separable*, entonces tendríamos que “apagar” las interacciones o aplicar campos magnéticos muy intensos ( $h_{\mu}^i \gg J_{\mu\nu}^{ij}$ ):

$$H = - \sum_{i,\mu} h_{\mu}^i S_i^{\mu} - \frac{1}{2} \sum_{i,j,\mu,\nu} J_{\mu\nu}^{ij} S_i^{\mu} S_j^{\nu}. \quad (1.82)$$

De esta forma,  $H$  sería trivial y los espines se alinearían con los campos aplicados.

El lector podrá preguntarse por qué es que en el contexto de la información y computación cuántica habríamos de interesarnos en estados separables sin entrela-

<sup>2</sup>Siempre y cuando el sistema no esté en un régimen crítico como una transición de fase.

zamiento. Primero, por que la emergencia de autoestados exactos completamente separables y no triviales (por ejemplo, que violen alguna simetría fundamental del Hamiltoniano) podría estar asociada a puntos críticos cuánticos en sistemas finitos. Segundo, por que como ya se ha mencionado en la introducción de esta tesis, resulta que uno de los requisitos fundamentales para poder realizar tareas de computo cuántico es *la habilidad de inicializar el sistema en un estado separable bien definido*. Cabe entonces realizar la siguiente pregunta:

*¿Es posibles obtener estados separables en presencia de interacciones y campos finitos?*

Sorprendentemente, la respuesta a esta pregunta es que *sí es posible* gracias a un fenómeno crítico conocido como *factorización* que se estudiará en detalle en los próximos capítulos.



# Capítulo 2

## Factorización

*Alicia: Esto es imposible.*

*Sombrero loco: Sólo si tú crees que lo es.*

- Extracto de “*Alicia en el País de las Maravillas*” por L. Carroll.

Como se ha mencionado previamente, los autoestados de los sistemas de espines interactuantes son por lo general estados entrelazados debido a las fluctuaciones cuánticas que los desordenan y correlacionan, especialmente si el sistema es de baja dimensión. Así pues, cuando el estado fundamental (GS) es un estado producto completamente separable usualmente se debe a que el sistema presenta una fase completamente ordenada y el estado es trivial  $|\uparrow\uparrow\uparrow\dots\rangle$ .

Sin embargo, se ha demostrado que, bajo ciertas condiciones de la magnitud y orientación de los campos magnéticos aplicados, los sistemas de espines poseen un estado fundamental *no trivial y completamente separable* con los espines alineados en direcciones específicas (¡que difieren de la dirección de los campos aplicados!). Este sorprendente fenómeno es conocido como *factorización*, y puede ocurrir para *campos finitos aún en presencia de interacciones fuertes entre los espines*.

Los primeros en descubrir el fenómeno de factorización fueron J. Kurmann, H. Thomas, y G. Müller en 1982 [34]. En su trabajo seminal demostraron que las cadenas de espines  $1/2$  con interacción  $XYZ$  antiferromagnética de primeros vecinos en un campo magnético externo presentan un estado fundamental de tipo Néel (con los

espines alineados en direcciones alternantes) cuando el vector de campo  $\mathbf{h}$  apunta a la superficie de un elipsoide determinado por las constantes de acoplamiento. A partir de ese momento, la factorización fue estudiada en otros modelos con *campo transverso* [20, 78–96], donde se pudo demostrar que la existencia de estos puntos de separabilidad está asociada a *puntos críticos cuánticos en sistemas finitos en los que ocurren transiciones de entrelazamiento* sin análogo clásico; tales que en su vecindad el entrelazamiento de pares alcanza rango completo. Además, se logró determinar que en los puntos de factorización *las soluciones de campo medio devienen exactas*; y que por lo tanto constituyen soluciones no triviales.

Si bien el fenómeno de factorización recibió considerable atención en la última década y media, el mismo siempre fue estudiado en los sistemas de espines en condiciones relativamente restringidas (por ejemplo, con campos transversos y/o uniformes, interacción homogénea, etc). Así pues, en la Sección 2.1 se determinarán las condiciones *generales* para la existencia de puntos y líneas de factorización en sistemas de espines con acoplamientos cuadráticos generales inmersos en campos no necesariamente uniformes o transversos. Luego, en las Secciones 2.2 y 2.3 se realiza un estudio riguroso de las propiedades matemáticas generales de estas ecuaciones, así como de su interpretación física. Los resultados presentados a continuación fueron publicados en [1] y en [2], y constituyen el eje conductor de esta tesis.

## 2.1. Ecuaciones generales de factorización

Sea un sistema de  $N$  espines  $s_i$ , no necesariamente iguales, descrito por un modelo de Heisenberg con interacciones de rango arbitrario en presencia de campos magnéticos no transversos y no uniformes. El Hamiltoniano del sistema es

$$H = - \sum_i \mathbf{h}^i \cdot \mathbf{S}_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{S}_j \quad (2.1)$$

$$= - \sum_{i,\mu} h_\mu^i S_i^\mu - \frac{1}{2} \sum_{i,j,\mu,\nu} J_{\mu\nu}^{ij} S_i^\mu S_j^\nu, \quad (2.2)$$

y se busca determinar las condiciones bajo las cuales el sistema posee como autoestado exacto al *estado completamente separable*

$$|\Theta\rangle = \otimes_{i=1}^N R_i(\theta_i, \phi_i) |\uparrow_i\rangle = |\nearrow\rightarrow\swarrow\searrow\rangle, \quad (2.3)$$

donde  $|\uparrow_i\rangle = |s_i\rangle$  es el autoestado local de máximo espín ( $S_i^z |\uparrow_i\rangle = s_i |\uparrow_i\rangle$ ) y  $R_i(\theta_i, \phi_i) = e^{-i\phi_i S_i^z} e^{-i\theta_i S_i^y}$  es el operador de rotación (1.64). Así pues, (2.3) es un estado sin correlaciones en el que cada espín apunta en alguna dirección  $\mathbf{n}_i = (\sin \theta_i \cos \phi_i, \sin \theta_i \sin \phi_i, \cos \theta_i)$  (que puede ser arbitraria y distinta en cada sitio).

Ahora bien, en vez de resolver bajo qué condiciones el estado rotado (2.3) es autoestado de  $H$  -es decir,  $H|\Theta\rangle = E_\Theta|\Theta\rangle$ -, es conveniente rotar el Hamiltoniano y estudiar bajo qué condiciones este tiene como autoestado al estado producto  $\otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle$ :

$$H \otimes_{i=1}^N R_i(\theta_i, \phi_i) |\uparrow_i\rangle = E_\Theta \otimes_{i=1}^N R_i(\theta_i, \phi_i) |\uparrow_i\rangle, \quad (2.4)$$

$$[\otimes_{i=1}^N R_i^{-1}(\theta_i, \phi_i) H \otimes_{i=1}^N R_i(\theta_i, \phi_i)] \otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle = E_\Theta \otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle. \quad (2.5)$$

Donde el Hamiltoniano rotado  $H_\Theta \equiv \otimes_{i=1}^N R_i^{-1}(\theta_i, \phi_i) H \otimes_{i=1}^N R_i(\theta_i, \phi_i)$  se puede expresar en término de los operadores rotados  $S_i^{\mu'}$  definidos en (1.66)

$$H_\Theta = - \sum_{i,\mu} h_\mu^i S_i^{\mu'} - \frac{1}{2} \sum_{i,j,\mu,\nu} J_{\mu\nu}^{ij} S_i^{\mu'} S_j^{\nu'}. \quad (2.6)$$

Luego, por medio de las Ecs. (1.67)–(1.70), este Hamiltoniano se puede expresar en función de los operadores originales. Reemplazando  $S_i^{\mu'} = U_R(\theta_i, \phi_i)_\nu^\mu S_i^\nu$ , se obtiene

$$\begin{aligned} H_\Theta &= - \sum_{i,\mu,\alpha} U_R(\theta_i, \phi_i)_\alpha^\mu h_\mu^i S_i^\alpha - \frac{1}{2} \sum_{i,j,\mu,\nu,\alpha,\beta} (U_R^T(\theta_i, \phi_i))_\alpha^\mu J_{\mu\nu}^{ij} U_R(\theta_j, \phi_j)_\beta^\nu S_i^\alpha S_j^\beta, \\ &= - \sum_i \tilde{\mathbf{h}}^i \cdot \mathbf{S}_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \tilde{\mathcal{J}}^{ij} \mathbf{S}_j, \end{aligned} \quad (2.7)$$

siendo  $\alpha, \beta = x, y, z, y$

$$\tilde{\mathbf{h}}^i = \mathbf{h}^i U_R(\theta_i, \phi_i), \quad \tilde{\mathcal{J}}^{ij} = U_R^T(\theta_i, \phi_i) \mathcal{J}^{ij} U_R(\theta_j, \phi_j), \quad (2.8)$$

los vectores de campo y matriz de interacción rotados. Explícitamente, los elementos de  $\tilde{\mathcal{J}}^{ij}$  son  $J_{\mu'\nu'}^{ij} = \mathbf{n}_i^{\mu'} \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j^{\nu'}$  con  $\mathbf{n}_i^{\mu'}$  los vectores columna (1.73) de la matriz  $U_R(\theta_j, \phi_j)$ . Es decir,  $\mathbf{n}_x' = (\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, -\sin \theta)$ ,  $\mathbf{n}_y' = (-\sin \phi, \cos \phi, 0)$  y  $\mathbf{n}_z' = \mathbf{n}$ .

Finalmente, resulta conveniente trabajar en la base  $\mathbf{S}_i^L = (S_i^+, S_i^-, S_i^z)$ . Mediante el cambio de base (1.62) se obtiene el Hamiltoniano rotado

$$H_\Theta = - \sum_i \tilde{\mathbf{h}}^i U_L \cdot \mathbf{S}_i^L - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathbf{S}_i^L \cdot (U_L)^T \tilde{\mathcal{J}}^{ij} U_L \mathbf{S}_j^L. \quad (2.9)$$

Así pues, como ya se mencionó, las ecuaciones generales de factorización -bajo las cuales  $|\Theta\rangle$  es un autoestado de  $H$ - se derivan exigiendo que  $\otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle$  sea un autoestado de  $H_\Theta$ . Evidentemente, en general esta última condición no se cumple, ya que todos los términos de una y dos excitaciones en  $H_\Theta$  (es decir, términos de la forma  $S_i^-, S_i^- S_j^z, S_i^z S_j^-$  y  $S_i^- S_j^-$ ) no tienen a  $\otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle$  como autoestado. Como se verá a continuación, este problema se resuelve justamente al pedir que los coeficientes que acompañan a los términos problemáticos sean exactamente cero. Esto deriva en dos conjuntos de ecuaciones conocidas como *ecuaciones independientes del campo* y *ecuaciones dependientes del campo* [1].

### 2.1.1. De las ecuaciones independientes del campo (EIC)

Consideremos por ahora los términos en  $H_\Theta$  que contienen excitaciones de dos cuerpos. Dado que están actuando sobre el estado máximamente alineado  $\otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle$ , se obtiene trivialmente que  $S_i^+ S_j^+ \otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle = S_i^{+(-)} S_j^{-(+)} \otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle = 0$ ; con lo que el único término que no se anula trivialmente es  $S_i^- S_j^-$ . De la Ec. (2.9) se obtiene entonces que las contribuciones de excitaciones de dos cuerpos son

$$- \frac{1}{4} \sum_{i,j} (J_{x'x'}^{ij} - J_{y'y'}^{ij} + i(J_{x'y'}^{ij} + J_{y'x'}^{ij})) S_i^- S_j^-. \quad (2.10)$$

Por lo tanto,  $|\Theta\rangle$  será un autoestado de  $H$  si y solo si para cada par interactuante  $i, j$  se anula la excitación de dos cuerpos (2.10). Es decir, cuando

$$J_{x'x'}^{ij} = J_{y'y'}^{ij}, \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{n}_i^{x'} \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j^{x'} = \mathbf{n}_i^{y'} \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j^{y'}, \quad (2.11)$$

$$J_{x'y'}^{ij} = -J_{y'x'}^{ij}, \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{n}_i^{x'} \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j^{y'} = \mathbf{n}_i^{y'} \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j^{x'}. \quad (2.12)$$

A estas ecuaciones las denominamos como *Ecuaciones independientes del campo* (EIC) y como su nombre lo indica, *no dependen del campo ni tampoco de los espines*  $s_i, s_j$ .

Por ejemplo, para un modelo XYZ de Heisenberg  $J_{\mu\nu}^{ij} = \delta_{\mu\nu} J_{\mu}^{ij}$ , las EIC son

$$J_y^{ij} (\cos \phi_i \cos \phi_j - \cos \theta_i \sin \phi_i \cos \theta_j \sin \phi_j) = J_x^{ij} (\cos \theta_i \cos \phi_i \cos \theta_j \cos \phi_j - \sin \phi_i \sin \phi_j) + J_z^{ij} \sin \theta_i \sin \theta_j, \quad (2.13)$$

$$J_y^{ij} (\cos \theta_i \sin \phi_i \cos \phi_j + \cos \phi_i \cos \theta_j \sin \phi_j) = J_x^{ij} (\cos \theta_i \cos \phi_i \sin \phi_j + \sin \phi_i \cos \theta_j \cos \phi_j).$$

### 2.1.2. De las ecuaciones dependientes del campo (EDC)

Las excitaciones de un cuerpo en  $H_{\Theta}$  tienen contribuciones  $S_i^-$  provenientes del término de Zeeman y contribuciones  $S_i^- S_j^z$  ( $S_i^z S_j^-$ ) de la interacción. Dado que  $\otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle$  es un autoestado de  $S_i^z$ , es fácil ver que  $S_i^{-(z)} S_j^{z(-)} \otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle = S_{(j)}^- s_{j(i)} \otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle$ . Así pues, los términos con excitaciones de un cuerpo son

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \sum_i \left( \tilde{h}_x^i + i\tilde{h}_y^i \right) S_i^- - \frac{1}{2} \sum_{i,j} s_j \left( J_{x'z'}^{ij} + iJ_{y'z'}^{ij} \right) S_i^- \\ & = \frac{1}{2} \sum_i \left( \tilde{h}_x^i + \sum_j s_j J_{x'z'}^{ij} + i\left( \tilde{h}_y^i + \sum_j s_j J_{y'z'}^{ij} \right) \right) S_i^-, \end{aligned} \quad (2.14)$$

y se anulan cuando

$$\tilde{h}_x^i + \sum_j s_j J_{x'z'}^{ij} = 0, \quad (2.15)$$

$$\tilde{h}_y^i + \sum_j s_j J_{y'z'}^{ij} = 0. \quad (2.16)$$

Estas ecuaciones definen los campos que se deben aplicar en *cada sitio*  $i$ . A su vez, estas últimas se pueden simplificar escribiendo  $\tilde{h}_{\mu}^i = \mathbf{n}_i^{\mu'} \cdot \mathbf{h}^i$ ,  $J_{\mu'z'}^{ij} = \mathbf{n}_i^{\mu'} \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j$  y

definiendo el valor medio  $\langle \mathbf{S}_j \rangle = s_j \mathbf{n}_j$ .

Con esto,  $|\Theta\rangle$  será un autoestado de  $H$  si y solo si se anulan las excitaciones de un cuerpo. Es decir, cuando

$$\mathbf{n}_i^{\mu'} \cdot \left( \mathbf{h}_s^i + \sum_j \mathcal{J}^{ij} \langle \mathbf{S}_j \rangle \right), \quad \mu' = x', y'. \quad (2.17)$$

A estas ecuaciones las denominaremos como *Ecuaciones dependientes del campo* (EDC) y definen los llamados *campos factorizantes*  $\mathbf{h}_s^i$  (CF) que se deben aplicar en cada sitio  $i$ .

Dado que  $(\mathbf{n}_i^{x'}, \mathbf{n}_i^{y'}, \mathbf{n}_i)$  forma una base ortonormal, (2.17) implica que el CF  $\mathbf{h}^i$  tiene que cancelar las componentes de  $\sum_j \mathcal{J}^{ij} \langle \mathbf{S}_j \rangle$  ortogonales a la dirección de alineación. Así pues,

$$\mathbf{h}_s^i + \sum_j \mathcal{J}^{ij} \langle \mathbf{S}_j \rangle \propto \mathbf{n}_i,$$

y la solución más general será de la forma

$$\mathbf{h}_s^i = \mathbf{h}_{\parallel}^i + \mathbf{h}_{\perp}^i, \quad \mathbf{h}_{\parallel}^i = h_{\parallel} \mathbf{n}^i \quad (2.18)$$

siendo  $\mathbf{h}_{\parallel}^i$  un campo de magnitud arbitraria paralelo a la dirección de alineación y

$$\begin{aligned} \mathbf{h}_{\perp}^i &= \mathbf{n}^i \times \left( \mathbf{n}^i \times \left( \sum_j \mathcal{J}^{ij} \langle \mathbf{S}_j \rangle \right) \right), \\ &= \sum_j \mathbf{h}_{\perp}^{ij}, \quad \mathbf{h}_{\perp}^{ij} = -[\mathcal{J}^{ij} \langle \mathbf{S}_j \rangle - \mathbf{n}^i (\mathbf{n}^i \cdot \mathcal{J}^{ij} \langle \mathbf{S}_j \rangle)], \end{aligned} \quad (2.19)$$

un campo *ortogonal* a la dirección de alineación ( $\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{h}_{\perp}^i = 0$ ) que de hecho representa el CF de menor magnitud.

Para un modelo de Heisenberg XYZ, las Ecs. (2.17) quedan

$$\begin{aligned} h_z^i \sin \theta_i - \cos \theta_i (h_x^i \cos \phi_i + h_y^i \sin \phi_i) &= \sum_{j \neq i} s_j [\cos \theta_i \sin \theta_j (J_x^{ij} \cos \phi_i \cos \phi_j + J_y^{ij} \sin \phi_i \sin \phi_j) \\ &\quad - J_z^{ij} \sin \theta_i \cos \theta_j], \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$h_x^i \sin \phi_i - h_y^i \cos \phi_i = \sum_{j \neq i} s_j \sin \theta_j [-J_x^{ij} \sin \phi_i \cos \phi_j + J_y^{ij} \cos \phi_i \sin \phi_j].$$

## 2.2. Comentarios sobre estas ecuaciones

Si bien las EIC (2.11)–(2.12) y las EDC (2.17) parecen suficientemente simples, sus significados e implicaciones puede no ser del todo evidentes. Es por eso que en esta sección se resaltarán varios puntos importantes acerca de ellas, así como se discute el procedimiento para resolverlas.

Primero consideremos las EIC. Como se ve en (2.11)–(2.12), estas ecuaciones relacionan las constantes de acoplamiento  $\mathcal{J}^{ij}$  con la dirección de alineación  $(\theta_i, \phi_i)$  y  $(\theta_j, \phi_j)$  de los espines. Operativamente, esto último implica que las EIC deben resolverse *para cada par interactuante  $i$  y  $j$* . Como se verá en los próximos capítulos, si bien este hecho parecería añadir dificultad al problema, en realidad permite que sea posible determinar estados separables para interacciones muy generales.

En relación con lo previamente mencionado, es interesante remarcar que las Ecs. (2.11)–(2.12) pueden interpretarse de varias formas. Usualmente, en la bibliografía el problema de factorización era encarado de la siguiente forma: *dadas las constantes de acoplamiento entre los espines, se determinan los posibles autoestados separables  $|\Theta\rangle$* . Es decir, las interacciones del modelo definen cuales son los estados permitidos. Sin embargo, como mostramos en [2] y como se discutirá en el Capítulo 6, es también posible pensar en *ingeniería de estados separables*: se  *fija*  cual debe ser la dirección de alineación de uno -o de ambos- de los espines y se determina  *cual debe ser la interacción entre ellos para que el estado que queremos sea autoestado exacto* .

En cuando a las EDC, es fácil mostrar que las Ecs. (2.17) son  *exactamente las ecuaciones estacionarias de campo medio*   $\frac{\partial}{\partial \theta_i} \langle H \rangle = 0$ ,  $\frac{\partial}{\partial \phi_i} \langle H \rangle = 0$ , donde la  *energía del estado separable*  es

$$E_{\Theta} = \langle H \rangle = \langle \Theta | H | \Theta \rangle = - \sum_i \langle \mathcal{S}_i \cdot \rangle \left( \mathbf{h}^i + \frac{1}{2} \sum_j \mathcal{J}^{ij} \langle \mathcal{S}_j \cdot \rangle \right), \quad (2.21)$$

e implican que  *en los CF las soluciones de campo medio son autoestados exactos de  $H$* . Así pues, las soluciones exactamente factorizadas son casos no triviales ya que por lo general las soluciones de campo medio son meras aproximaciones de las soluciones

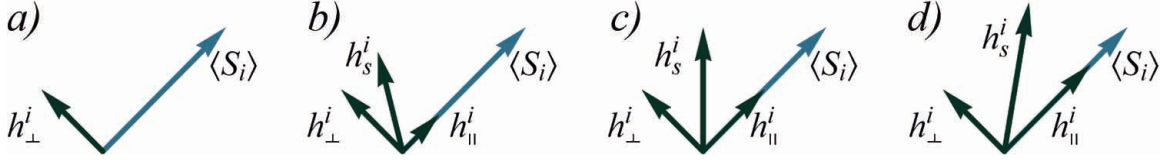


Figura 2-1: Esquema de las contribuciones paralelas y perpendiculares al campo factorizante  $h_s^i$ . El aplicar un campo paralelo a la dirección de alineación cambia la energía del autoestado.

exactas. En efecto, son las EIC quienes aseguran que las soluciones de campo medio sean exactas.

Por otro lado, de la Ec. (2.18) se ve que es posible descomponer al CF  $\mathbf{h}_s^i$  en dos “contribuciones”, una paralela  $\mathbf{h}_\parallel^i$  y una perpendicular  $\mathbf{h}_\perp^i$  a la dirección de alineación  $\mathbf{n}_i$  del espín en el sitio  $i$ . Como ya se mencionó, los campos  $\mathbf{h}_\perp^i$  corresponden a los CF de menor magnitud. Así pues, si en cada sitio se aplican los correspondientes campos locales  $\mathbf{h}_\perp^i$ , entonces  $|\Theta\rangle$  será un autoestado de  $H$ . Sin embargo, por lo general  $|\Theta\rangle$  será un autoestado excitado. Para que la factorización ocurra en el GS siempre es posible aprovechar el hecho que el CF tiene una contribución paralela  $\mathbf{h}_\parallel^i$ : *aplicar un campo paralelo a la dirección de alineación del espín no cambia el autoestado, sino que solamente cambia su energía*. Como se muestra en la Fig. 2-1, la magnitud del campo paralelo al espín puede ser arbitraria y esto permite que el CF  $\mathbf{h}_s^i$  pueda ser muy general; por ejemplo, puede ser: (a) ortogonal a  $\mathbf{n}_i$ , (c) alineado con el eje  $z$ , o (b,d) tener alguna dirección arbitraria. Cabe destacar que a menos que  $\mathbf{h}_\perp^i = 0$  entonces el CF *no será colineal con  $\langle S_i \rangle$* .

Finalmente es importante resaltar que el CF depende tanto de las constantes de acoplamiento entre los espines así como de su dirección de alineación (2.20), de forma que resulta conveniente resolver primero las EIC y luego las EDC. A su vez, dado que el CF  $\mathbf{h}_s^i$  contiene contribuciones provenientes de cada espín  $j$  con el que interactúa  $\mathbf{h}_\perp^i = \sum_j \mathbf{h}_\perp^{ij}$ , entonces se debe determinar  $\mathbf{h}_\perp^{ij}$  para *cada espín en cada par interactuante*.



## 2.3. Propiedades de las ecuaciones de factorización

En esta sección se prueban cinco propiedades fundamentales de las ecuaciones de factorización. Los mismos son presentados en forma de Lemas con su correspondiente demostración.

### 2.3.1. Del estado fundamental

*Lema 1.* Si las Ecs. de factorización (2.11), (2.12) y (2.17) se cumplen, el estado  $|\Theta\rangle$  dado por (2.3) será siempre un GS *no degenerado* de  $H$  para campos paralelos  $\mathbf{h}_{\parallel}^i = h_{\parallel}\mathbf{n}^i$  suficientemente grandes, pero finitos.

*Proof.* Este resultado es evidente, ya que no existe ningún estado  $|\Psi\rangle$  ortogonal a  $|\Theta\rangle$  cuya energía  $\langle H\rangle_{\Psi} = \langle\Psi|H|\Psi\rangle$  disminuya tan rápido con  $h_{\parallel}$  como  $E_{\Theta}$ . Esto último se debe al hecho de que la solución factorizada tiene *espín máximo* ( $\langle\Theta|\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{n}_i|\Theta\rangle$  es máximo). Por ejemplo, si  $s_i = s \forall i$ , entonces  $|\langle\mathbf{S}_i\cdot\mathcal{J}^{ij}\mathbf{S}_j\rangle_{\Psi}| \leq J^{ij}s(s+1)$  está acotado (donde  $J^{ij}$  es el máximo valor singular de la matriz  $\mathcal{J}^{ij}$ ) mientras que  $\langle-\sum_i\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{h}^i\rangle_{\Psi} \geq -(N-1)sh_{\parallel} - \sum_i\langle\mathbf{S}_i\rangle_{\Psi}\cdot\mathbf{h}_{\perp}^i$  si  $\mathbf{h}^i = h_{\parallel}\mathbf{n}_i + \mathbf{h}_{\perp}^i$  [recordar que  $N$  es el número de espines]. Así pues, como ya se mencionó, ningún estado  $|\Psi\rangle$  puede disminuir su energía con  $h_{\parallel}$  tanto como  $E_{\Theta}$  lo hace, dado que este último contiene un término  $\propto -NSh_{\parallel}$ . Por lo tanto, *siempre existe* un valor límite  $h_{\parallel c}$  tal que  $|\Theta\rangle$  es un GS no degenerado si  $h_{\parallel}^i > h_{\parallel c} \forall i$ . Además, el gap en la energía con el primer estado excitado se puede *hacer tan grande como se quiera* al aumentar la intensidad de  $h_{\parallel}^i$ .  $\square$

Típicamente, si todos los  $J^{ij}$  son  $O(J)$ , entonces el valor límite  $h_{\parallel c}$  será  $O(Jsl)$ , con  $l$  el número de vecinos acoplados a un dado espín.

### 2.3.2. De la existencia de constantes de acoplamiento

*Lema 2.* Dadas dos direcciones de alineación  $\mathbf{n}_i$  y  $\mathbf{n}_j$  en los sitios  $i$  y  $j$ , *siempre* existe un acoplamiento no nulo de tipo  $XYZ$   $J_{\mu\nu}^{ij} = \delta_{\mu\nu}J_{\mu}^{ij}$  tal que se cumplan las EIC (2.11)–(2.12).

*Proof.* Para una interacción tipo  $XYZ$   $J_{\mu\nu}^{ij} = \delta_{\mu\nu}J_{\mu}^{ij}$ , las Ecs. (2.11) se pueden reescribir en la siguiente conveniente notación vectorial

$$\mathbf{J}^{ij} \cdot \mathbf{U}^{ij} = 0, \quad \mathbf{J}^{ij} \cdot \mathbf{V}^{ij} = 0, \quad (2.22)$$

donde  $\mathbf{J}^{ij} = (J_x^{ij}, J_y^{ij}, J_z^{ij})$  es el *vector de acoplamiento*;  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son dos vectores definidos como

$$\mathbf{U}^{ij} = \mathbf{n}_i^{x'} * \mathbf{n}_j^{x'} - \mathbf{n}_i^{y'} * \mathbf{n}_j^{y'}, \quad (2.23)$$

$$\mathbf{V}^{ij} = \mathbf{n}_i^{x'} * \mathbf{n}_j^{y'} + \mathbf{n}_i^{y'} * \mathbf{n}_j^{x'}, \quad (2.24)$$

con  $\mathbf{n} * \mathbf{m} = (n_x m_x, n_y m_y, n_z m_z)$  el producto de Hadamard, tal que  $\mathbf{n}_i \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j = \mathbf{J} \cdot (\mathbf{n}_i * \mathbf{n}_j)$  para  $\mathcal{J}^{ij}$  diagonal.

Por lo tanto, basta con elegir  $\mathbf{J}^{ij}$  *ortogonal* al subespacio generado por  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  para que las Ec. (2.22) -y por lo tanto (2.11) y (2.12)- se cumplan. Luego, los CF se pueden obtener mediante las Ecs. (2.17)–(2.20), y  $|\Theta\rangle$  puede ser llevado al GS al aplicar campos paralelos  $h_{\parallel}^i$  suficientemente grandes (Lema 1).  $\square$

Como se muestra en la Fig. 2-2, hay dos situaciones distintas que se desprenden de las Ecs. (2.22): cuando  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son a) *linealmente independientes* y cuando son b) *linealmente dependientes*.

(a) Si  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son *linealmente independientes*, entonces determinan una *línea* de vectores de acoplamiento ortogonales al plano generado por  $\mathbf{U}^{ij}$  y por  $\mathbf{V}^{ij}$ ; es decir:

$$\mathbf{J}^{ij} = j^{ij}(\mathbf{U}^{ij} \times \mathbf{V}^{ij}), \quad (2.25)$$

con  $j^{ij}$  una constante real arbitraria. Esta ecuación se puede escribir explícitamente en término de las direcciones de alineación  $\mathbf{n}_i, \mathbf{n}_j$  como

$$J_{\mu}^{ij} = -j^{ij}(n_{j\mu} D_i / n_{i\mu} + n_{i\mu} D_j / n_{j\mu}), \quad (2.26)$$

donde  $D_i = \prod_{\mu} n_{i\mu} = \frac{1}{4} \sin \theta_i \sin 2\theta_i \sin 2\phi_i$ . Como es de esperarse, esta ecuación

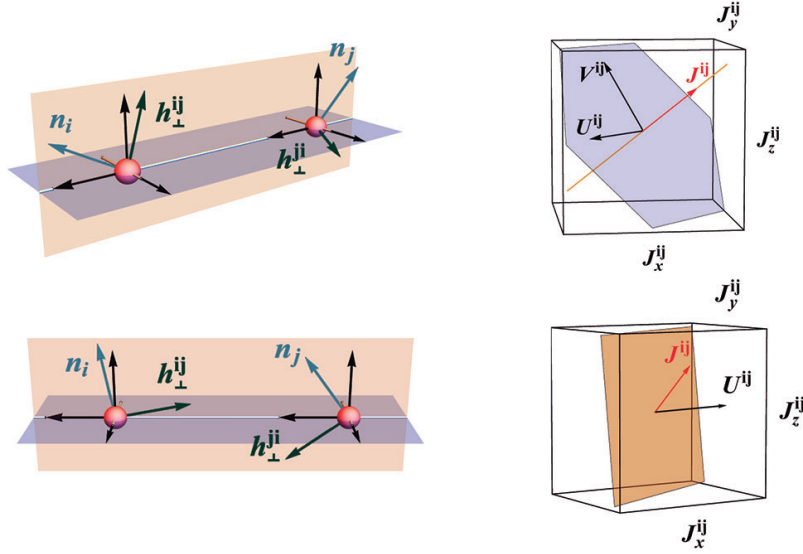


Figura 2-2: Columna izquierda: representación esquemática de las direcciones de alineación  $\mathbf{n}_i$ ,  $\mathbf{n}_j$  y los campos factorizantes perpendiculares  $\mathbf{h}_\perp^{ij}$  y  $\mathbf{h}_\perp^{ji}$  [Ec. (2.20)]. Columna derecha: constantes de acoplamiento en el espacio de las interacciones de intercambio compatibles con las direcciones de alineación de los espines. Fila superior:  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son linealmente independientes, de forma que las Ecs. (2.22) definen una *recta* [Ec. (2.25)] de posibles constantes de acoplamiento de intercambio. Fila inferior:  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son linealmente dependientes (ya que tanto  $\mathbf{n}_i$  como  $\mathbf{n}_j$  pertenecen al mismo plano principal), y las Ecs. (2.22) definen un *plano* de posibles constantes de acoplamiento de intercambio.

satisface  $J_\mu^{ij} = J_\mu^{ji}$ . A su vez, el campo ortogonal  $\mathbf{h}_\perp^{ij}$  se determina como función de las direcciones de alineación y de la constante  $j^{ij}$ :

$$(\mathbf{h}_\perp^{ij})_\mu = j^{ij} s_j (n_{j\mu}^2 - n_{i\mu}^2) D_i / n_{i\mu}. \quad (2.27)$$

Correspondientemente, la energía  $E_\Theta$ , (2.21), resulta

$$E_\Theta = - \sum_i s_i h_\parallel^i - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} j^{ij} s_i s_j (D_i + D_j). \quad (2.28)$$

(b) Por el otro lado, si  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son *linealmente dependientes*, entonces definen un *plano* de constantes de acoplamiento de intercambio. Este caso surge:

- i. Si tanto  $\mathbf{n}_i$  como  $\mathbf{n}_j$  pertenecen al mismo plano principal, es decir, si  $n_{i\sigma} = n_{j\sigma} = 0$  para algún  $\sigma = x, y$  o  $z$ .

- ii. Si  $\mathbf{n}_j$  es la reflexión de  $\mathbf{n}_i$  con respecto a algún plano principal. En este caso  $|n_{j\mu}| = |n_{i\mu}| \forall \mu$ , con  $n_{j\sigma} = -n_{i\sigma}$  para alguna componente  $\sigma$ .
- iii. Si  $\mathbf{n}_i = -\mathbf{n}_j$ , es decir, si las direcciones de alineación son antiparalelas.

En todos estos casos -y para la presente elección de vectores  $\mathbf{n}_i^{\mu'} - \mathbf{V}^{ij}$  es idénticamente nulo, y el plano de constantes de acoplamiento es ortogonal a  $\mathbf{U}^{ij}$ . A continuación se presentan las formulas explícitas para  $\mathbf{J}^{ij}$  en cada caso.

(i) Si tanto  $\mathbf{n}_i$  como  $\mathbf{n}_j$  pertenecen al mismo plano principal  $\mu\nu$ , con  $\sigma$  la dirección ortogonal a este plano ( $n_{i\sigma} = n_{j\sigma} = 0$ ), las Ecs. (2.22) conducen a

$$J_{\sigma}^{ij} = J_{\mu}^{ij} n_{i\nu} n_{j\nu} + J_{\nu}^{ij} n_{i\mu} n_{j\mu}, \quad (2.29)$$

con  $J_{\mu}^{ij}$  y  $J_{\nu}^{ij}$  arbitrarios. En este caso hay dos constante de acoplamiento que son independientes, y que corresponden precisamente a aquellas que pertenecen al plano de constantes de acoplamiento (panel inferior derecho en la Fig. 2-2). De la Ec. (2.20) se puede ver que  $\mathbf{h}_{\perp}^{ij}$  también pertenece al plano principal  $\mu\nu$ , y que depende directamente de las constantes de acoplamiento arbitrarias  $J_{\mu}^{ij}$  y  $J_{\nu}^{ij}$ . Además, si se elijen de tal forma que se cumpla  $\mathbf{n}_i \times (\mathbf{J}^{ij} * \mathbf{n}_j) = \mathbf{0}$ , entonces  $\mathbf{h}_{\perp}^{ij} = \mathbf{0}$ ; es decir,  $|\Theta\rangle$  es un autoestado de  $H$  a campo nulo.

(ii) Si  $\mathbf{n}_i$  es una reflexión de  $\mathbf{n}_j$  con respecto al plano principal  $\mu\nu$ , con todas las componentes de  $\mathbf{n}_{i(j)}$  distintas de cero (en caso contrario, regresaríamos a i), las Ecs. (2.22) son

$$J_{\sigma}^{ij} = \frac{J_{\mu}^{ij}(1 - n_{i\mu}^2) + J_{\nu}^{ij}(1 - n_{i\nu}^2)}{1 - n_{i\sigma}^2}, \quad (2.30)$$

con  $J_{\mu}^{ij}$  y  $J_{\nu}^{ij}$  arbitrarios. Luego, de la Ec. (2.20) se obtienen los campos ortogonales como

$$(\mathbf{h}_{\perp}^{ij})_{\sigma} = s_j (J_{\mu}^{ij} + J_{\nu}^{ij}) n_{i\sigma}, \quad (2.31)$$

$$(\mathbf{h}_{\perp}^{ij})_{\mu(\nu)} = s_j (J_{\nu(\mu)}^{ij} - J_{\sigma}^{ij}) n_{i\mu(\nu)}. \quad (2.32)$$

(iii) Para finalizar, si  $\mathbf{n}_i = -\mathbf{n}_j$ , entonces simplemente se debe reemplazar  $J_{\sigma}^{ij}$  por

$-J_\sigma^{ij}$  en (2.30)–(2.32), de forma que  $\mathbf{J}^{ij}$  pertenece al plano  $\sum_{\mu=x,y,z} J_\mu^{ij}(1 - n_\mu^2) = 0$ , con  $(\mathbf{h}_\perp^{ij})_\mu = s_j(\text{Tr}(\mathcal{J}) - J_\mu)n_{i\mu}$ .

A modo de comentario final, es importante destacar que si nos acercamos a algunos de los casos (b) desde el caso linealmente independiente, se verifica que (2.29)–(2.32) son en efecto los límites correspondientes de las Ecs. (2.26)–(2.27).

### 2.3.3. De la existencia de direcciones de alineación

*Lema 3.* Dada una interacción cuadrática arbitraria  $\mathbf{S}_i \mathcal{J}^{ij} \mathbf{S}_j = \sum_{\mu,\nu} J_{\mu\nu}^{ij} S_i^\mu S_j^\nu$  entre dos espines, y dada una dirección de alineación arbitraria de uno de los espines  $\mathbf{n}_j$ , *siempre* existe al menos una dirección de alineación  $\mathbf{n}_i$  para el otro espín tal que se cumplan las EIC (2.11)–(2.12).

La dirección de alineación de  $\mathbf{n}_i$  está dada por

$$\mathbf{n}_i = \alpha[\mathbf{a} \times \mathbf{b} \pm (\eta\lambda_+ \mathbf{a} + \lambda_- \mathbf{b})], \quad (2.33)$$

donde  $\mathbf{a} = \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j^{x'}$ ,  $\mathbf{b} = \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j^{y'}$ ,

$$\lambda_\pm^2 = \frac{\sqrt{(|\mathbf{a}|^2 - |\mathbf{b}|^2)^2 + 4|\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}|^2} \pm (|\mathbf{a}|^2 - |\mathbf{b}|^2)}{2}, \quad (2.34)$$

y  $\alpha$  es una constante de normalización, con  $\eta = 1$  si  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \geq 0$  y  $-1$  en caso contrario (si  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$ ,  $\lambda_+$  o  $\lambda_-$  se anula y el signo de  $\eta$  es irrelevante).

Como se muestra en la Fig. 2-3, cada signo en (2.33) da lugar a una solución distinta para  $\mathbf{n}_i$  si  $\lambda_\pm$  no se anulan. Si  $\mathbf{b} \propto \mathbf{a}$  y  $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$ , entonces  $\mathbf{n}_i \propto \mathbf{a}$ . Como se probará a continuación, la Ec. (2.33) es válida si  $\mathbf{a}$  y  $\mathbf{b}$  no son simultáneamente  $\mathbf{0}$ .

Este lema implica que en sistemas unidimensionales de  $N$  espines con interacción cuadrática de primeros vecinos *arbitraria y no necesariamente uniforme*, *siempre* existe un autoestado completamente separable compatible con una dada dirección de alineación (arbitraria) en *uno* de los espines. Las direcciones de alineación de los espines restantes se pueden determinar por aplicaciones sucesivas del presente Lema, mien-

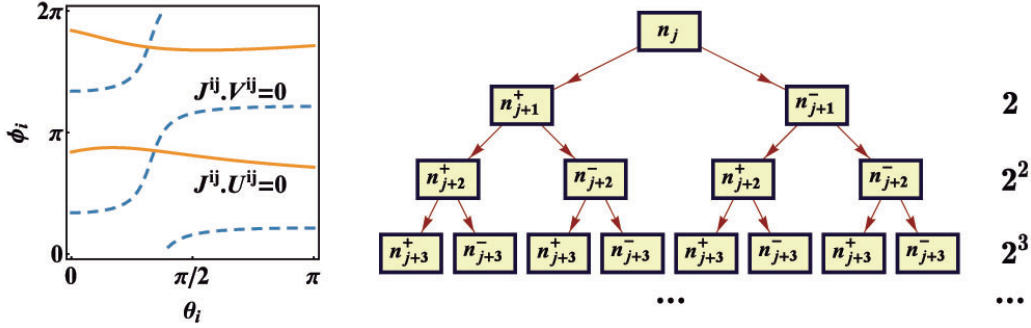


Figura 2-3: Izquierda: gráfica de contorno de las Ecs. (2.22) para  $\mathbf{J}^{ij}$  y  $\mathbf{n}_j$  ( $\mathbf{J}^{ij} = J(1, .75, -.2)$ ,  $\theta_j = \pi/3$ ,  $\phi_j = \pi/5$ ). Los dos puntos de intersección se corresponden con las dos soluciones  $\mathbf{n}_i^\pm$  por  $\mathbf{n}_i$  [Ec. (2.33)]. Derecha: representación esquemática de las  $2^{N-1}$  configuraciones de  $|\Theta\rangle$  compatibles con el vector de acoplamiento  $\mathbf{J}^{ij}$  para una cadena de  $N$  espines y una dirección de alineación inicial en el espín del sitio  $j$ .

tras que los CF se hallan mediante las Ecs. (2.17)–(2.20). De hecho, por lo general hay  $2^{N-1}$  configuraciones de espines compatibles con los acoplamiento y la dirección de alineación inicial  $\mathbf{n}_j$  (ver panel derecho de la Fig. 2-3).

*Proof:* Supongamos primero que  $\mathbf{a} = \mathcal{J}^{ij}\mathbf{n}_j^{x'}$  y  $\mathbf{b} = \mathcal{J}^{ij}\mathbf{n}_j^{y'}$  son linealmente independientes, podemos entonces definir vectores ortonormales  $\mathbf{k}, \mathbf{l}$  tales que  $\mathbf{a} = |\mathbf{a}|\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{b} = b_1\mathbf{k} + b_2\mathbf{l}$ , con  $b_1 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}/|\mathbf{a}|$ . Así pues, se tiene que los vectores normalizados  $\mathbf{n}_i^{x'} \propto b_2\mathbf{k} - b_1\mathbf{l} + \lambda\mathbf{m}$  y  $\mathbf{n}_i^{y'} \propto \lambda\mathbf{l} + b_1\mathbf{m}$ , con  $\mathbf{m} = \mathbf{k} \times \mathbf{l}$ , satisfacen  $\mathbf{n}_i^{x'} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{n}_i^{y'} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{n}_i^{x'} \cdot \mathbf{n}_i^{y'} = 0$ . Por lo tanto, las ecuaciones de factorización (2.22) se cumplirán siempre que  $\mathbf{n}_i^{x'} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{n}_i^{y'} \cdot \mathbf{b}$ ; que implica  $\lambda = \pm\lambda_+$ , con  $\lambda$  dado por la Ec. (2.34). Con esto, se puede determinar una dirección de alineación adecuada para el espín en el sitio  $i$  como  $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}_i^{x'} \times \mathbf{n}_i^{y'}$ , que resulta en la Ec. (2.33).

Adicionalmente, si  $\mathbf{b} \propto \mathbf{a}$ , con  $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$ , entonces la Ec. (2.33) sigue siendo válida, ya que este caso conduce a  $\mathbf{n}_i \propto \mathbf{a}$ , que es de hecho una solución obvia de las Ecs. (2.22) para  $\mathbf{n}_i$ . Por otro lado, si  $\mathbf{a} = \mathbf{b} = \mathbf{0}$ , que ocurre cuando  $\mathbf{J}^{ij}$  (que se supone no nulo) y  $\mathbf{n}_j$  apuntan simultáneamente a lo largo del mismo eje principal ( $\mu$ ), entonces  $\mathbf{n}_i$  resulta completamente *arbitrario*. En este caso, el efecto del acoplamiento en el estado producto puede ser contrarrestado solamente con el CF, ya que involucra simplemente excitaciones de un cuerpo:  $J_\mu^{ij} S_i^\mu S_j^\mu |\Theta\rangle = s_j J_\mu^{ij} S_i^\mu |\Theta\rangle$ .  $\square$

Como ya se mencionó previamente, se puede ver de la Ec. (2.33), que existen dos

soluciones para  $\mathbf{n}_i$  a menos que se anulen simultáneamente  $\lambda_{\pm}$ . Este caso surge, por ejemplo, cuando  $\mathbf{J}^{ij} \propto (1, 1, 1)$  (acoplamiento isotrópico) o si todas las componentes de  $\mathbf{J}$  tienen el mismo valor absoluto (es decir,  $\mathbf{J} \propto (1, 1, -1)$ ), que implica  $|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}|$  y  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$  en (2.34). En el caso isotrópico,  $\mathbf{a} = \mathbf{n}_j^{x'}$ ,  $\mathbf{b} = \mathbf{n}_j^{y'}$  y la Ec. (2.33) implica una sola solución  $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}_j$  (solución uniforme).

### 2.3.4. De la existencia de campos factorizantes uniformes

*Lema 4.* Dado un par de espines iguales ( $s_i = s_j = s$ ), interactuando mediante un acoplamiento tipo XYZ, si las Ecs. (2.22) se satisfacen para direcciones de alineación  $\mathbf{n}_i$  y  $\mathbf{n}_j$  que no sean antiparalelas, entonces *siempre* existen campos paralelos  $\mathbf{h}_{\parallel}^{ij}$  y  $\mathbf{h}_{\parallel}^{ji}$  en los sitios  $i$  y  $j$  tales que el CF  $\mathbf{h}_s^{ij}$  del par es uniforme:

$$\mathbf{h}_{\parallel}^{ij} + \mathbf{h}_{\perp}^{ij} = \mathbf{h}_{\parallel}^{ji} + \mathbf{h}_{\perp}^{ji} = \mathbf{h}_s^{ij}. \quad (2.35)$$

Para el caso de *solución uniforme*, es decir, si las direcciones de alineación son iguales  $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}_j$ , entonces de la Eq. (2.20) es obvio que los campos perpendiculares son iguales; lo que implica que los campos paralelos cumplen  $h_{\parallel}^{ij} = h_{\parallel}^{ji}$  y que su magnitud  $h_{\parallel}^{ij}$  es completamente *arbitraria*. Sin embargo, como se mostrará más adelante, cuando  $\mathbf{n}_i \neq \mathbf{n}_j$  la Ec. (2.35) conduce a valores *fijos* para los campos paralelos  $h_{\parallel}^{ij}$ ,  $h_{\parallel}^{ji}$ ; de forma que el campo factorizante es *uniforme* para el par y  $\mathbf{h}_s^{ij}$  pertenece al elipsoide ( $\mu \neq \nu \neq \sigma$ )

$$\sum_{\mu=x,y,z} \frac{(h_{s\mu}^{ij})^2}{(J_{\mu}^{ij} + J_{\nu}^{ij})(J_{\mu}^{ij} + J_{\sigma}^{ij})} = s^2. \quad (2.36)$$

*Proof:* De la Ec. (2.20) se tiene que  $\mathbf{h}_{\perp}^{ij} = -s[\mathcal{J}^{ij}\mathbf{n}_j - \mathbf{n}_i(\mathbf{n}_i \cdot \mathcal{J}^{ij}\mathbf{n}_j)]$ , mientras que la Ec. (2.35) implica

$$s\mathbf{J}^{ij} * (\mathbf{n}_j - \mathbf{n}_i) = [h_{\parallel}^{ij} + s(\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{J}^{ij} * \mathbf{n}_j)]\mathbf{n}_i \quad (2.37)$$

$$- [h_{\parallel}^{ji} + s(\mathbf{n}_j \cdot \mathbf{J}^{ij} * \mathbf{n}_i)]\mathbf{n}_j, \quad (2.38)$$

que se verifica para algunos  $h_{\parallel}^{ij}$  y  $h_{\parallel}^{ji}$  si y solo si  $\mathbf{J}^{ij} * (\mathbf{n}_j - \mathbf{n}_i)$  pertenece al subespacio

generado por  $\mathbf{n}_i$  y  $\mathbf{n}_j$ . Si  $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}_j$ , entonces esta condición se satisface trivialmente (con  $h_{\parallel}^{ij} = h_{\parallel}^{ji}$  arbitrario); mientras que si  $\mathbf{n}_i$  y  $\mathbf{n}_j$  no son colineales, esta condición implica  $(\mathbf{J}^{ij} * (\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_j)) \cdot (\mathbf{n}_i \times \mathbf{n}_j) = 0$ , es decir,  $\mathbf{J}^{ij} \cdot [(\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_j) * (\mathbf{n}_i \times \mathbf{n}_j)] = 0$ . Sin embargo, esta ecuación se satisface siempre si  $\mathbf{J}^{ij} \propto \mathbf{U}^{ij} \times \mathbf{V}^{ij}$  (Ec. (2.25)), mientras que si  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son linealmente dependientes, se satisface para *cualquier*  $\mathbf{J}^{ij}$ , dado que en este caso  $(\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_j) * (\mathbf{n}_i \times \mathbf{n}_j) = \mathbf{0}$ .

Por último, si  $\mathbf{n}_i = -\mathbf{n}_j$ , entonces no existe solución. En este caso, se obtiene de la Ec. (2.20) que  $\mathbf{h}_{\perp}^{ij} = -\mathbf{h}_{\perp}^{ji}$  y por lo tanto no existen campos paralelos  $\mathbf{h}_{\parallel}^{ij(ji)}$  que puedan conducir a un CF uniforme para el par. Existe sin embargo el *caso particular* en que  $\mathbf{h}_{\perp}^{ij} = \mathbf{0}$  (por ejemplo, direcciones de alineación antiparalelas a lo largo del eje  $z$ , que cumplen con las Ecs. (2.22) si  $J_x^{ij} = -J_y^{ij}$  y que conducen a  $\mathbf{h}_{\perp}^{ij} = \mathbf{0}$ ).  $\square$

Previamente se mencionó que si  $\mathbf{n}_i \neq \mathbf{n}_j$ , entonces la Ec. (2.38) conduce a valores fijos de los campos paralelos. A continuación se realiza la demostración explícita de esta afirmación.

Si  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son linealmente independientes, entonces al resolver la Ec. (2.38) se determina que  $h_{\parallel}^{ij} = -j^{ij}s[D_i + \mathbf{n}_i \cdot (n_{jy}n_{jz}, n_{jx}n_{jz}, n_{jx}n_{jy})]$ . El CF uniforme  $\mathbf{h}_s^{ij} = \mathbf{h}_{\parallel}^{ij} + \mathbf{h}_{\perp}^{ij}$  será entonces  $(\mu, \nu, \sigma$  indican los tres ejes principales)

$$(h_s^{ij})_{\mu} = -j^{ij}s\alpha_{\mu\nu}\alpha_{\mu\sigma}, \quad \alpha_{\mu\nu} = n_{i\mu}n_{j\nu} + n_{i\nu}n_{j\mu}. \quad (2.39)$$

Por el otro lado, cuando  $\mathbf{V}^{ij} = \mathbf{0}$ , de la Ec. (2.38) se obtiene

$$h_{\parallel}^{ij} = -s \frac{\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{J}^{ij} * \mathbf{n}_i + n_{i\mu}J_{\mu}^{ij} + n_{j\mu}(J_{\sigma}^{ij} + J_{\nu}^{ij})}{n_{i\mu} + n_{j\mu}} \quad (2.40)$$

si tanto  $\mathbf{n}_i$  como  $\mathbf{n}_j$  pertenecen al plano principal  $\mu\nu$ ; y  $h_{\parallel}^{ij} = h_{\parallel}^{ji} = -s(J_{\mu}^{ij} + J_{\nu}^{ij})$  si  $\mathbf{n}_i$  es la reflexión de  $\mathbf{n}_j$  con respecto al plano principal  $\mu\nu$ . Así, los CF son

$$(h_s^{ij})_{\mu(\nu)} = -s(J_{\mu(\nu)}^{ij} + J_{\sigma}^{ij})n_{i\mu(\nu)}, \quad (h_s^{ij})_{\sigma} = 0, \quad (2.41)$$

que implica que las componentes  $\sigma$  de  $\mathbf{h}_{\parallel}^{ij(ji)}$  y  $\mathbf{h}_{\perp}^{ij(ji)}$  se cancelan mutuamente de tal forma que el CF uniforme resultante también pertenece al plano principal  $\mu\nu$ .



### 2.3.5. Del entrelazamiento en la vecindad de la factorización

*Lema 5.* En la vecindad de la factorización, el entrelazamiento de pares alcanza rango completo; es decir, todos los espines del sistema están entrelazados con todos los otros espines.

Si bien en los puntos y líneas de factorización el entrelazamiento de pares se anula (ya que el estado es separable), en su vecindad -es decir, para pequeñas variaciones de los valores de factorización en los acoplamientos y/o campos- el entrelazamiento alcanza rango completo. Como se mostrará a continuación, este resultado es completamente general, ya que es válido incluso para acoplamiento y campos no uniformes. Así pues, los puntos de factorización pueden ser considerados *verdaderos puntos críticos del entrelazamiento* aún en sistemas finitos.

*Proof.* Sean  $\mathbf{h}^i$  y  $\mathcal{J}^{ij}$  los campos y acoplamientos para los cuales el estado separable  $|\Theta\rangle$  (no necesariamente uniforme) es el GS no degenerado de  $H$ . Entonces, para pequeñas variaciones  $\mathbf{h}^i \rightarrow \mathbf{h}^i + \delta\mathbf{h}^i$  y  $J_{\mu\nu}^{ij} \rightarrow J_{\mu\nu}^{ij} + \delta J_{\mu\nu}^{ij}$ , el GS perturbado será  $|\text{GS}\rangle = |\Theta\rangle + \delta|\text{GS}\rangle$ , con

$$\delta|\text{GS}\rangle \approx \sum_{\nu} \frac{\langle \nu | (\sum_i \delta\mathbf{h}_{\perp}^i \cdot \mathbf{S}_i + \sum_{i < j, \mu, \nu} \delta J_{\mu\nu}^{ij} S_i^{\mu} S_j^{\nu}) | \Theta \rangle}{E_{\nu} - E_{\Theta}} |\nu\rangle = (\sum_i \alpha_i S_i^{-'} + \sum_{i,j} \beta_{ij} S_i^{-'} S_j^{-'} + \dots) |\Theta\rangle, \quad (2.42)$$

donde  $|\nu\rangle$  son los autoestados exactos -usualmente entrelazados- en el punto de factorización ( $H|\nu\rangle = E_{\nu}|\nu\rangle$ ,  $\langle\nu|\Theta\rangle = 0$ );  $\delta\mathbf{h}_{\perp}^i$  es la componente de  $\delta\mathbf{h}^i$  ortogonal a  $\mathbf{n}_i$  y  $S_i^{\pm'}$  =  $R_i^{-1}(\theta_i, \phi_i) S_i^{\pm} R_i(\theta_i, \phi_i)$  son los operadores de espín rotados, tales que  $S_i^{\pm'} |\Theta\rangle = 0 \forall i$ . En la base estándar rotada  $\{\otimes_i |k'_i\rangle\}$  ( $S_i^{z'} |k'_i\rangle = (s_i - k) |k'_i\rangle$ ), tal que  $|\Theta\rangle = \otimes_{i=1}^N |\uparrow_i\rangle$ , y considerando primero  $s_i = 1/2 \forall i$ , se obtiene de la Ec. (2.42) al orden perturbativo no nulo más bajo (se descartan los términos cuadráticos en  $\alpha_i$  y  $\beta_{ij}$ ) una matriz reducida para el par de la forma

$$\rho_{ij} \approx \begin{pmatrix} 1 & \alpha_i & \alpha_j & \beta_{ij} \\ \bar{\alpha}_i & 0 & 0 & 0 \\ \bar{\alpha}_j & 0 & 0 & 0 \\ \bar{\beta}_{ij} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

Utilizando el criterio de Peres (Sección 1.4.1), se obtiene que la traspuesta parcial de (2.43) tiene autovalores  $1, 0$  y  $\pm|\beta|_{ij}$  al orden más bajo no trivial, de modo que  $\rho_{ij}$  estará entrelazada si  $\beta_{ij} \neq 0$ . Los coeficientes exactos  $\beta_{ij}$  son, para perturbaciones generales  $\delta\mathbf{h}^i$  y  $\delta J_{\mu\nu}^{ij}$ , estrictamente no nulos para *cualquier* par  $i, j$  acoplados por aplicaciones sucesivas de los acoplamientos en  $H$  (debido a las excitaciones de dos cuerpos presentes en los autoestados exactos  $|\nu\rangle$ ). Estos coeficientes son generalmente pequeños para pares distantes, pero siempre serán estrictamente no nulos.

Para espines más altos  $s$ ,  $\rho_{ij}$  será más compleja, pero siempre contendrá una primera submatriz de la forma (2.43). Por lo tanto, también será entrelazada si  $\beta_{ij} \neq 0$ , dado que la traspuesta parcial de este bloque será el primer bloque de la traspuesta parcial completa  $\rho_{ij}^{tp}$  y es por lo tanto no positiva al orden más bajo, evitando así que la matriz completa  $\rho_{ij}^{tp}$  sea definida semipositiva.  $\square$

Para espines  $1/2$ , la Ec. (2.43) conduce -al orden más bajo- a una Concurrencia (ver Sección 1.4.2) no nula  $C_{ij} \approx 2|\beta_{ij}|$ . A este orden,  $\alpha_i$  y  $\alpha_j$  en (2.43) no afectan a  $C_{ij}$  (1.37) ni a los autovalores de la traspuesta parcial  $\rho_{ij}^{T_j}$ .

## Comentarios finales

En este capítulo se derivaron y estudiaron rigurosamente las ecuaciones fundamentales para la existencia de soluciones factorizadas en sistemas de espines interactuantes. A partir de estos resultados, procedemos en los próximos capítulos a estudiar el fenómeno de factorización en dos modelos distintos. Así pues, se mostrará que las EIC y las EDC derivadas permiten descubrir nuevas soluciones factorizadas y nuevos fenómenos críticos.

# Capítulo 3

## Campos factorizantes no transversos en sistemas $XYZ$

*“Un proceso no puede ser entendido deteniéndolo.  
El entendimiento debe moverse con el flujo del proceso,  
debe unirse a este y fluir con el mismo.”*

*La Primera Ley del Mentat*

- Extracto de “*Dune*” por F. Herbert.

En el capítulo anterior se determinaron las ecuaciones que aseguran la existencia de soluciones factorizadas y de campos factorizantes (CF) bajo condiciones muy generales. Así pues, ahora se aplicarán estas ecuaciones al estudio de dos sistemas paradigmáticos: las cadenas de espines  $XYZ$  con interacciones ferromagnéticas (FM) y con interacciones antiferromagnéticas (AFM). Cabe mencionar que si bien la factorización en estos dos sistemas ya había sido estudiada en la bibliografía, se demostrará que nuestras ecuaciones generales permiten no solo recuperar estos resultados sino también obtener nuevos fenómenos previamente desconocidos.

En la Sección 3.1 se realizará primero un breve repaso de los resultados conocidos en cadenas *antiferromagnéticas* de espines  $1/2$  con interacción  $XYZ$  de primeros vecinos en campos uniformes. Este sistema es precisamente el estudiado por J. Kurmann, H. Thomas, y G. Müller en 1982, cuando descubrieron el fenómeno de facto-

rización [34]. Más precisamente, estos autores mostraron que el sistema considerado presenta una solución separable de tipo Néel. En los años posteriores, este sistema fue también analizado por varios autores [78–88]; donde se consideró por ejemplo la factorización en sistemas bidimensionales [79], el rango del entrelazamiento en la vecindad del CF [80, 81] y su relación con la frustración del sistema [85]. Es importante mencionar que si bien Kurmann *et al.* estudiaron una cadena con campos *no transversos*, el resto de los trabajos se centran en el caso de campos uniformes *transversos*.

Luego, se realizará un repaso de los resultados conocidos para cadenas *ferromagnéticas* de espines  $1/2$  con interacción *XYZ* de primeros vecinos en campos uniformes *transversos*. Este caso fue estudiado por primera vez por R. Rossignoli, N. Canosa y M. Matera [89], quienes demostraron la existencia de un estado factorizado uniforme, y quienes argumentaron que en el campo factorizante (CF) la solución de campo medio es exacta. De hecho, mostraron también que las EIC pueden obtenerse del método de random phase approximation (RPA) exigiendo que se anulen los elementos que conectan el vacío (la solución de campo medio) con excitaciones de pares [90]. Este tipo de sistemas sería estudiado en modelos más generales como cadenas dimerizadas [90–94], ferrimagnetos [95] y sistemas con temperatura finita [96].

A continuación, en la Sección 3.2 se revisitarán estos dos sistemas paradigmáticos con el fin de mostrar que las EIC y las EDC presentadas en esta tesis permiten determinar *nuevos fenómenos* críticos cuando se aplican al sistema campos *no transversos*. En particular, se demostrará que tanto las cadenas FM como AFM presentan una solución factorizada uniforme que puede ser no degenerada para campos no transversos, y que coexiste con la solución de tipo Néel del caso AFM. Así pues, estos novedosos resultados extienden y completan el diagrama de factorización de Kruman *et al.* Los resultados presentados en este capítulo fueron publicados en [1].

### 3.1. Cadenas con interacción XYZ, repaso

El Hamiltoniano de una cadena de  $N$  espines 1/2 con interacción uniforme XYZ de primeros vecinos en un campo uniforme es

$$H = - \sum_{i,\mu} h_\mu S_i^\mu - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j, \mu} J_\mu S_i^\mu S_j^\mu, \quad (3.1)$$

donde la interacción de intercambio  $J_{\mu\nu}^{ij} = \delta_{ij} J_\mu$  (con  $\mu = x, y, z$ ) es AFM si  $J_\mu^{ij} \leq 0$  y es FM si  $J_\mu^{ij} > 0$ . Como es bien sabido, es importante identificar las simetrías del sistema bajo estudio; y en este caso -cadena con campo e interacciones uniformes, y con condiciones de contorno periódicas- el Hamiltoniano es *invariante frente a traslaciones*. Es decir, que los autoestados no degenerados de  $H$  cumplen con la *invarianza traslacional*

$$T|\Psi\rangle \propto |\Psi\rangle, \quad (3.2)$$

donde  $T$  es el operador de traslación en un sitio. Además, si el campo externo es *transverso*  $h_z = h_y = 0$ , entonces  $H$  conserva la *paridad*  $S_z$  ya que conmuta con el operador de paridad

$$P_z = e^{i\pi \sum_i (S_i^z + 1/2)}. \quad (3.3)$$

Evidentemente, para campos no transversos, esta simetría no se conserva, pues ahora  $[H, P_z] \neq 0$ .

#### 3.1.1. De la interacción antiferromagnética

En [34], J. Kurmann, H. Thomas y G. Müller determinan las condiciones bajo las cuales el Hamiltoniano (3.1) presenta un estado separable de tipo Néel en el que las direcciones de alineación de los espines tienen valores alternantes

$$|\Theta_N\rangle = \prod_{i=1}^N |\psi_i\rangle = | \nearrow \searrow \nearrow \searrow \dots \rangle, \quad (3.4)$$

$$|\psi_{2i-1}\rangle = R_{2i-1}(\theta_1, \phi_1) | \uparrow_{2i-1} \rangle, \quad (3.5)$$

$$|\psi_{2i}\rangle = R_{2i}(\theta_2, \phi_2) | \uparrow_{2i} \rangle, \quad (3.6)$$

donde  $R_i(\theta_i, \phi_i) = e^{-i\phi_i S^z} e^{-i\theta_i S^y}$  es el operador de rotación (1.64). Para un estado de esta forma el problema original -no trivial- de muchos cuerpos interactuantes se reduce a un problema de autovalores que incluye solamente dos sitios

$$H_{i,i+1}|\psi_i\rangle|\psi_{i+1}\rangle = \epsilon_N|\psi_i\rangle|\psi_{i+1}\rangle, \quad (3.7)$$

con

$$H_{i,i+1} = - \sum_{\mu} \left( \frac{h_{\mu}}{2} (S_i^{\mu} + S_{i+1}^{\mu}) + J_{\mu} S_i^{\mu} S_{i+1}^{\mu} \right). \quad (3.8)$$

En su trabajo, los autores demuestran que la Ec. (3.7) admite una solución de tipo Néel con energía por sitio

$$\epsilon_N = E_{\theta}/N = \frac{1}{4}(J_x + J_y + J_z), \quad (3.9)$$

si los campos magnéticos apuntan a la superficie de un elipsoide (ver Fig. 3-1) caracterizado por la ecuación

$$\frac{h_x^2}{(J_x + J_y)(J_x + J_z)} + \frac{h_y^2}{(J_y + J_z)(J_y + J_x)} + \frac{h_z^2}{(J_z + J_x)(J_z + J_y)} = 1. \quad (3.10)$$

Debido a que el estado alternante (3.4) rompe la simetría traslacional de  $H$ , entonces solamente puede surgir en un cruce de estados en el que el estado es *doblemente degenerado* [97].

Finalmente, cabe mencionar que J. Kurmann *et al.* mostraron que si  $|\Theta_N\rangle$  es un autoestado de  $H$  para constantes de acoplamiento de intercambio  $J_{\mu}$ , campos  $h_{\mu}$  y espín  $s = 1/2$ ; entonces  $H$  también tendrá un autoestado separable de tipo Néel para los mismos valores de las constantes de acoplamiento, campos  $2sh_{\mu}$  y espines  $s$  arbitrarios. A su vez, en su trabajo demuestran que  $|\Theta_N\rangle$  es siempre el GS para  $s = 1/2$ , mientras que para  $s > 1/2$  indican que no lograron determinar una prueba formal.

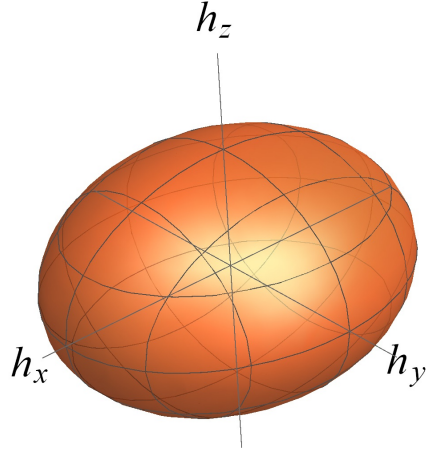


Figura 3-1: Esquema del elipsoide (3.10) de campos factorizantes que determina una solución tipo Néel (3.4) en el espacio de campos  $(h_x, h_y, h_z)$ .

### 3.1.2. De la interacción ferromagnética

El estudio de factorización en cadenas ferromagnéticas en campos transversos ( $h_z = h_y = 0$ ) se puede rastrear hacia los trabajos de R. Rossignoli, N. Canosa y J. M. Matera, quienes en [89] determinaron las condiciones bajo las cuales el Hamiltoniano (3.1) posee un autoestado *uniforme* completamente separable

$$|\Theta_U\rangle = \prod_{i=1}^N R_i(\theta, 0) |\uparrow_i\rangle = |\nearrow \nearrow \nearrow \nearrow \dots\rangle, \quad (3.11)$$

en el que todos los estados son rotados para apuntar a lo largo de la misma dirección  $\theta_i = \theta$  y  $\phi_i = 0$  en el plano  $xz$ . Siguiendo un procedimiento similar al presentado en el capítulo previo, los autores demuestran que  $|\Theta_U\rangle$  será un autoestado de  $H$  si se cumplen las ecuaciones

$$\cos \theta = \pm \chi, \quad \chi \equiv \frac{J_y - J_z}{J_x - J_z}, \quad (3.12)$$

$$h_{zs} = \frac{1}{2}(J_z - J_x) \cos \theta. \quad (3.13)$$

En este caso se puede suponer -sin perder generalidad- que  $J_x \geq |J_y|$ , de modo que las Ecs. (3.12) y (3.13) implican  $\chi \in [0, 1)$  y por lo tanto las constantes de acoplamiento serán de la forma  $J_x \leq J_y < J_z$ . Este resultado se puede generalizar fácilmente a sis-

temas con interacciones uniformes de largo alcance, ya que  $|\Theta_U\rangle$  dependerá solamente de la anisotropía  $\chi$  pero no del rango de la interacción.

Si bien el estado uniforme (3.11) es invariante frente a traslaciones, este último rompe la simetría de paridad  $P_z$  y por lo tanto debe surgir -al igual que  $|\Theta_N\rangle$ - en un punto *doblemente degenerado* en el que se cruzan dos estados de paridad opuesta: a medida que el campo transversal aumenta en magnitud, el GS experimentará transiciones de paridad, siendo la última de ellas el punto de factorización [89]. Así pues, tanto  $|\Theta_U\rangle = \prod_{i=1}^N R_i(\theta, 0)$  como  $|- \Theta_U\rangle \equiv \prod_{i=1}^N R_i(-\theta, 0)$  son autoestados degenerados de  $H$  en el CF (3.13), y su energía asociada será

$$E_\theta = -\frac{N}{8}(J_x + J_y - J_z). \quad (3.14)$$

A su vez, en [89], los autores demuestran que el estado uniforme  $|\Theta_U\rangle$  es el GS de  $H$  si  $J_\mu \geq 0$ .

### 3.1.3. ¿Estados fundamentales separables?

Para terminar con la presente sección vale la pena resaltar un punto que es conceptualmente muy importante, y que surge por el hecho que en los dos casos previamente estudiados la factorización aparece en un cruce de estados donde el GS es *doblemente degenerado*. Por ende, si bien cada una de las soluciones que se cruzan es completamente separable, *no se puede decir que en la factorización el GS del sistema sea en efecto separable* ya que cualquier combinación de las dos soluciones será también GS. De hecho, dadas dos soluciones separables no coincidentes (por ejemplo, dadas  $(|\pm \Theta_U\rangle)$ ) cualquier combinación lineal de estas será un estado entrelazado.

Como se discutirá a continuación, en [1] demostramos que al romper la simetría de paridad -mediante la aplicación de campos no transversos- *sí* es posible obtener soluciones factorizadas *no degeneradas* en las que el GS *es efectivamente separable*.



## 3.2. Cadenas con interacción XYZ, revisitadas

Como ya se adelantó, en esta sección se estudiarán las EIC y EDC en los sistemas previamente mencionados. En una primera instancia se considerará un Hamiltoniano completamente general que describe sistemas de  $N$  espines  $s_i$ , no necesariamente iguales, interactuando con acoplamientos de Heisenberg tipo XYZ de rango arbitrario y en presencia de campos magnéticos *generales*  $\mathbf{h}^i = (h_x^i, h_y^i, h_z^i)$ , no necesariamente uniformes. Es decir

$$H = - \sum_{i,\mu} h_\mu^i S_i^\mu - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j, \mu} J_\mu^{ij} S_i^\mu S_j^\mu. \quad (3.15)$$

Como se demostró en el Capítulo 2, el estado separable

$$|\Theta\rangle = \otimes_{i=1}^N R_i(\theta_i, \phi_i) |\uparrow_i\rangle = | \nearrow \rightarrow \swarrow \searrow \rangle, \quad (3.16)$$

será un autoestado de  $H$  si se cumplen las EIC y las EDC. En este caso, las EIC (2.11)–(2.12) son

$$\begin{aligned} J_y^{ij} (\cos \phi_i \cos \phi_j - \cos \theta_i \sin \phi_i \cos \theta_j \sin \phi_j) &= J_x^{ij} (\cos \theta_i \cos \phi_i \cos \theta_j \cos \phi_j - \sin \phi_i \sin \phi_j) \\ &\quad + J_z^{ij} \sin \theta_i \sin \theta_j, \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$J_y^{ij} (\cos \theta_i \sin \phi_i \cos \phi_j + \cos \phi_i \cos \theta_j \sin \phi_j) = J_x^{ij} (\cos \theta_i \cos \phi_i \sin \phi_j + \sin \phi_i \cos \theta_j \cos \phi_j);$$

mientras que las EDC (2.17) resultan

$$\begin{aligned} h_z^i \sin \theta_i - \cos \theta_i (h_x^i \cos \phi_i + h_y^i \sin \phi_i) &= \sum_{j \neq i} S_j [\cos \theta_i \sin \theta_j (J_x^{ij} \cos \phi_i \cos \phi_j + J_y^{ij} \sin \phi_i \sin \phi_j) \\ &\quad - J_z^{ij} \sin \theta_i \cos \theta_j], \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$h_x^i \sin \phi_i - h_y^i \cos \phi_i = \sum_{j \neq i} S_j \sin \theta_j [-J_x^{ij} \sin \phi_i \cos \phi_j + J_y^{ij} \cos \phi_i \sin \phi_j].$$

Dado que las Ecs. (3.17)–(3.19) describen una amplia gama de escenarios, vamos a restringir nuestra atención a las soluciones uniformes y de tipo Néel, ya que estas últimas surgen naturalmente cuando el campo es uniforme<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Me tomaré la libertad de empezar por el caso de la solución uniforme para luego estudiar el caso

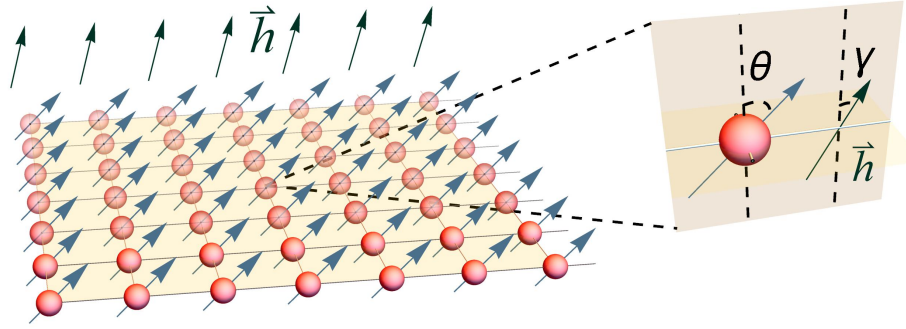


Figura 3-2: Representación esquemática de la solución uniforme.

### 3.2.1. Sobre la solución uniforme

Aquí se examinará la posibilidad de tener soluciones uniformes con  $\theta_i = \theta$  y  $\phi_i = \phi \forall i$  (Fig. 3-2); es decir, soluciones en las que  $|\Theta\rangle$  es un estado de máximo espín:  $|\langle \sum_i \mathbf{S}_i \rangle| = \sum_i s_i$ . Si bien este tipo de soluciones rompe con la invarianza de paridad, es evidente que preservan la invarianza traslacional; de modo que pueden ser autoestados no degenerados cuando el campo es *no transverso y uniforme*.

En este caso, la Ec. (3.19) resulta

$$(J_x^{ij} - J_y^{ij}) \cos \theta \sin 2\phi = 0, \quad (3.19)$$

e implica que si  $J_x^{ij} - J_y^{ij} \neq 0$  para al menos un par, entonces el vector de espín  $\langle \mathbf{S}_i \rangle$  debe ser *paralelo a un plano principal* ( $xz$  si  $\phi = 0$ ,  $yz$  si  $\phi = \pi/2$  y  $xy$  si  $\theta = \pi/2$ ). Nótese que esta situación se corresponde con uno de los casos del Lema 2 en que los vectores  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son linealmente dependientes (ver Sección 2.3.2).

Sin pérdida de generalidad, se puede suponer que  $\phi = 0$ ; ya que los otros casos son simples rotaciones de la presente elección. Si  $J_x^{ij} \neq J_z^{ij}$ , la EIC (3.18) es

$$\cos^2 \theta = \frac{J_y^{ij} - J_z^{ij}}{J_x^{ij} - J_z^{ij}} = \chi, \quad (3.20)$$

e implica *anisotropía  $\chi$  constante* para estos pares. Por el otro lado, cuando  $J_x^{ij} = J_y^{ij}$ ,

---

de solución tipo Néel.

la Ec. (3.18) conduce al caso isotrópico  $J_\mu^{ij} = J^{ij} \forall \mu$ . De (3.20) se sigue que

$$J_x^{ij} \geq J_y^{ij} \geq J_z^{ij} \quad \text{o} \quad J_x^{ij} \leq J_y^{ij} \leq J_z^{ij}. \quad (3.21)$$

Las Ecs. (3.20)–(3.21) implican que las constantes de acoplamiento  $J_\mu^{ij}$  pueden ser de la forma

$$J_\mu^{ij} = J^{ij} + r^{ij} J_\mu, \quad (3.22)$$

con los  $J_\mu$  tales que se cumpla (3.21). Así pues, el estado  $|\Theta\rangle$  depende solamente de  $\chi = \frac{J_y - J_z}{J_x - J_z}$ , y es *independiente del rango de la interacción* (que es determinado por  $J^{ij}$  y por  $r^{ij}$ ). Es importante resaltar que la Ec. (3.20) conduce a *cuatro posibles direcciones de alineación en el plano xz*, y que estas se corresponden con las soluciones  $\pm\theta$  y  $\pm(\pi - \theta)$ , con  $\theta \in (0, \pi/2)$ .

En el caso  $\phi = 0$ , la EDC (3.19) (o (2.17)) implica -en acuerdo con el Lema 3- que  $h_y^i = 0$ ; es decir, que el CF en cada sitio también *es paralelo al correspondiente plano principal (xz)*. La Ec. (3.18) es entonces

$$h_z^i \sin \theta - h_x^i \cos \theta = h_\perp^i, \quad (3.23)$$

con

$$h_\perp^i = \sin \theta \cos \theta \sum_{j \neq i} s_j (J_x^{ij} - J_z^{ij}). \quad (3.24)$$

Definiendo  $\mathbf{n}_\theta = \mathbf{n}_i = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$  y  $\mathbf{n}_\theta^\perp = (-\cos \theta, 0, \sin \theta)$ , las Ecs. (3.23)–(3.24) implican que el CF no transverso está dado por

$$\mathbf{h}_s^i = h_\parallel^i \mathbf{n}_\theta + h_\perp^i \mathbf{n}_\theta^\perp, \quad (3.25)$$

en completo acuerdo con (2.18), y donde  $h_\parallel^i$  es arbitrario. De esta forma, las Ecs. (3.24)–(3.25) dan lugar a una *familia de CF no transversos que se ubican sobre cuatro líneas rectas* (Fig. 3-3): una para cada dirección de alineación.

Es importante resaltar que el campo y la dirección de alineación *no pueden ser*

paralelos si  $h_{\perp}^i \neq 0$ . Esto se debe a que dada una dirección de alineación fija para el campo  $\mathbf{n}_{\gamma} = (\sin \gamma, 0, \cos \gamma)$ ; es decir,  $\mathbf{h}_s^i = h_s^i(\gamma)\mathbf{n}_{\gamma}$ , entonces las Ecs. (3.25) implican

$$h_s^i(\gamma) = \frac{h_{\perp}^i}{\sin(\theta - \gamma)}, \quad (3.26)$$

que diverge si  $\gamma \rightarrow \theta$ .

Para el caso de *campos transversos*  $\gamma = 0$ , la Ec. (3.13) permite recuperar los CF transversos (ver Sección 3.1.2) estudiados en las Refs. [89,91]

$$h_{zs}^i = h_s^i(0) = \frac{h_{\perp}^i}{\sin \theta}, \quad (3.27)$$

que son obviamente solución de (3.23) cuando  $h_x^i = 0$ . Así pues, también se puede expresar la Ec. (3.25) como

$$\mathbf{h}_s^i = h^i \mathbf{n}_{\theta} + h_{zs}^i \mathbf{n}_z, \quad (3.28)$$

donde  $\mathbf{n}_z = (0, 0, 1)$  y  $h^i = h_{\parallel}^i - h_{\perp}^i / \tan \theta$ . Así pues, también podemos interpretar al CF  $\mathbf{h}_s^i$  como la suma de un *CF transverso*  $\mathbf{h}_{zs}^i = h_{zs}^i \mathbf{n}_z$  más un campo *no transverso de magnitud arbitraria*  $h_i$  a lo largo de la dirección de alineación  $\mathbf{n}_{\theta}$ ; cuyo efecto es simplemente de cambiar la energía  $E_{\Theta}$ .

En sistemas con invarianza traslacional -ya sean cíclicos o infinitos- si  $s_i = s$  entonces  $h_{\perp}^i = h_{\perp} \forall i$ , que implican la existencia de un *CF uniforme*  $h_s(\gamma)$  apuntando a lo largo de una dirección de alineación  $\gamma$  fija (Lema 4). Sin embargo, las Ecs. (3.28)–(3.26) muestran que es posible obtener una solución uniforme *aún si el sistema no es invariante frente a traslaciones*, con la condición que el campo  $h_{\mu}^i$  en cada sitio pueda ser controlado independientemente. En particular, para cadenas abiertas o para sistemas con interacción de corto alcance, las solución uniforme requiere únicamente correcciones de campos en los bordes, mientras que para el resto del sistema se necesita un CF uniforme.

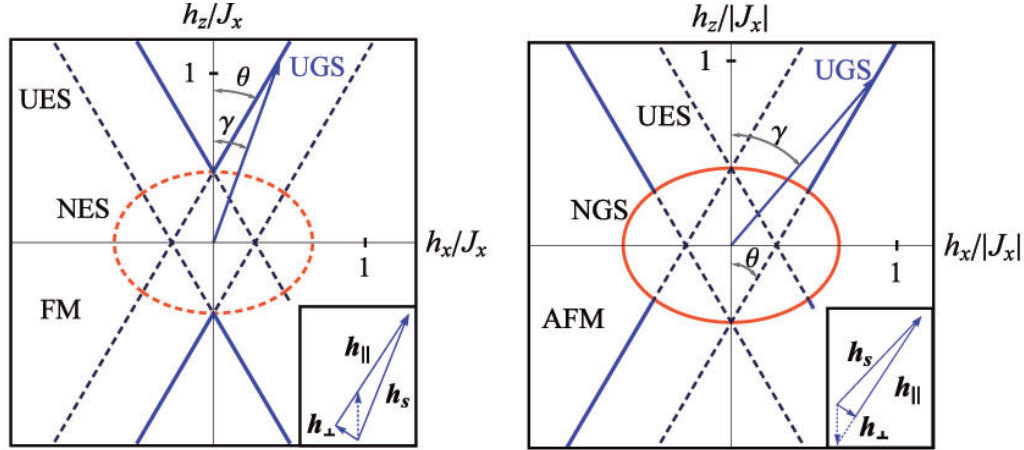


Figura 3-3: Campos factorizantes en cadenas XYZ con interacción ferromagnética (izquierda) y antiferromagnética (derecha) para campos en el plano principal  $xz$  del espacio de campos. Las líneas rectas sólidas corresponden a un GS separable uniforme (UGS) mientras que las líneas rectas discontinuas a estados excitados separables uniformes (UES). La elipse muestra los campos que dan lugar a un estado separable tipo Néel fundamental (NGS, línea sólida) o excitado (NES, línea discontinua). El gráfico fue realizado para  $J_z = 0$  y  $J_x > 0$  ( $< 0$ ) en el caso FM (AFM), con  $0 < J_y < J_x$ . Las flechas indican la dirección del campo externo aplicado, de modo que a medida que aumenta la intensidad del mismo aparecen uno (FM) o dos (AFM) campos factorizantes en el GS. Las direcciones de los campos  $\mathbf{n}_\gamma$  son claramente diferentes de la dirección de alineación de los espines  $\mathbf{n}_\theta$ . El recuadro muestra la descomposición (3.25) del campo factorizante que determina un UGS en cada diagrama, con la flecha punteada indicando los campos factorizantes transversos  $\mathbf{h}_{zs}$ .

### 3.2.2. Del estado fundamental uniforme

En esta sección se demuestra que el estado uniforme determinado anteriormente es efectivamente el estado fundamental del sistema. Para esta solución uniforme, la energía (2.21)  $E_\Theta = \langle \Theta_U | H | \Theta_U \rangle = - \sum_i \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{h}^i + \frac{1}{2} \sum_j \mathcal{J}^{ij} \langle \mathbf{S}_j \rangle \rangle$  es

$$E_\Theta = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} S_i S_j (J_x^{ij} - J_y^{ij} + J_z^{ij}) - \sum_i S_i h_\parallel^i \quad (3.29)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} S_i S_j (J_x^{ij} + J_y^{ij} - J_z^{ij}) - \sum_i S_i h_\parallel^i. \quad (3.30)$$

De esta ecuación (y en acuerdo con el Lema 1), es evidente que  $|\Theta_U\rangle$  será el GS si los campos paralelos  $h_\parallel^i \mathbf{n}_\theta$  -o equivalentemente  $h^i \mathbf{n}_\theta$ - a lo largo de la dirección de alineación son lo suficientemente intensos. Así pues, a medida que aumenta  $h_\parallel^i$  siempre

existirá una *transición* al estado fundamental uniforme (UGS) *tanto en sistemas FM como en sistemas AFM*. Antes de alcanzar dicha transición,  $|\Theta_U\rangle$  es un autoestado excitado. Este resultado -que se muestra en la Fig. 3-3 (transición de línea discontinua a línea sólida)- fue publicado en [1] y no había sido reportado previamente.

A continuación se demuestra que si la Ec. (3.20) se cumple, y si  $\forall i, j$ ,

$$J_x^{ij} \geq |J_y^{ij}|, \quad (3.31)$$

entonces esta transición ocurre precisamente *en el CF transverso*  $\mathbf{h}_{zs}^i$ ; es decir, que  $|\Theta\rangle$  será el GS  $\forall h_i \geq 0$  en (3.28) (panel izquierdo en la Fig. 3-3).

*Proof:* Si  $\phi_i = 0$  y  $\theta_i = \theta \forall i$ , entonces el estado separable se puede escribir como

$$|\Theta\rangle = \otimes_i \left( \sum_{k=0}^{2s_i} \binom{2s_i}{k}^{1/2} \cos^{2s_i-k} \frac{\theta}{2} \sin^k \frac{\theta}{2} |k_i\rangle \right), \quad (3.32)$$

donde  $S_i^z |k_i\rangle = (s_i - k) |k_i\rangle$ . Por su lado, la Ec. (3.31) implica que la interacción en  $H$  -en la base estándar  $\{\otimes_i |k_i\rangle\}$ - solo contiene términos no diagonales negativos o nulos<sup>2</sup>. Por lo tanto, en esta base siempre existe un GS con una expansión en la que todos los coeficientes son reales y del mismo signo (los coeficientes de distinto signo no pueden disminuir  $\langle H \rangle$ ). Sin embargo, tal GS no puede ser ortogonal a  $|\Theta\rangle$  si  $\theta \in (0, \pi)$  (que implica  $h^i \geq 0$  en (3.28) si  $h_x^i \geq 0$ ), de modo que debe coincidir con  $|\Theta\rangle$  cuando  $|\Theta\rangle$  es un autoestado exacto. El caso  $h_x^i \leq 0$  se puede reducir a la situación anterior por medio de una rotación de ángulo  $\pi$  al rededor del eje  $z$ , ya que esta última deja invariante al resto de  $H$ .

En el caso transverso, los estados  $|\Theta_U\rangle$  y  $|- \Theta_U\rangle = P_z |\Theta_U\rangle$  (que se obtienen si  $\theta = \pm|\theta|$ ) son exactamente degenerados (Ec. (3.30)). Así pues, como se discutió en la Sección 3.1.2, en el CF transverso  $\mathbf{h}_{zs}^i$  el estado fundamental está formado por el par de UGS  $|\pm \Theta_U\rangle$  cuando la Ec. (3.31) se cumple [89]. De esta forma, al aplicar campos paralelos a la dirección de alineación  $\mathbf{n}_\theta$  ( $\mathbf{n}_{-\theta}$ ) se rompe esta degeneración, dejando solamente a  $|\Theta_U\rangle$  ( $|- \Theta_U\rangle$ ) como el GS. En otras palabras, la transición al UGS se

<sup>2</sup>Este resultado se puede ver fácilmente escribiendo a  $H$  en término de los operadores escalera (1.58)  $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$ . A su vez, este argumento sigue siendo válido si  $h_y^i = 0$  y  $h_x^i \geq 0 \forall i$ .

da en  $\mathbf{h}_{zs}^i$ . □

Como se discutió en el Lema 1, el gap en la energía con el primer estado excitado se puede hacer arbitrariamente grande al aumentar la intensidad de los campos  $h_i$  (Ec. (3.30)). Similarmente, el caso  $J_z^{ij} \geq |J_y^{ij}| \forall i, j$  se puede reducir a la situación previamente discutida tras una rotación en  $\pi/2$  al rededor del eje  $y$ . Por lo tanto, en este caso la transición al UGS se da para campos transversos a lo largo del eje  $x$ ,  $h_{xs}^i = h_{\perp}^i / \cos \theta = h_{zs}^i \tan \theta$ .

### 3.2.3. Sobre la solución tipo Néel

Como se discutió en la Sección 3.1.1, para cadenas finitas las soluciones alternantes tipo Néel [34] surgen en puntos doblemente degenerados en los que se cruzan *dos estados invariantes traslacionales no separables*.

Sorprendentemente, este caso se corresponde con el discutido en la Sección 2.3.4, donde se demostró que los CF uniformes no transversos deben pertenecer a la superficie del elipsoide (2.36) dado por

$$\frac{h_{sx}'^2}{(J_x + J_y)(J_x + J_z)} + \frac{h_{sy}'^2}{(J_y + J_z)(J_y + J_x)} + \frac{h_{sz}'^2}{(J_z + J_x)(J_z + J_y)} = 1. \quad (3.33)$$

Así pues, se puede recuperar inmediatamente la condición determinada por Kurmann *et al.*. Por otro lado, proyectando sobre el plano  $xz$ , los CF  $\mathbf{h}'_s = h'_s(\gamma)\mathbf{n}_\gamma$  describen una elipse (Fig. 3-3), y son tales que

$$|h'_s(\gamma)|^2 = \frac{(J_x + J_z)(J_x + J_y)(J_z + J_y)}{(J_x + J_y) \cos^2 \gamma + (J_z + J_y) \sin^2 \gamma}. \quad (3.34)$$

Para cadenas de tipo FM, la solución tipo Néel existe pero es un estado excitado (NES, en el panel izquierdo en Fig. 3-3); mientras que en el caso AFM es un GS (NGS) que *coexiste* en el plano  $xz$  -de campos- con el UGS previamente estudiado (panel derecho). De hecho, el punto en el que la línea recta de la solución uniforme se cruza con el elipsoide ( $\mathbf{h}_s = \mathbf{h}'_s$ ) se corresponde precisamente con el punto en el que la solución uniforme deviene el GS (en este punto el NGS se convierte en uniforme y

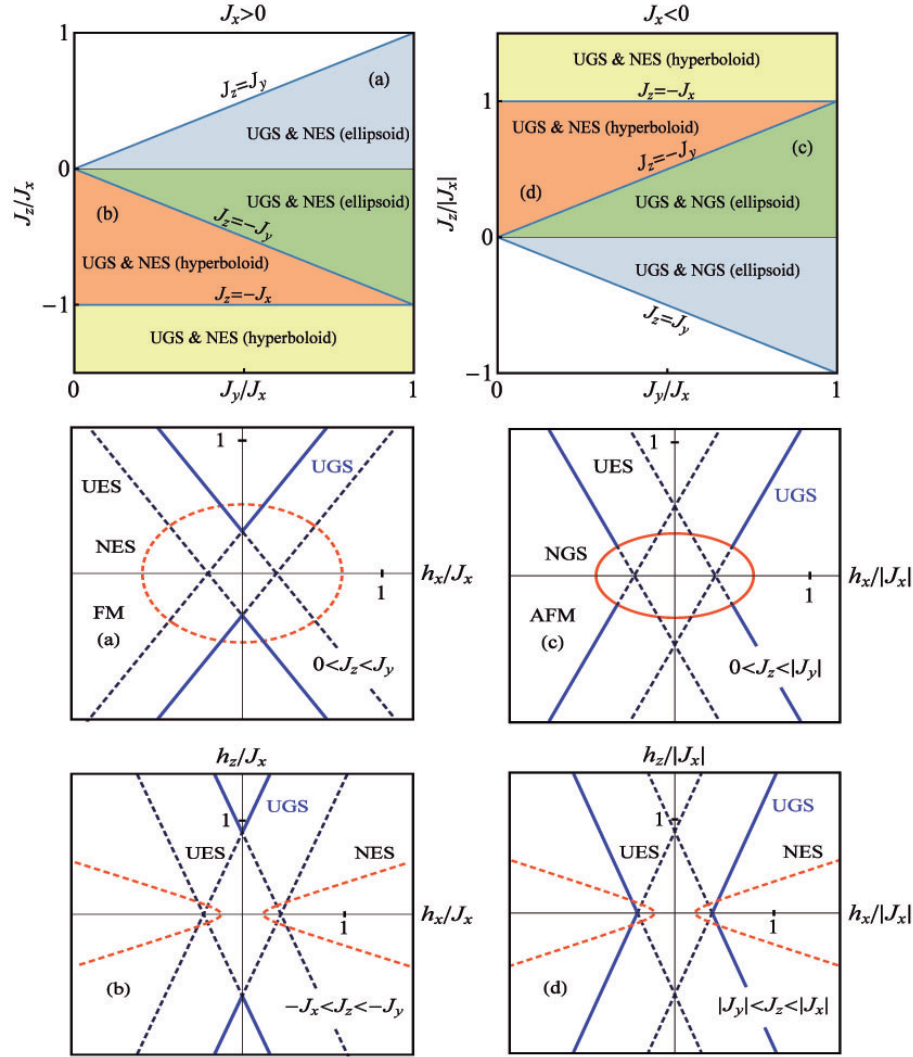


Figura 3-4: Diagramas de factorización (paneles superiores) y campos factorizantes (paneles centrales e inferiores) para acoplamientos de tipo XYZ que cumplan con la Ec. (3.21). En los paneles izquierdos (derechos) se tiene que  $J_x > 0$  ( $< 0$ ), y con  $J_y$  del mismo signo que  $J_x$ . Las diferentes combinaciones de los acoplamientos están indicadas (ver texto). Como se muestra en los paneles superiores e inferiores, para  $J_x < J_y < 0$ , el estado separable de tipo Néel deja de ser el GS cuando  $J_z \geq -J_y$ , aunque el estado separable uniforme sigue siendo el GS para campos adecuados. La Ec. (2.36) puede también determinar un hiperboloide cuando las constantes de acoplamiento tienen signos diferentes (paneles superiores e inferiores).

coincide con el UGS). Por lo tanto, dentro del primer cuadrante el UGS surge para campos externos con ángulos  $0 \leq \gamma < \theta$  en el caso FM, pero para  $\theta < \gamma \leq \gamma_m$  en el caso AFM, con

$$\tan \gamma_m = \frac{J_x + J_y}{J_y + J_z} \tan \theta. \quad (3.35)$$



Dentro de esta ventana, el GS de la cadena AFM presenta *dos campos factorizantes distintos* a medida que  $\mathbf{h}$  aumenta con un ángulo  $\mathbf{n}_\gamma$  fijo (panel derecho, Fig. 3-3).

Por otro lado, vale destacar que la Ec. (3.33) determina un *hiperboloide* cuando  $J_x$ ,  $J_y$  y  $J_z$  no tienen todos el mismo signo. Este resultado se muestra en la Fig. 3-4, donde todas las posibles combinaciones -no equivalentes- de constantes de acoplamiento se consideraron para el caso (3.21). Cuando  $|J_z|$  aumenta desde 0, los diagramas de la Fig. 3-2 son esencialmente los mismos si  $|J_z| < |J_y|$  (paneles centrales en 3-4) tanto para el caso FM puro como para el AFM puro (todos los acoplamientos del mismo signo). Este mismo comportamiento ocurre si  $J_z$  tiene signo diferente. Sin embargo, como se muestran en los paneles superiores e inferiores, cuando  $|J_z| > |J_y|$  (siempre que (3.21) se cumpla, como por ejemplo  $J_x < J_y < 0$  y  $J_z > -J_y$ ), el elipsoide se convierte en un hiperboloide y el estado de tipo Néel *deja de ser el GS* del sistema AFM original ( $J_x < J_y < 0$ ). No obstante, el autoestado separable uniforme sigue *siendo el GS tanto para  $J_x > 0$  como para  $J_x < 0$*  (líneas sólidas en los paneles inferiores). Sorprendentemente, este resultado sigue siendo válido cuando  $|J_z|$  aumenta más allá de  $|J_x|$  (paneles superiores). Para finalizar esta sección, cabe mencionar que los casos  $J_x > 0 > J_y > J_z$  y  $J_x < 0 < J_y < J_z$  son equivalentes a  $J_z > 0 > J_y > J_x$  y  $J_x > J_y > 0 > J_z$  (respectivamente), tras una rotación alrededor del eje  $y$ .

## Comentarios finales

En este capítulo hemos demostrado que las EIC y las EDC permiten determinar en forma analítica nuevos fenómenos como la emergencia del estado factorizado uniforme en las cadenas AFM. A su vez, se probó que la presencia de campos no transversos permite romper la simetría del Hamiltoniano y así obtener un GS completamente separable y no degenerado. En el siguiente capítulo se analizará en detalle el entrelazamiento, la magnetización y otras magnitudes en las cercanías de la factorización, en los sistemas FM y AFM considerados aquí.



# Capítulo 4

## Entrelazamiento y factorización en sistemas $XYZ$

*Hacerlo resultaba difícil, costoso, y era improbable que funcionara. Pero era posible, si alguien tenía interés en intentarlo.*

- Extracto de “*Parque Jurásico*” por M. Crichton.

En este capítulo se examinarán el entrelazamiento y otras medidas de correlaciones en la vecindad de los campos factorizantes (CF) no transversos de los sistemas tratados en el capítulo anterior. Cabe mencionar que el entrelazamiento en estos casos no había sido previamente analizado. Así pues, en las Secciones 4.1 y 4.2 se obtendrán resultados completamente analíticos para el entrelazamiento y otras cantidades en la inmediata vecindad de los campos factorizantes, y se demostrará que el entrelazamiento de pares tiene en este límite largo alcance. Luego, en 4.3 se presentarán resultados del entrelazamiento, entropía de bloques, espectro de entrelazamiento (es decir, el espectro de las matrices densidad reducidas) y la magnetización para cada caso estudiado. Finalmente, en la Sección 4.4 se realizará una breve discusión sobre la discordia cuántica y el déficit de información en estos sistemas. Cabe recordar que los estados reducidos de un par o grupo de espines obtenidos de un estado fundamental entrelazado son estados no puros, y por ende el entrelazamiento no captura la totalidad de las correlaciones cuánticas de esos estados. Se verá en particular que la

discordia puede exhibir un comportamiento distinto en las cercanías de factorización. Los resultados presentados en este capítulo fueron publicados en [1] y en [4].

## 4.1. Entrelazamiento en la vecindad del estado fundamental uniforme

En esta sección se estudiará el entrelazamiento en la vecindad del CF no transverso  $\mathbf{h}_s$  que conduce a un UGS. Por simplicidad se considera que el campo aplicado  $\mathbf{h}$  es uniforme y que el sistema de espines es invariante frente a traslaciones; de modo que la matriz densidad reducida de dos cuerpos  $\rho_{ij} = Tr_{\bar{i},\bar{j}}|GS\rangle\langle GS|$  (siendo  $Tr_{\bar{i},\bar{j}}$  la traza sobre el subsistema complementario) depende solamente de la separación entre los dos espines. Por lo general, este estado reducido será un estado mezcla cuando el estado fundamental  $|GS\rangle$  es entrelazado. Como se mencionó en el Capítulo 1, un estado mezcla es entrelazado si no se puede escribir como combinación convexa de estados producto  $\rho_i \otimes \rho_j$  [45] (ver Sección 1.2).

Dado un sistemas de espines 1/2, se obtiene mediante un tratamiento perturbativo que el GS en la vecindad del CF es

$$|GS\rangle \approx |\Theta_U\rangle + (\alpha \sum_i S_i^{-1} + \sum_{i,j} \beta_{ij} S_i^{-1} S_j^{-1} + \dots) |\Theta_U\rangle; \quad (4.1)$$

y por lo tanto, la matriz densidad reducida de dos espines  $i$  y  $j$  resulta en

$$\rho_{ij} \approx \begin{pmatrix} 1 & \alpha & \alpha & \beta_{ij} \\ \alpha & 0 & 0 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{ij} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + O(\delta h_{\perp}^2), \quad (4.2)$$

con  $\beta_{ij} \neq 0$ . A orden  $O(\delta h_{\perp})$ , la Concurrencia (1.37) del par es

$$C_{ij} \approx 2|\beta_{ij}| \propto |\delta h_{\perp}|. \quad (4.3)$$

La Ec. (4.3) implica que si bien  $C_{ij}$  toma valores finitos positivos en la vecindad del

CF  $\mathbf{h}_s$ , se anula linealmente cuando  $\mathbf{h} \rightarrow \mathbf{h}_s$ ; es decir, cuando el campo aplicado cruza la línea de factorización para una dirección dada  $\mathbf{n}_\gamma$ . A su vez, dado que el entrelazamiento de formación (1.35) [53] es una función convexa creciente de la Concurrencia, esta se anula como  $-C_{ij}^2 \log_2 C_{ij}^2$  cuando  $C_{ij} \rightarrow 0$ .

De la Ec. (4.2) se puede ver también que los autovalores de  $\rho_{ij}$  serán ya sea 1 (con correcciones negativas de  $O(\delta h_\perp^2)$ ) o pequeños ( $O(\delta h_\perp^2)$ ). Por lo tanto, la entropía  $S(\rho_{ij}) = -Tr \rho_{ij} \log_2 \rho_{ij}$  -que como se mencionó en el Capítulo 1 es una medida del entrelazamiento entre el par de espines y el resto del sistema- se anulará como  $O(\delta h_\perp^2 \log_2 \delta |h_\perp|)$  cuando  $\mathbf{h} \rightarrow \mathbf{h}_s$ . Evidentemente, en la vecindad de  $\mathbf{h}_s$  se observará este mismo comportamiento para la entropía de un solo espín  $S[\rho(1)]$ . Aquí se define  $\rho(1) = \rho_i = Tr_j \rho_{ij}$  como la matriz densidad reducida de un sitio, mientras que  $\rho(m)$  indica la matriz reducida de  $m$  espines contiguos. Cabe remarcar que la factorización puede ser detectada directamente a través del espectro de entrelazamiento [47, 48], es decir, por los autovalores de la matriz densidad reducida  $\rho(m)$ : en el CF ( $\mathbf{h} = \mathbf{h}_s$ ),  $\rho(m)$  tendrá solamente un autovalor no nulo  $p_1 = 1$ , mientras que en la vecindad de la factorización el resto de sus autovalores serán pequeños y  $O(\delta h_\perp^2)$ .

#### 4.1.1. Entrelazamiento en la vecindad del campo factorizante transverso

Como ya se ha mencionado, sobre las líneas de factorización (cuando el UGS es no degenerado, Fig. 3-4) el GS es completamente separable y por lo tanto  $C_{ij} = 0 \forall i, j$ . Sin embargo, en la vecindad del CF transverso ( $\mathbf{h} = h\mathbf{n}_z$ ) el comportamiento de  $C_{ij}$  es diferente al descrito anteriormente puesto que el GS es doblemente degenerado [89]. No obstante, siempre se pueden determinar los límites laterales del GS que tengan paridad bien definida cuando  $\mathbf{h} \rightarrow \mathbf{h}_{zs}^\pm$ . Así pues, los estados entrelazados

$$|\Theta_U^\pm\rangle = \frac{|\Theta_U\rangle \pm |-\Theta_U\rangle}{\sqrt{2(1 \pm \langle -\Theta_U | \Theta_U \rangle)}} \quad (4.4)$$

con  $|-\Theta_U\rangle = P_z |\Theta_U\rangle$  son los *límites laterales del GS*. Estos estados conducen a límites laterales *comunes*  $C_\pm$  en la Concurrencia  $C_{ij}$  de cualquier par  $i \neq j$ . Para  $s = 1/2$ ,

estos límites son [89]

$$C^\pm = \left| \frac{\sin^2 \theta \cos^{N-2} \theta}{1 \pm \cos^N \theta} \right|, \quad (4.5)$$

con  $N$  el número de espines y  $\cos \theta$  determinado por (3.20); a su vez  $\langle -\Theta_U | \Theta_U \rangle = \cos^n \theta$ . Por ende, para cadenas finitas ( $N$  finito),  $C_{ij}$  presentará una pequeña discontinuidad cuando el campo transversal  $\mathbf{h}$  pasa por  $\mathbf{h}_{zs}$ , reflejando así el cambio de paridad del GS en la factorización.

## 4.2. Entrelazamiento en la vecindad del estado fundamental de Néel

En el capítulo pasado (Sección 3.1.2) se resaltó el hecho que tanto el UGS a campo transversal como el NGS comparten la propiedad de ser ambos doblemente degenerados en la factorización; de modo que no debe ser sorprendente que los límites laterales de  $C_{ij}$  de la Ec. (4.5) sigan siendo válidos para cadenas antiferromagnéticas. En este caso, cualquier GS exacto de la cadena cíclica AFM en un campo uniforme debe preservar la invarianza traslacional. Así pues, cuando  $\mathbf{h} \rightarrow \mathbf{h}'_s$  el GS se acerca a los límites laterales (que preservan la invarianza traslacional)

$$|\Theta_N^\pm\rangle = \frac{|\Theta_N\rangle \pm |-\Theta_N\rangle}{\sqrt{2(1 \pm \langle -\Theta_N | \Theta_N \rangle)}}, \quad (4.6)$$

donde  $|\Theta_N\rangle = |\theta_1\phi_1, \theta_2\phi_2, \dots\rangle$  y  $|-\Theta_N\rangle = |\theta_2\phi_2, \theta_1\phi_1, \dots\rangle = T|\Theta_N\rangle$  denotan los estados separables tipo Néel que están degenerados en el CF  $\mathbf{h}'_s$  ( $T$  indica el operador de traslación (3.2)). Evidentemente estos estados tienen la misma forma que (4.4) y por lo tanto para cualquier par de espines  $i, j$  conducen a la Concurrencia

$$C^\pm = \left| \frac{\sin^2 \theta' \cos^{N-2} \theta'}{1 \pm \cos^N \theta'} \right|, \quad (4.7)$$

donde  $\theta'$  es igual a la mitad de la diferencia entre los ángulos alternantes en la solución

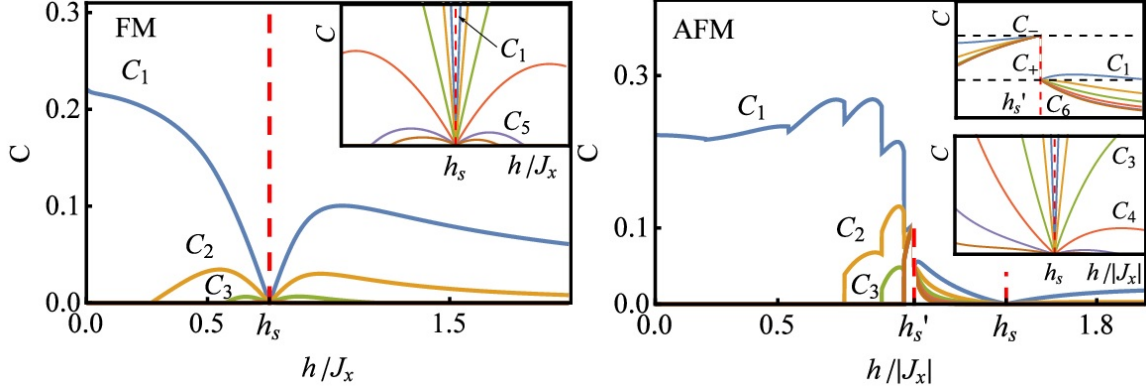


Figura 4-1: Concurrencia  $C_l$  entre los espines  $i$  e  $i + l$  en cadenas finitas de espines  $1/2$  con interacción  $XY$  ( $J_z = 0$ ;  $\chi = J_y/J_x = 1/2$ ) FM (izquierda) y AFM (derecha). La abscisa indica la magnitud del campo no transversal  $h = |\mathbf{h}|$  con orientación fija  $\mathbf{n}_\gamma = (\sin \gamma, \cos \gamma)$  en el plano principal  $xz$  tal que  $\gamma = 0,02\pi$  (FM) y  $0,36\pi$  (AFM). Para estas orientaciones hay un solo campo factorizante no transversal  $|\mathbf{h}_s| \approx 0,76J_x$  (Ec. (3.26)) en el caso FM (que determina un UGS); y dos campos factorizantes en el caso AFM:  $|\mathbf{h}'_s| \approx 1,06J_x$  (Ec. (3.34)) y  $|\mathbf{h}_s| \approx 1,43J_x$ , que corresponden al NGS y UGS, respectivamente. Los recuadros muestran en detalle la vecindad de los CF, donde se puede observar que todos los  $C_l$  se anulan linealmente en  $\mathbf{h}_s$  (Ec. (4.3)) y que  $\forall l$  se aproximan a límites laterales (4.7) en  $\mathbf{h}'_s$ . En la vecindad de cualquier CF todos los pares de espines están entrelazados; y este comportamiento se mantiene entre ambos CF para el caso AFM considerado. Todos los ejes son adimensionales.

tipo Néel si  $|\gamma| < \gamma_m$  (Ec. (3.35))

$$\cos^2 \theta' = \frac{(J_z + J_y)(J_x + J_y)}{J_x + J_z} \frac{(J_x + J_y) \cos^2 \gamma + (J_z + J_y) \sin^2 \gamma}{(J_x + J_y)^2 \cos^2 \gamma + (J_z + J_y)^2 \sin^2 \gamma}, \quad (4.8)$$

mientras que  $\cos^2 \theta'$  está dado por la inversa de (4.8) si  $\gamma_m < \gamma < \pi - \gamma_m$ . Por lo tanto, para cadenas pequeñas estos límites laterales serán diferentes y la Concurrencia tendrá una discontinuidad sobre el elipsoide de factorización (ver el panel superior derecho en la Fig. 4-1).

Si bien para espines generales  $s > 1/2$  la Concurrencia no es aplicable, en este caso podemos -sorprendentemente- extender la Ec. (4.7). Esto último se debe a que si consideramos el estado reducido  $\rho_{ij}^\pm$  que surge de los estados degenerados  $|\Theta_N^\pm\rangle$ , entonces el subespacio que genera el GS es bidimensional y los estados de un solo sitio  $|\Theta_{Ni}^\pm\rangle, |\Theta_{Nj}^\pm\rangle$  se comportan como qubits efectivos (ver por ejemplo [89]). La expresión generalizada se obtiene al reemplazar  $\cos \theta' \rightarrow \cos^{2s} \theta'$  y  $\sin^2 \theta' \rightarrow 1 - \cos^{4s} \theta'$  en (4.7).

Similarmente, los límites laterales del estado reducido  $\rho^\pm(m)$  de  $m$  espines se puede obtener directamente a partir de los límites laterales del GS completo (4.6). Así pues, se obtendrán estados mixtos de rango 2 de la forma

$$\rho^\pm(m) = \frac{|\Theta_N^m\rangle\langle\Theta_N^m| + |-\Theta_N^m\rangle\langle-\Theta_N^m| \pm (|\Theta_N^m\rangle\langle-\Theta_N^m| \langle-\Theta_N^{n-m}|\Theta_N^{n-m}\rangle + h.c.)}{2(1 \pm \langle-\Theta_N|\Theta_N\rangle)}, \quad (4.9)$$

donde  $|\pm\Theta_N^m\rangle$  indica al estado reducido de  $m$  espines en los estados de Néel  $|\pm\Theta_N\rangle$  y donde  $\langle-\Theta_N|\Theta_N\rangle = \cos^N \theta'$ ,  $\langle-\Theta_N^m|\Theta_N^m\rangle = \cos^m \theta'$ , con  $\cos^2 \theta'$  dado por (4.8) para  $|\gamma| < \gamma_m$ . Los autovalores exactos de  $\rho^\pm(m)$  son  $p_m^\pm$  y  $1 - p_m^\pm$ , con

$$p_m^\pm = \frac{(1 + \cos^m \theta')(1 \pm \cos^{N-m} \theta')}{2(1 \pm \cos^N \theta')}. \quad (4.10)$$

Sorprendentemente, estos límites laterales son *independientes* de la elección de los  $m$  espines, es decir, son los mismos para  $m$  espines contiguos o separados. Este mismo comportamiento se observa en el UGS para campos transversos [89]. Así pues, los límites laterales para la entropía de entrelazamiento  $S[\rho(m)]$  en  $\mathbf{h}'_s$  son

$$S[\rho^\pm(m)] = -p_m^\pm \log_2 p_m^\pm - (1 - p_m^\pm) \log_2 (1 - p_m^\pm). \quad (4.11)$$

Para valores de  $m$  suficientemente grandes ( $m \leq n/2$ ) la superposición  $\langle-\Theta_N^m|\Theta_N^m\rangle$  se anula y  $p^\pm \rightarrow 1/2$ , lo que a su vez implica  $S[\rho^\pm(m)] \rightarrow 1$ . Cuando  $m = 2$ , de (4.9) se recuperan los límites laterales del estado reducido de cualquier par, mostrando así que los límites laterales de la Concurrencia (4.7) son independientes de la distancia que separa los espines.

### 4.3. Resultados de Concurrencia, entropía de bloque y magnetización

En las Figs. 4-1 a 4-3 se muestran resultados ilustrativos para la Concurrencia, entropía de bloque y magnetización de una cadena cíclica de espines 1/2 con interacción XY  $\chi = J_y/J_x = 1/2$  (y  $J_z = 0$ ) FM (izquierda) y AFM (derecha) de primeros vecinos inmersos en campos no transversos, donde los resultados previamente discutidos pue-



den ser claramente observados y verificados. Los resultados numéricos se obtuvieron mediante una diagonalización exacta pues la fermionización de Jordan-Wigner [98] es solo válida para campos transversos [90]. Todas las cantidades fueron graficadas en función de la magnitud escalizada del campo magnético no transverso  $|\mathbf{h}|/J_x$  para una orientación fija en el plano  $xz$  ( $\gamma = 0,04\pi/2$  en el caso FM, y  $\gamma = 0,72\pi/2$  para el AFM). Para estas orientaciones del campo hay un solo CF no transverso  $\mathbf{h}_s$  en el caso FM que determina un UGS; mientras que para el AFM hay dos campos factorizantes, el primero en  $\mathbf{h}'_s$  que da lugar a un NGS y el segundo en  $\mathbf{h}_s$  asociado a un UGS.

### 4.3.1. Concurrencia de pares en cadenas XY

En la Fig. 4-1 se puede verificar que si bien para campos pequeños solo la Concurrencia de primeros vecinos  $C_1$  es no nula para ambos casos FM y AFM, *todas las Concurrencias son no nulas* en la proximidad de los CF. Además, como se puede ver en los recuadros, en la vecindad de  $\mathbf{h}_s$  su comportamiento está bien descrito por la Ec. (4.3), ya que las Concurrencias se anulan linealmente con  $|\mathbf{h} - \mathbf{h}_s|$  para  $\mathbf{h} \rightarrow \mathbf{h}_s$  ( $\beta_{ij} \propto \delta h_{\perp} \eta^{-|i-j|}$  ( $\eta > 1$ ) en el caso mostrado en la Fig. 4-1, y cambia de signo cuando  $\mathbf{h}$  cruza  $\mathbf{h}'_s$ ). Por el otro lado, para el caso AFM se verifica que en  $\mathbf{h}'_s$  todas las  $C_l$  alcanzan límites laterales comunes (4.7) que son independientes de la distancia  $l$  entre espines (aquí,  $\cos \theta' = 0,92$  y  $C^- = 0,11$ ,  $C^+ = 0,049$ ). Sorprendentemente, a medida que el campo aumenta en magnitud (con orientación  $\theta < \gamma < \gamma_m$ ) el sistema presenta dos CF, y esto conlleva a una zona intermedia (entre  $\mathbf{h}'_s$  y  $\mathbf{h}_s$ ) con entrelazamiento de pares de largo alcance. Cabe remarcar que si bien los límites laterales de  $C^{\pm}$  en  $\mathbf{h}'_s$  disminuyen a medida que el número  $N$  de espines aumenta, las Concurrencias  $C_l$  *siempre* tendrán valores finitos en la vecindad de ambas factorizaciones  $\mathbf{h}'_s$  y  $\mathbf{h}_s$ .

### 4.3.2. Entropía de bloque

En la Fig. 4-2 se muestra la entropía de entrelazamiento de un bloque de  $m$  espines continuos<sup>1</sup>. Primero, se verifica que la entropía de bloques se anula cuadráticamente

<sup>1</sup>Cabe mencionar que esta entropía había sido estudiada en cadenas de espines con interacción XY y XYZ solamente para campos nulos o para campos *transversos* [19, 47, 97, 99], incluyendo

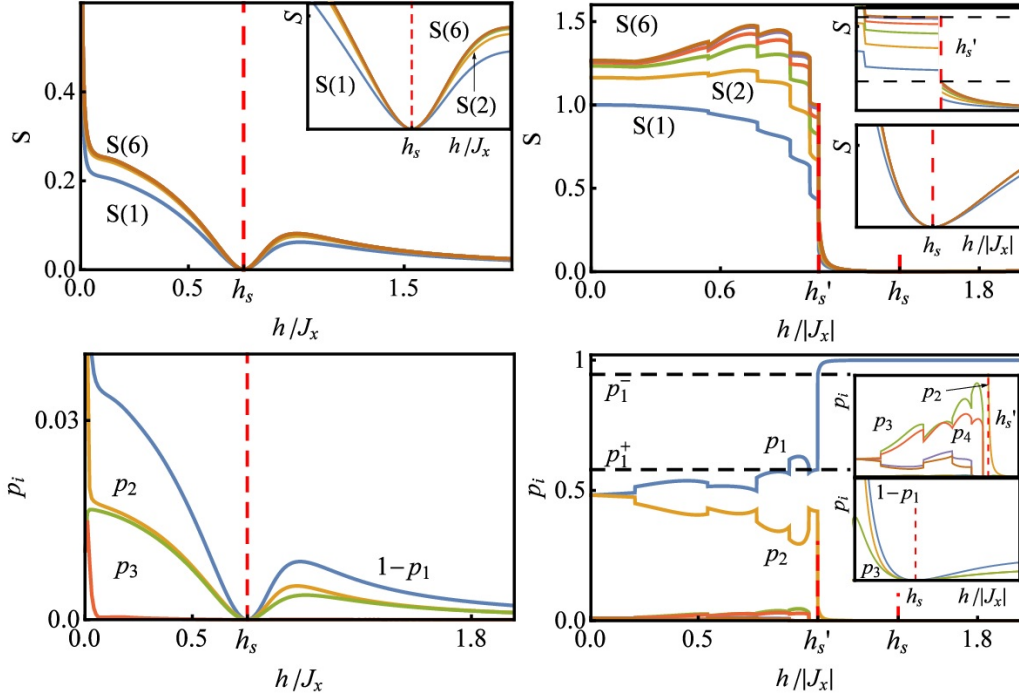


Figura 4-2: Entropía de bloque  $S(m) = S[\rho(m)]$  de  $m$  espines contiguos (arriba) y autovalores  $p_i$  (espectro de entrelazamiento, abajo) de la matriz densidad correspondiente  $\rho(m)$  para  $m = 5$  en los mismos sistemas FM (izquierda) y AFM (derecha) que la Fig. 4-1. En  $h_s$  (UGS),  $S(m)$  y todos los  $p_i$  menos uno ( $p_1$ ) se anulan; mientras que para  $h \rightarrow h'_s$  (NGS)  $S(m)$  se aproxima a los límites laterales (4.11) (indicados para  $m = N/2$ ), y solo dos autovalores  $-p_1$  y  $p_2^-$  son no nulos ( $p_1$  se aproxima a los límites laterales indicados). Recuadro: detalles en la vecindad de los CF.

en la vecindad de  $h_s$ ; mientras que en el caso AFM se aproxima a los límites laterales analíticos (4.11)–(4.10) en el punto de factorización  $h'_s$  que determina un NGS (aquí  $S[\rho(m)^+] = 0,31$ ,  $S[\rho(m)^-] = 1$  para  $m = n/2$ ; y cabe remarcar que  $p_m^- = 1/2$  para  $m = n/2 \forall n$ ). Luego, para interacción FM, estas entropías saturan rápidamente -a campo fijo- a medida que  $m$  aumenta; en cambio, para el caso AFM si bien por encima de  $|h_s|$  son pequeñas ( $< 0,01$ ) y saturan rápido, por debajo de  $|h'_s|$  son grandes y dependen del tamaño del bloque.

### 4.3.3. Espectro de entrelazamiento

Como se discutió en la Sección 1.3.3, el comportamiento de las entropías de bloque se puede entender mejor a través del espectro de entrelazamiento (fila inferior de la también las entropías de Renyi [47, 100, 101]

Fig. 4-2, donde se muestran los autovalores  $p_i$  de  $\rho(m)$  para  $m = 5$ )<sup>2</sup>. En el caso FM hay tres autovalores dominantes, con  $p_1$  cercano a 1; mientras que el comportamiento de  $p_2$  y  $p_3$  es parecido al de  $S(m)$ : todos los autovalores excepto  $p_1$  se anulan -cuadráticamente- en  $\mathbf{h}_s$ . Sin embargo, para el caso AFM se muestra que si  $|\mathbf{h}| < |\mathbf{h}'_s|$ , tanto  $p_1$  como  $p_2$  son significativos y comparables, indicando que el estado reducido es aproximadamente un estado de rango 2. Cuando  $\mathbf{h} \rightarrow \mathbf{h}'_s^\pm$ ,  $\rho(m)$  deviene *exactamente* un estado de rango 2, ya que solamente  $p_1$  y  $p_2$  son no nulos; en acuerdo con las Ecs. (4.9) y (4.10). Este comportamiento es similar al observado en [47]. Como era de esperarse, las transiciones del GS en este sector se observan claramente en la entropía de bloque y el espectro de entrelazamiento. Finalmente, para  $|\mathbf{h}| > |\mathbf{h}'_s|$  el comportamiento es similar al caso FM, ya que solamente hay tres autovalores dominantes, con  $p_1$  mucho mayor al resto. Por otro lado, todos los autovalores excepto  $p_1$  se anulan en el segundo CF  $\mathbf{h}_s$ .

Vale la pena remarcar que para campos nulos, cualquier medida de entrelazamiento en una cadena XY será exactamente la misma en los casos FM y AFM, ya que los Hamiltonianos correspondientes pueden ser transformados el uno en el otro a través de rotaciones locales en los sitios impares en ángulo  $\pi$  al rededor del eje  $z$ ; y esto último no afecta las medidas de correlaciones. Este hecho explica entonces el pronunciado incremento en la entropía de bloques en el caso FM a medida que el campo se anula, ya que en este límite deben coincidir con las entropías del AFM (que son de mayor magnitud). Evidentemente, esta simetría no se mantiene para campos finitos que no apunten en la dirección del eje  $z$ .

#### 4.3.4. Magnetización

Sorprendentemente, para sistemas con  $s = 1/2$  e invarianza traslacional la magnetización escalizada  $m = 2|\mathbf{M}|/N$  -con  $\mathbf{M} = \langle \sum_i \mathbf{S}_i \rangle$  la magnetización total- puede ser utilizada como un testigo de entrelazamiento; ya que la magnitud  $1 - m$  es efectivamente una medida del *entrelazamiento* de un espín con el resto de la cadena (es decir, de que tan mezclado está el estado reducido del espín). De hecho,  $m = 0$  (1)

<sup>2</sup>Los resultados para otros  $m$  son similares.

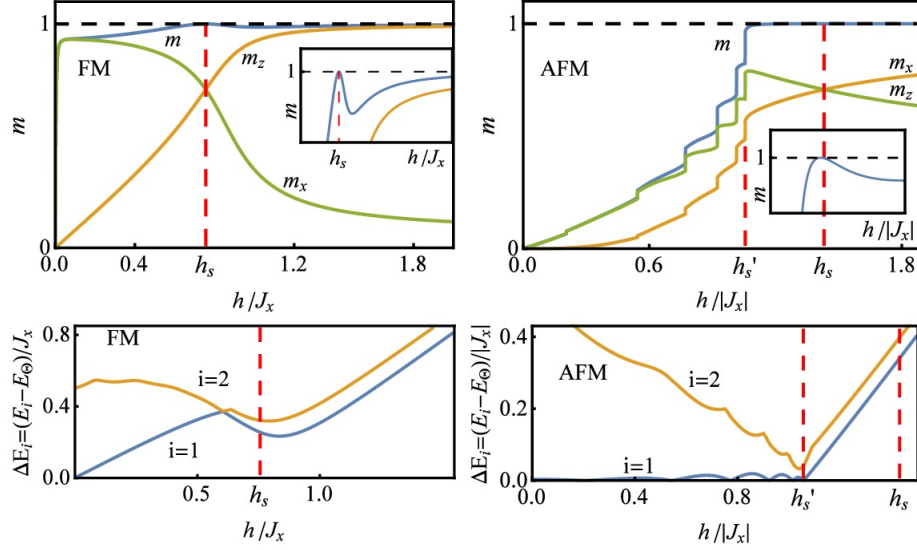


Figura 4-3: Magnetización escalizada  $m_\mu = \sum_i 2\langle S_i^\mu \rangle / N$  y  $m \equiv |\mathbf{m}|$  (arriba); y gap escalizado entre la energía del GS y la de los primeros dos estados excitados (abajo) en los mismos sistemas FM (izquierda) y AFM (derecha) que la Fig. 4-1. Como se muestra en los recuadros, en el CF no transverso  $\mathbf{h}_s$  se obtiene  $m = 1$  (UGS). El gap en la energía muestra que el UGS se puede alejar del primer excitado a medida que aumenta la magnitud del campo, mientras que el NGS es doblemente degenerado. Todos los ejes son adimensionales.

implica entrelazamiento espín-resto máximo (nulo). Por lo tanto, como se puede verificar en la Fig. 4-3, se obtiene  $m = 1$  en el CF no transverso  $\mathbf{h}_s$ , y esto implica un *comportamiento no monótono de  $m$  a medida que aumenta el campo* (ver el recuadro). Para verificar que este comportamiento no surja por efectos de sistemas finitos, se estudiaron sistemas de mayor tamaño, donde este comportamiento no monótono también persiste. Por lo tanto, a través de una medida de  $\mathbf{M}$  -o de la susceptibilidad asociada- como función del campo aplicado, sería posible determinar el CF no transverso  $\mathbf{h}_s$ .

#### 4.3.5. Gap entre el GS y el primer estado excitado

En los paneles inferiores se puede observar que el UGS en  $\mathbf{h}_s$  es no degenerado y está bien separado del primer estado excitado, mientras que el NGS en  $\mathbf{h}'_s$  es doblemente degenerado. De hecho, como se puede apreciar en el gap o en la magnetización, el FM no presenta transiciones en el GS, pero en el caso AFM hay  $N/2$  transicio-

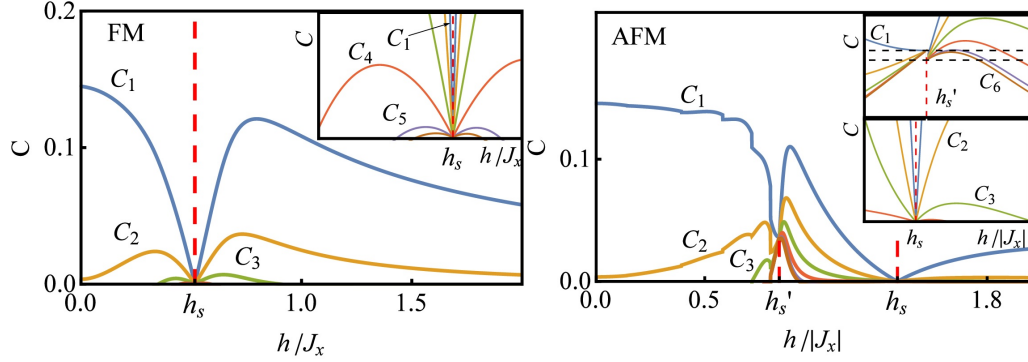


Figura 4-4: Concurrencia  $C_l$  entre los espines  $i$  e  $i+l$  en cadenas finitas de espines  $1/2$  con interacción  $XYZ$  ( $J_z = 0,25|J_x|$ ;  $J_y/J_x = 1/2$ ) y  $J_x > 0$  ( $J_x < 0$ ) en los paneles izquierdo (derecho). La orientación del campo magnético es la misma que para las Figs. 4-1-4-3. Los campos factorizantes están ahora en  $|\mathbf{h}_s| \approx 0,52J_x$  para el caso FM; y  $|\mathbf{h}_s| \approx 1,06J_x$ ,  $|\mathbf{h}'_s| \approx 0,84J_x$  para el caso AFM. Se verifica que los límites laterales de  $\mathbf{h}'_s$  son (4.5), y que todas las Concurrencias se anulan linealmente en  $\mathbf{h}_s$ .

nes del GS a medida que  $|\mathbf{h}|$  aumenta con orientación  $\gamma$  fija (nótese que la última transición coincide con  $\mathbf{h}'_s$ ). Estas últimas son transiciones de “paridad de traslación”  $|GS^\pm\rangle \rightarrow |GS^\mp\rangle$ , con  $|GS^\pm\rangle$  estados invariantes traslacionales ( $T|GS^\pm\rangle = \pm|GS^\pm\rangle$ ). Estas transiciones son, de hecho, similares a las observadas en sistemas FM y AFM con campos transversos [47, 89–91]; con la diferencia que en esos casos están relacionadas con transiciones de paridad de espín [89–91] que terminan en el CF transverso. Por lo tanto,  $\mathbf{h}'_s$  representa para sistemas finitos en campos no transverso un *campo crítico* que indica el pasaje a un régimen distinto.

### Concurrencia de pares en cadenas XYZ

Finalmente, en la Fig. 4-4 se muestran resultados de la Concurrencia de pares en una cadena con interacción  $XYZ$  ( $J_z \neq 0$ ). Vale la pena recordar que este sistema no puede ser mapeado a un problema de fermiones independientes, ni siquiera cuando el campo es transverso [98, 101]. Para este estudio se fijó  $J_z = 0,2|J_x|$  en ambos casos FM ( $J_x > J_y > 0$ ) y AFM ( $J_x < J_y < 0$ ); mientras que las orientaciones del campo son las mismas que las utilizadas previamente. Evidentemente, el comportamiento es similar al observado en la Fig. 4-1, con las transiciones de paridad aún presentes en el caso AFM. Resalta a la vista sin embargo el hecho que los valores de  $C_l$  son mayores a

los observados previamente, y que los límites laterales en  $\mathbf{h}'_s$  para el caso AFM están más cercanos entre ellos (ahora  $C^- \approx 0,036$  y  $C^+ \approx 0,032$ ) debido al valor distinto en la anisotropía  $\chi$ . Para campos nulos se sigue cumpliendo que los valores de las medidas de entrelazamiento son las mismas para FM y para AFM. Finalmente, es importante resaltar que para este caso, los resultados para la entropía de bloque y para el espectro de entrelazamiento son similares a los presentados previamente.

## 4.4. Discordia cuántica y déficit de información

En esta sección se estudiará la discordia cuántica y el déficit de información en cadenas XY con interacción FM en campos transversos y no transversos.

**Campos transversos.** En este caso el GS es doblemente degenerado (dado por  $|\Theta\rangle = |\theta, \dots, \theta\rangle$  y  $|\Theta\rangle = |-\theta, \dots, -\theta\rangle$ ) y sus límites laterales son (4.4). Así pues, los estados reducidos son comunes  $\rho_\theta^\pm$  para cualquier par  $i \neq j$ . Sin embargo, cuando el overlap  $\langle \Theta | \Theta \rangle = \cos^N \theta$  es despreciable (es decir, cuando  $N$  o  $\theta$  no son pequeños), entonces ambos límites laterales convergen y  $\rho_\theta = (|\theta\rangle\langle\theta| + |-\theta\rangle\langle-\theta|)/2$ . Si bien  $\rho_\theta$  es un estado mezcla separable -cuya concurrencia será nula- su discordia es *no nula* (ver Sección 1.5.1). Así pues, como se muestra en la Fig. 4-5, la discordia cuántica y el déficit de información tienen *límites laterales finitos* en el CF  $h_{sz}$ , que pueden ser determinados analíticamente [94] y son independientes de  $L$ . A su vez, la discordia y los déficit de información presentados alcanzan su máximo en la vecindad del CF, y siguen presentando valores apreciables para todo  $h_z < h_{zs}$  dado que en este sector el estado reducido de cualquier par será esencialmente  $\rho_\theta$ .

Por otro lado, como se puede ver en la Fig. 4-5 si bien la discordia cuántica  $D$  y el déficit de información  $I_1$  presentan un comportamiento similar;  $I_1$  tiene un máximo pronunciado que refleja la transición en la dirección de la medida local que la minimiza (en este caso  $D$  no presenta transición en la medida minimizante ya que esta está siempre a lo largo del eje  $x$ ). Esta transición se relaciona con el cambio de autovalor dominante en la matriz densidad reducida y por lo tanto con el cambio de tipo de entrelazamiento [102]. Por su lado, la medida que minimiza a  $I_1$  presenta una

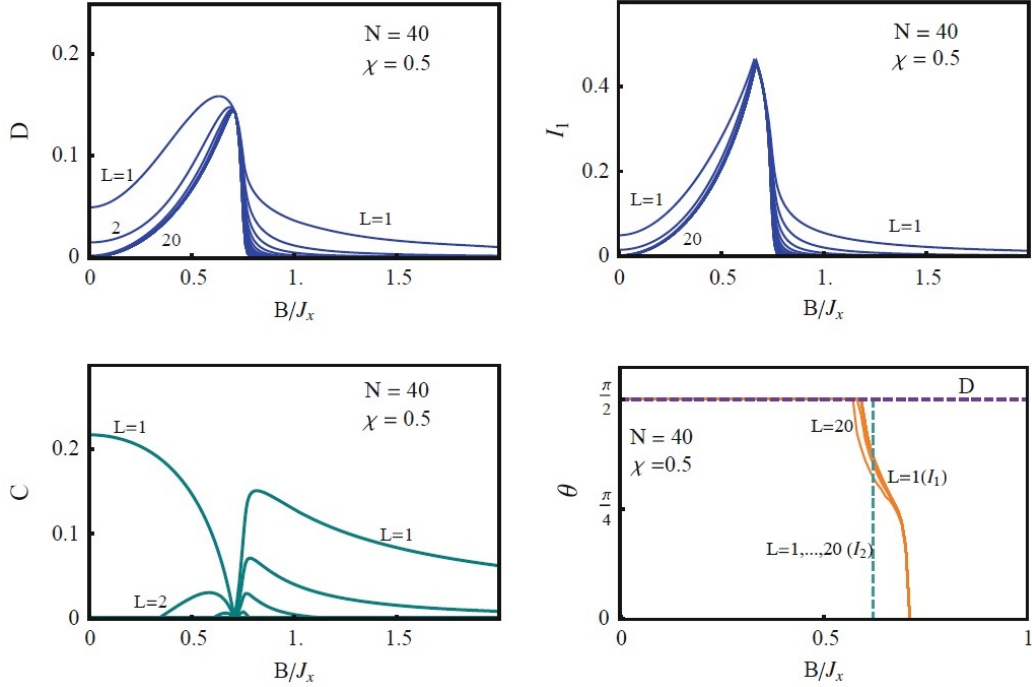


Figura 4-5: Discordia cuántica (panel superior izquierdo), déficit de información (superior derecho), Concurrencia (inferior izquierdo) y el ángulo  $\theta$  que determina la medida de espín que minimiza estas cantidades (inferior derecho) para el estado reducido de una cadena de espines  $1/2$  con interacción de primeros vecinos tipo  $XY$  en función del campo transversal aplicado ( $B = h_z$ ).  $L$  indica la separación entre los espines ( $L = 1$  para primeros vecinos) mientras que  $N$  es el número de espines, y  $\chi = J_y/J_x$  indica la anisotropía. El ángulo  $\theta$  se mide en el plano  $xz$  a partir de la dirección positiva del eje  $z$ , y se puede ver que es constante para  $D$  ( $\theta = \pi/2$ ) pero experimenta una transición  $x \rightarrow z$  para el déficit de información  $I_1$  (línea sólida) y  $I_2$  (línea punteada) -en este último caso la transición es abrupta. Todas estas cantidades alcanzan rango completo en el CF transversal  $B = h_{zs}$ . La discordia y los déficit de información presentan límites laterales finitos, comunes e independientes de  $L$ ; mientras que para la Concurrencia estos límites laterales son despreciables.

transición suavizada que recorre todos los valores intermedios en una región centrada alrededor del valor de transición de  $I_2$ .

**Campos no transversos.** Para interacción FM y campos no transversos, la cadena tiene un CF  $\mathbf{h}_s$  que determina un UGS no degenerado en el que la discordia  $D$  y el entrelazamiento de formación  $E_f$  se anulan exactamente. De hecho, como se muestra en la Fig. 4-6, para primeros vecinos el par reducido está mucho menos mezclado y eso implica que  $E_f$  y  $D$  tengan valores parecidos, con  $E_f$  levemente inferior a  $D$ . Para segundos vecinos, el comportamiento de  $D$  es cualitativamente similar pero

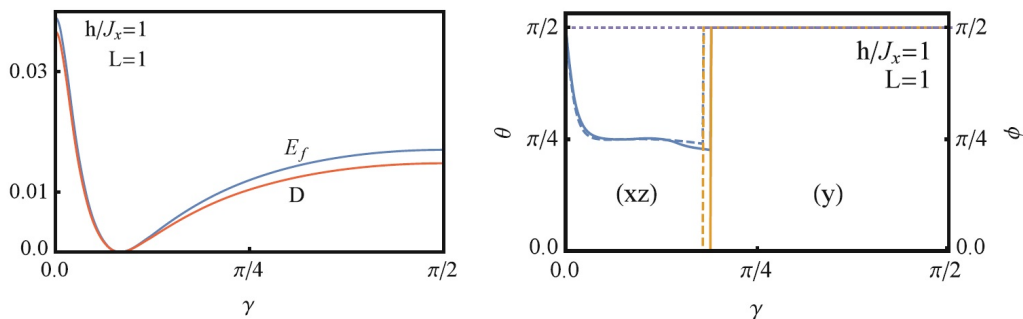


Figura 4-6: Discordia cuántica  $D$  y entrelazamiento de formación  $E_f$  (panel izquierdo), y los ángulos  $\theta$ ,  $\phi$  de la medida minimizante de  $D$  (panel derecho, línea sólida) para espines adyacentes en una cadena  $XY$  con  $\chi = 0,5$ , y campo *no transverso* en el plano  $xz$ , como función del ángulo  $\gamma$  que el campo forma con el eje  $z$ , y con  $|\mathbf{h}| = J_x$ . Tanto  $D$  como  $E_f$  se anulan en el CF debido a que el UGS es no degenerado. A medida que  $\gamma$  aumenta, aparece una transición en la medida minimizante que va del plano  $xz$  al eje  $y$ . Esta transición puede ser predicha mediante la medida que optimiza la entropía condicional cuadrática (línea puntada en el panel derecho).

sus valores son menores. Vale la pena remarcar que tanto  $E_f$ ,  $D$  e  $I_f$  exhiben largo alcance en la vecindad del CF.

A su vez, si el campo es lo suficientemente intenso la medida minimizante de  $D$  presenta una transición del plano  $xz$  al eje  $y$  cuando el ángulo del campo rota en el plano  $xz$ . Esta transición puede ser entendida considerando la entropía condicional cuadrática ya que su medida minimizante sigue de cerca la medida que minimiza la discordia cuántica basada en la entropía de von Neumann (Fig. 4-6). Finalmente, cabe mencionar que si bien  $I_1$  presenta un comportamiento similar al de  $D$ ; su respectiva medida minimizante es distinta pues tiende a alinearse con el campo aplicado  $|\mathbf{h}|$ .

## Comentarios finales

En este capítulo se ha verificado que las correlaciones cuánticas adquieren largo alcance en la vecindad del CF, corroborando que este es un punto crítico cuántico del sistema finito. En el próximo capítulo se verá que estos efectos se tornan aún más dramáticos en sistemas con interacción  $XXZ$  inmersos en campos no homogéneos, donde el CF representa un punto multicrítico de magnetización y entrelazamiento.



# Capítulo 5

## Factorización y criticalidad en sistemas $XXZ$ finitos

*“Es muy peligroso, Frodo, cruzar la puerta”, solía decirme.*

*“Vas hacia el Camino y si no cuidas tus pies no sabes hacia donde te arrastrarán.”*

- Frodo citando a Bilbo, en *“La comunidad del anillo”* por J. R. R. Tolkien.

El modelo  $XXZ$  es un sistema de espines arquetípico que ha sido ampliamente estudiado para entender las propiedades y las fases de los sistemas de muchos cuerpos interactuantes [103–110]. De hecho, este modelo puede emerger como un Hamiltoniano efectivo en diversos escenarios, como por ejemplo en los modelos bosónicos y fermiónicos de Hubbard [111–114], y en sistemas de átomos interactuantes atrapados en un potencial [113–115].

Desde hace algunos años, el interés en los sistemas  $XXZ$  se ha visto renovado gracias a los grandes avances en tecnologías de punta de control cuántico [36, 121]. Estos últimos han permitido simular sistemas de espines con interacciones efectivas tipo  $XXZ$  en distintos sistemas físicos como átomos fríos en redes ópticas [114–120], microcavidades acopladas por fotones [122–124], juntas superconductoras de Josephson [125–129], iones atrapados [130–134], átomos en superficies [135] y en puntos cuánticos (quantum dots) [136]. Para más detalles sobre la realización física de los sistemas de espines, ver el Apéndice A.

El objetivo de este capítulo es estudiar la factorización en sistemas finitos de espines arbitrarios con interacción  $XXZ$  en campos transversos no uniformes. Cabe mencionar que se decidió estudiar este modelo en particular pues al tener simetría  $U(1)$  presenta fenómenos críticos de gran interés [108]. Así pues, en la Sección 5.1 se estudiarán las respectivas EIC y EDC, donde se mostrará que estos sistemas presentan un GS factorizado completamente separable que rompe la simetría y que surge en un punto excepcionalmente degenerado. Luego, en la Sección 5.2 se mostrará que tal fenómeno aparece para una gran variedad de configuraciones de campos y que los resultados son válidos para sistemas de cualquier dimensión y valor del espín. Así pues, generalizamos la transición del tipo Pokrovsky-Talapov [105] de los modelos de espín 1/2 a sistemas más generales. En la Sección 5.3 se estudian diagramas de fase de magnetización y entrelazamiento. Finalmente, en 5.4 se comparan los resultados para distintas configuraciones de campo compatibles con la factorización, donde se determina la presencia de nuevos fenómenos no triviales inducidos por los campos magnéticos. Los resultados presentados en este capítulo fueron publicados en [3].

## 5.1. Factorización en cadenas con interacción $XXZ$

El Hamiltoniano de una cadena de  $N$  espines  $s_i$  con interacción  $XXZ$  en campos transversos no uniformes es

$$H = - \sum_i h^i S_i^z - \sum_{i < j} J^{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_z^{ij} S_i^z S_j^z. \quad (5.1)$$

Dado que este Hamiltoniano conmuta con el operador de espín total,

$$[H, S^z] = 0, \quad S^z = \sum_i S_i^z, \quad (5.2)$$

sus autovalores tendrán magnetización definida  $M$  en el eje  $z$ . Esto último implica que el GS exacto del sistema presentará *plateaus* -o mesetas- de magnetización  $M$  a medida que los campos  $h^i$  son variados. Para campos paralelos *uniformes* suficiente-

mente intensos, el GS del sistema estará completamente alineado con el campo, será separable y tendrá magnetización máxima  $|M| = S \equiv \sum_i s_i$ . Por otro lado, cuando  $|M| \neq S$  el GS será en general un estado entrelazado.

Siguiendo el mismo procedimiento del Capítulo 3, utilizamos las ecuaciones de factorización para determinar bajo qué condiciones  $H$  posee un autoestado separable

$$|\Theta\rangle = \otimes_{i=1}^n e^{-i\phi_i S_i^z} e^{-i\theta_i S_i^y} |\uparrow_i\rangle = |\nearrow \swarrow \nwarrow \dots\rangle, \quad (5.3)$$

donde recordamos que el estado local  $|\uparrow_i\rangle$  ( $S_i^z |\uparrow_i\rangle = s_i |\uparrow_i\rangle$ ) es rotado en una dirección arbitraria  $\mathbf{n}_i = (\sin \theta_i \cos \phi_i, \sin \theta_i \sin \phi_i, \cos \theta_i)$ . Así pues, en este caso las EIC (2.11)–(2.12) resultantes son [3]

$$J^{ij} \cos \phi_{ij} (1 - \cos \theta_i \cos \theta_j) = J_z^{ij} \sin \theta_i \sin \theta_j, \quad (5.4)$$

$$J^{ij} \sin \phi_{ij} (\cos \theta_i - \cos \theta_j) = 0, \quad (5.5)$$

donde  $\phi_{ij} = \phi_i - \phi_j$ ; mientras que las EDC (2.17) son

$$h^i \sin \theta_i = \sum_{j \neq i} s_j [J^{ij} \cos \phi_{ij} \cos \theta_i \sin \theta_j - J_z^{ij} \sin \theta_i \cos \theta_j], \quad (5.6)$$

$$0 = \sum_{j \neq i} s_j J^{ij} \sin \phi_{ij} \sin \theta_j. \quad (5.7)$$

De las Ecs. (5.4) y (5.5) se puede ver fácilmente que los estados máximamente alineados o antialineados en el eje  $z$  ( $\theta_i = 0$  o  $\pi \forall i$ ) satisfacen las EIC. Sin embargo, estamos interesados en determinar soluciones no triviales de la forma  $\theta_i \neq 0, \pi$  y  $\phi_{ij} = 0 \forall i, j$ . Dado que  $(\theta, \phi + \pi)$  es equivalente a  $(-\theta, \phi)$ , no es necesario considerar soluciones con  $\phi_{ij} = \pi$  (que también satisfacen las Ecs. (5.5) y (5.7)) si se permiten valores negativos de  $\theta$ . Bajo estas condiciones, las Ecs. (5.5) y (5.7) se cumplen trivialmente, mientras que la Ec. (5.4) implica

$$\eta_{ij} \equiv \frac{\tan(\theta_j/2)}{\tan(\theta_i/2)} = \Delta_{ij} \pm \sqrt{\Delta_{ij}^2 - 1}, \quad (5.8)$$

con  $\Delta_{ij} = J_z^{ij} / J^{ij} = \Delta_{ji}$ . Debido a la raíz en el lado derecho de (5.8), estas soluciones

existen *solamente* cuando  $|\Delta_{ij}| \geq 1$ .

Así pues, si  $|\Delta_{ij}| > 1$ , la Ec. (5.8) conduce a *dos posibles soluciones* para  $\theta_j$  dado un  $\theta_i$  ( $\theta_j = \vartheta_{\pm 1}$  si  $\theta_i = \vartheta_0$ ). Cabe mencionar que este resultado está en acuerdo con el Lema 3 del Capítulo 2. A su vez, se verifica también el Lema 2 ya que dados  $\theta_i, \theta_j \neq 0, \pi$ , siempre existe un *único* valor de  $\Delta_{ij} = \frac{\eta_{ij} + \eta_{ij}^{-1}}{2}$  que satisface (5.8) ( $\eta_{ij}^{-1} = \Delta_{ij} \mp \sqrt{\Delta_{ij}^2 - 1}$ ).

Si la Ec. (5.8) se cumple para todos los pares interactuantes, los CF (5.6) son

$$h_s^i = \sum_j s_j \nu_{ij} J^{ij} \sqrt{\Delta_{ij}^2 - 1}, \quad (5.9)$$

donde  $\nu_{ij} = -\nu_{ji} = \pm 1$  es el signo en (5.8). Sorprendentemente, estos CF son *independientes* de los ángulos  $\theta_i$ , y cumplen la *condición de suma ponderada nula*

$$\sum_i s_i h_s^i = 0. \quad (5.10)$$

Por otro lado, la energía  $E_\Theta$  (2.21) es

$$E_\Theta = - \sum_{i < j} s_i s_j J_z^{ij}, \quad (5.11)$$

que depende solo de  $J_z^{ij}$ , y para los presentes valores de los campos magnéticos *coincide* con la energía de los estados máximamente alineados  $M = \pm S$ .

### 5.1.1. Sobre el estado fundamental

Con un argumento similar al presentado en la Sección 3.2.2 se puede demostrar que si  $J_z^{ij} \geq 0 \forall i, j$ , entonces el estado  $|\Theta\rangle$  es el GS de  $H$  con energía (5.11) [3].

*Proof:* Sea un par de espines  $i \neq j$  ( $N = 2$ ). Dado que la energía es independiente de los ángulos azimutales ( $[H, S^z] = 0$ ), podemos considerar el caso  $\phi_i = \phi_j = 0$ . El estado factorizado del par  $|\theta_i \theta_j\rangle$  puede ser escrito en la base estándar como

$$|\theta_i \theta_j\rangle = \otimes_{k=i,j} \sum_{m_k=-s_k}^{s_k} \sqrt{\binom{2s_k}{s_k-m_k}} \sin^{s_k-m_k} \frac{\theta_k}{2} \cos^{s_k+m_k} \frac{\theta_k}{2} |m_k\rangle, \quad (5.12)$$

donde  $S_k^z|m_k\rangle = m_k|m_k\rangle$ . Para  $J_z^{ij} > 0$  y  $J^{ij} > 0$ , la Ec. (5.8) admite soluciones con  $\theta_i, \theta_j \in (0, \pi)$  cuyos coeficientes en la expansión (5.12) son estrictamente positivos. Por lo tanto, en la factorización  $|\theta_i\theta_j\rangle$  debe ser un GS del Hamiltoniano local del par  $H^{ij}$ : en estos puntos no solo es un autoestado exacto sino que para  $J^{ij} > 0$  todos los elementos no diagonales de  $H^{ij}$  son negativos. Esto último implica que  $\langle H^{ij} \rangle$  puede ser minimizado por un estado con todos los coeficientes del mismo signo, pero no existe tal estado que sea ortogonal a  $|\theta_i\theta_j\rangle$ . Cabe mencionar que una rotación de  $\pi$  al rededor del eje  $z$  en uno de los espines (por ejemplo en  $j$ ) cambiará el signo de  $J^{ij}$  y de  $\theta_j$ , pero no afectará a  $J_z^{ij}$ , a los campos ni al espectro de  $H^{ij}$ . Por lo tanto,  $|\theta_i, -\theta_j\rangle$  será un GS para este  $H^{ij}$ ; y evidentemente los ángulos  $\theta_i, -\theta_j$  cumplirán (5.8) para  $\Delta_{ij} < 0$  (con el signo  $\nu_{ij} \rightarrow -\nu_{ij}$ ) y los campos seguirán siendo (5.9). Los argumentos previamente mencionados muestran que si  $J_z^{ij} < 0$ , entonces  $|\theta_i\theta_j\rangle$  será el autoestado de mayor energía de  $H^{ij}$  para cualquier signo de  $J^{ij}$  (pues es el GS de  $-H^{ij}$ ).

Sea ahora un sistema -general- de espines en el que cada par interactuante satisface la Ec. (5.8) y en el que los campos están dados por (5.9). En este caso, siempre se puede escribir el Hamiltoniano completo como suma de Hamiltonianos locales  $\sum_{i<j} H^{ij}$ , con

$$H^{ij} = -h_s^{ij} S_i^z - h_s^{ji} S_j^z - J^{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - J_z^{ij} S_i^z S_j^z, \quad (\text{A2})$$

y donde  $h_s^{ij} = \nu_{ij} s_j J^{ij} \sqrt{\Delta_{ij}^2 - 1} = -s_j h_s^{ji} / s_i$  el CF del par  $i, j$  ( $\sum_j h_s^{ij} = h_s^i$ ). Para  $J_z^{ij} > 0 \forall i, j$ ,  $|\Theta\rangle$  será el GS de  $H$  ya que  $|\theta_i\theta_j\rangle$  será el GS de cada  $H^{ij}$ . Finalmente, siguiendo estos mismos argumentos, si  $J_z^{ij} < 0 \forall i, j$  entonces este estado será el autoestado de mayor energía de  $H$ .  $\square$

### 5.1.2. De la magnetización y degeneración del estado fundamental

En la sección pasada se resaltó que tanto los CF (5.9) como la energía de  $|\Theta\rangle$  (5.11) son independientes de las direcciones de alineación  $\theta_i$  de los espines. Como se verá a continuación, este hecho tiene profundas implicaciones sobre la degeneración del estado factorizado.

Ante todo, es de gran importancia remarcar que estos estados separables  $|\Theta\rangle$  no tienen magnetización definida, por lo que rompen la simetría básica de  $H$ . Además, contienen componentes de todas las magnetizaciones. Por consiguiente, solo pueden surgir en puntos críticos *excepcionales*, en los que la degeneración del GS es  $2S + 1$  y donde todos los plateaus de magnetización convergen (ver Figuras 5-2 y 5-4). Esto último se puede entender a través del hecho que el Hamiltoniano conmuta con el operador  $P_M$  de proyección sobre magnetización definida  $M$ , para cualquier  $M = -S, \dots, S$ :

$$[H, P_M] = 0, \quad P_M = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(S^z - M)} d\varphi. \quad (5.13)$$

Por lo tanto,  $HP_M|\Theta\rangle = E_\Theta P_M|\Theta\rangle$  para todo  $M = -S, \dots, S$ , y esto implica que todas las componentes de  $|\Theta\rangle$  con buen  $M$  son autoestados exactos con la misma energía (5.11). Es más, los estados proyectados normalizados son *independientes* de  $\phi$  y del ángulo semilla inicial  $\theta_1 = \vartheta_0$ , y depende solamente de la anisotropía de la interacción de intercambio  $\Delta_{ij}$  y de los signos  $\nu_{ij}$ :

$$P_M|\Theta\rangle \propto \sum_{\substack{m_1, \dots, m_N \\ \sum_i m_i = M}} \left[ \prod_{i=1}^N \sqrt{\binom{2s_i}{s_i - m_i}} \eta_{i,i+1}^{\sum_{j=1}^i m_j} \right] |m_1 \dots m_N\rangle, \quad (5.14)$$

donde  $\eta_{i,i+1}$  son las proporciones (5.8) a lo largo de *cualquier* curva en el sistema de espines que una todos los espines acoplados. A diferencia del estado separable  $|\Theta\rangle$ , estos estados son evidentemente entrelazados  $\forall |M| \leq S - 1$ ; y representan los límites del GS exacto cuando el sistema se acerca al punto de factorización a lo largo de los plateaus de magnetización  $M$ .

## 5.2. Construyendo las soluciones separables

En esta sección se explica un procedimiento para determinar las soluciones separables y sus respectivos CF. En particular, se empezará estudiando la solución factorizada para un par de espines; luego se discutirá como utilizar esta solución a modo de bloque fundamental -al mejor estilo de los legos- para construir los estados

separables en cadenas y arreglos de espines.

### 5.2.1. De pares de espines...

Como ejemplo básico de lo discutido previamente, consideremos un par de espines  $s$  con  $J^{ij} = J$ . Como ya se mencionó, la factorización surge cuando  $J_z > 0$  y  $|\Delta| = |\frac{J_z}{J}| > 1$ , y cuando los CF -opuestos- son  $h_s^1 = -h_s^2 = \pm h_s$ , con

$$h_s = sJ\sqrt{\Delta^2 - 1}. \quad (5.15)$$

En estos puntos el GS tiene una degeneración de  $4s + 1$ , y su energía es  $E_\Theta = -s^2 J_z$ . Los GS de magnetización definida se obtienen proyectando en  $M$ :

$$\frac{P_M|\Theta\rangle}{\sqrt{\langle\Theta|P_M|\Theta\rangle}} = \sum_m \sqrt{\frac{\binom{2s}{s-m}\binom{2s}{s+m-M}}{Q_{2s-M}^{M,0}(\eta)}} \eta^{s+m-M} |m, M-m\rangle, \quad (5.16)$$

donde  $Q_n^{m,k}(\eta) = (\eta^2 - 1)^n P_n^{m-k, m+k}(\frac{\eta^2+1}{\eta^2-1})$ , con  $P_n^{\alpha,\beta}(x)$  los polinomios de Jacobi, y  $\eta$  está dado por la Ec. (5.8). Estos estados son entrelazados, y la Ec. (5.16) es su descomposición de Schmidt.

### 5.2.2. ... a cadenas de espines...

A partir de la solución para un par de espines ahora se determinarán los GS separables de una cadena de  $N$  espines (Fig. 5-1). Cuando la interacción es de primero vecinos, se puede empezar con un valor inicial  $\theta_1 = \vartheta_0 \in (0, \pi)$  en el primer espín, y de allí los ángulos  $\theta_2, \dots, \theta_N$  son determinados por aplicaciones sucesivas de la Ec. (5.8). Si la cadena es abierta, las dos soluciones de  $\theta_j$  en cada paso conducen a  $2^{N-1}$  soluciones separables, y por ende a  $2^{N-1}$  configuraciones de CF distintas en acuerdo con el Lema 3 (ver Fig. 2-3).

Además, para espines y acoplamientos *uniformes* ( $s_i = s$  y  $J^{i,i+1} = J$ ,  $\Delta_{i,i+1} = \Delta \forall i$ ), los CF (5.9) son  $h_s^i = \nu_i h_s$ , con  $h_s$  dado por (5.15) y  $\nu_i = \sum_j \nu_{ij} = \pm 2$  o 0 para espines en el “bulk” de la cadena; y con  $\pm 1$  para los espines en los bordes. De

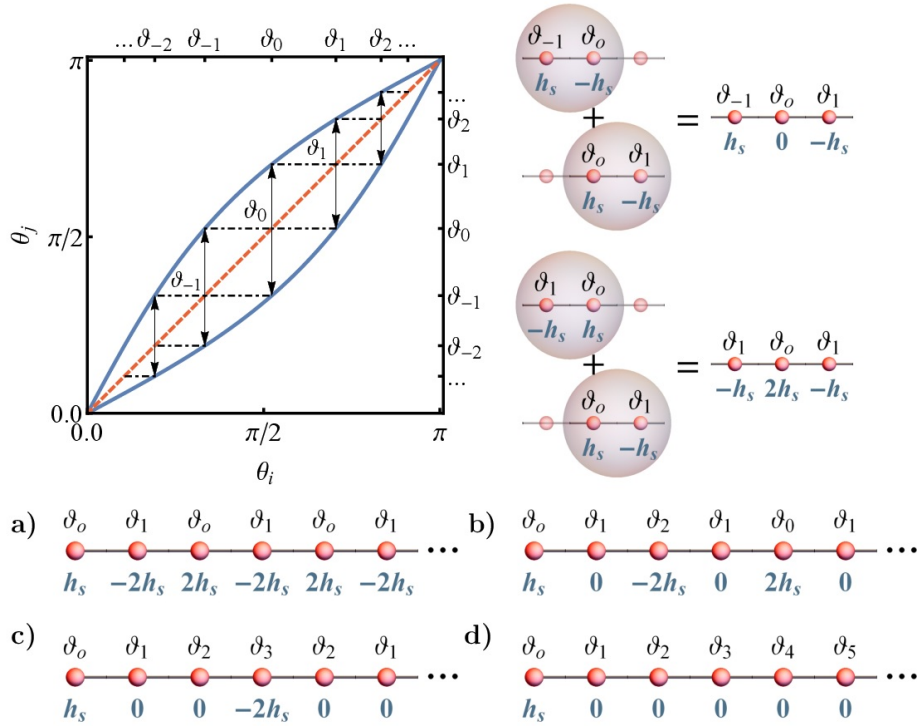


Figura 5-1: Panel superior izquierdo: Las dos soluciones de la Ec. (5.8) para  $\theta_j$  vs.  $\theta_i$  (líneas sólidas). Dada una dirección de alineación arbitraria  $\vartheta_0$  en un sitio, las direcciones de alineación del resto de los espines en el estado factorizado  $|\Theta\rangle$  pueden ser determinadas mediante aplicaciones sucesivas de la Ec. (5.8) (indicadas por flechas). Cada secuencia de ángulos da lugar a una configuración de campos factorizantes a través de la Ec. (5.9). Este procedimiento se muestra esquemáticamente para 3 espines (panel superior derecho) y para los primeros 6 espines de una cadena con espín e interacción uniformes. Como se puede ver, surgen dos casos extremos: una solución alternante (a); y una solución con campos nulos en el “bulk” y sólo campos en los bordes (d). Existen también soluciones con ceros intermedios (b,c). Nótese que en una cadena cíclica el campo en el primer sitio debe ser  $2h_s$ .

entre la plétora de configuraciones de espines y campos hay dos casos extremos que sobresalen:

- Una configuración tipo Néel  $\vartheta_0\vartheta_1\vartheta_0\vartheta_1\dots$ , que implica campos alternantes  $h_s^i = \pm 2(-1)^i h_s$  para espines en el bulk y  $|h_s^1| = |h_s^N| = h_s$  para los espines en los bordes (Fig. 5-1 a).
- Una solución con ángulos crecientes  $\vartheta_0, \vartheta_1, \vartheta_2, \dots$ , que conduce a campos nulos en el bulk y no nulos solamente en los bordes  $h_s^1 = -h_s^N = \pm h_s$  (d).

A su vez, existen también soluciones con campos nulos en sitios intermedios (b,c).



Cabe remarcar que en una cadena *cíclica* ( $N + 1 \equiv 1$ ,  $J_\mu^{1N} = J_\mu$ ) el número de configuraciones es menor ya que ahora hay  $\binom{N}{N/2}$  soluciones ( $\approx \frac{2^{N-1}}{\sqrt{\pi N/8}}$  para  $N$  grande). Esto último se debe al hecho que (5.8) también debe cumplirse para el par  $1-N$ , y esto implica  $\theta_N = \vartheta_{\pm 1}$ ; es decir,  $N$  par y un número igual de “pasos” positivos y negativos en (5.8). Finalmente, para  $\Delta \rightarrow 1$ , se tiene  $h_s \rightarrow 0$  y todas las soluciones convergen a la solución uniforme  $|\Theta\rangle$  (con  $\theta_i$  constante, Ec. (5.8)).

### 5.2.3. ... y arreglos de espines.

Los argumentos previos pueden ser extendidos para arreglos  $d$  dimensionales de espines, como por ejemplo sistemas con geometría de estrella [137–139], y redes cuadradas o redes cúbicas con interacción uniforme de primeros vecinos ( $\Delta_{ij} = \Delta$ ). Dado que los ángulos  $\theta_j$  de los espines acoplados con el espín  $i$  deben satisfacer la Ec. (5.8), entonces deben diferir de  $\theta_i$  en un solo paso:  $\theta_j = \vartheta_{k\pm 1}$  si  $\theta_i = \vartheta_k$  (Fig. 5-1). Como se discute en el Apéndice E, a pesar de esta restricción el número de configuraciones sigue incrementando exponencialmente con el tamaño del arreglo<sup>1</sup>. A su vez, los CF serán  $h_s^i = \pm \nu_i h_s$  con  $\nu_i$  entero.

En particular, no es difícil ver que las dos soluciones extremas siguen siendo realizables, ya que si se elijen signos *alternantes* en (5.8) a lo largo de filas, columnas, etc, entonces se obtienen CF *alternantes*:  $h_s^i = \pm 2dh_s$  para espines en el bulk ( $h_s^{ij} = \pm 4(-1)^{i+j}h_s$  si  $d = 2$ ); y con campos de menor magnitud en los bordes. Por otro lado, si siempre se elijen *los mismos* signos en (5.8) - de tal forma que  $\vartheta$  sea creciente a lo largo de filas, columnas, etc.- entonces los CF serán *nulos* en el bulk y solamente se deberán aplicar campos no nulos  $\nu_i h_s$  en los bordes.

### 5.2.4. Sobre los estados reducidos de magnetización definida

Habiendo determinado los estados factorizados se pueden calcular los estados reducidos proyectados sobre magnetización definida. En particular, si la anisotropía  $\Delta$

<sup>1</sup>Además, en dicho apéndice se incluye la anécdota de cómo el contar la cantidad de soluciones factorizadas me llevó por un camino en el que peligró mi salud mental pero eventualmente nos llevó a citar en el paper un trabajo sobre origami.

es uniforme entonces todos los cocientes  $\eta_{i,i+1}$  en el estado proyectado (5.14) serán ya sea  $\eta$  o  $\eta^{-1}$ , y esto permite obtener expresiones analíticas cerradas. Por ejemplo, para arreglos  $d$  dimensionales de espines  $s$  en CF alternantes la Ec. (5.14) conduce solamente a tres estados reducidos  $\rho_{ij}^M$  distintos:  $\rho_{oe}^M$  (impar-par o odd-even en inglés),  $\rho_{oo}^M$  y  $\rho_{ee}^M$ . A su vez, debido a la forma de  $|\Theta\rangle$  estos estados *no dependen de la separación entre los espines* ya que  $\rho_{i,j+k}^M = \rho_{i,j}^M \forall k$  impar. De hecho, sus elementos no nulos serán

$$(\rho_{ij}^M)_{m_j, m'_j} = \eta^{f_{ij}} \frac{\sqrt{C_{m_j}^{s,m} C_{m'_j}^{s,m}} Q_{Ns-2s-M+m}^{M-m, (\delta+2l_{ij})s}(\eta)}{Q_{Ns-M}^{M, \delta s}(\eta)}, \quad (5.17)$$

donde  $m = m_i + m_j = m'_i + m'_j$  es la magnetización del par ( $[\rho_{i,j}^M, S_i^z + S_j^z] = 0$ ),  $Q_n^{m,k}(\eta)$  fue definido en (5.16),  $C_k^{s,m} = \binom{2s}{s-k} \binom{2s}{s-m+k}$  y  $f_{ij} = 2s - m_j - m'_j, 0, 4s - 2m, l_{ij} = 0, -1, 1$  para los pares  $oe, oo, ee$ , con  $\delta = 0(1)$  si  $N$  es par (impar). Para  $|M| < Ns$ , estos estados serán estados mezcla entrelazados, lo que implica que a su vez también estarán entrelazados con el resto del sistema, y que en la vecindad de la factorización el entrelazamiento de pares alcanzará rango completo (Lema 5).

### 5.2.5. Del estado fundamental en el plateau $M = \pm(Ns - 1)$ para campos alternantes y del comienzo del entrelazamiento

Para sistemas  $d$  dimensionales de espines  $s$  con acoplamientos cíclicos uniformes  $XXZ$  y campos alternantes, el GS exacto en el plateau  $M = \pm(Ns - 1)$  debe ser necesariamente de la forma

$$|Ns - 1\rangle = \cos \alpha |W_o\rangle + \sin \alpha |W_e\rangle, \quad (5.18)$$

con

$$|W_e\rangle = \frac{1}{\sqrt{Ns}} \sum_{\substack{i \text{ odd} \\ \text{even}}} S_i^- |Ns\rangle, \quad (5.19)$$

estados tipo  $W$  para espines en sitios impares (odd) y pares (even) ( $S_i^- = S_i^x - \iota S_i^y$ ), y donde  $|Ns\rangle$  indica el estado completamente alineado con  $M = Ns$ . Los ángulos  $\alpha$  pueden ser obtenidos mediante la diagonalización de  $H$  en el subespacio bidimensional generado por los estados  $|W_e\rangle$ , donde

$$\langle W_e | H | W_e \rangle = E_{Ns} + 2sJ_z + h_1, \quad (5.20)$$

$$\langle W_o | H | W_e \rangle = -2sJ, \quad (5.21)$$

y  $E_{Ns} = -Ns(\frac{h_1+h_2}{2} + sJ_z)$  la energía del estado alineado. Luego, se obtiene que

$$E_{Ns-1} = E_{Ns} + \frac{h_1+h_2}{2} + 2sJ_z - \sqrt{(\frac{h_1-h_2}{2})^2 + (2sJ)^2} \quad (5.22)$$

es la energía más baja de cualquier estado con magnetización  $M = Ns - 1$ , donde  $\frac{\cos \alpha}{\sin \alpha} = \sqrt{\frac{\lambda \mp (h_1-h_2)/2}{2\lambda}}$  y  $\lambda = \sqrt{(\frac{h_1-h_2}{2})^2 + (2sJ)^2}$ . Evidentemente, esta ecuación sigue siendo valida para  $E_{-Ns+1}$  al realizar el cambio  $h_i \rightarrow -h_i$ .

Dada la forma de (5.18), la matriz densidad reducida de cualquier par  $i, j$  conmutará con la magnetización del par  $S_i^z + S_j^z$ , y además será independiente de la separación para espines similares; es decir, para los pares odd-odd (oo), odd-even (oe) y even-even (ee). De hecho, sus únicos elementos no nulos serán aquellos que se corresponden con  $m = 2s$  y  $2s - 1$ . Así pues, en el subespacio generado por  $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle\}$ , el bloque no nulo de la matriz densidad reducida será

$$\rho_{oe} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{2}{N} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{N} \sin^2 \alpha & \frac{1}{N} \sin 2\alpha \\ 0 & \frac{1}{N} \sin 2\alpha & \frac{2}{N} \cos^2 \alpha \end{pmatrix}, \quad (5.23)$$

para los pares odd-even, y

$$\rho_{oo} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{4}{N} \cos^2 \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{N} \cos^2 \alpha & \frac{2}{N} \cos^2 \alpha \\ 0 & \frac{2}{N} \cos^2 \alpha & \frac{2}{N} \cos^2 \alpha \end{pmatrix}, \quad (5.24)$$

para el caso odd-odd. Por otro lado, la matriz densidad  $\rho_{ee}$  de los pares even-even se obtiene con el cambio  $\cos^2 \alpha \rightarrow \sin^2 \alpha$ . Como se puede ver de estas ecuaciones, los estados reducidos son independientes del espín para un  $\alpha$  fijo; es decir, cuando la interacción escalizada  $sJ_\mu$  está fija.

A partir de estas matrices densidad se puede determinar la Negatividad (1.39) exacta como

$$N_{oe} = \sqrt{\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{N}\right)^2 + \frac{\sin^2 2\alpha}{N^2}} - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{N}\right), \quad (5.25)$$

$$N_{oo} = \sqrt{\left(\frac{1}{2} - \frac{2\cos^2 \alpha}{N}\right)^2 + \frac{4\cos^2 \alpha}{N^2}} - \left(\frac{1}{2} - \frac{2\cos^2 \alpha}{N}\right), \quad (5.26)$$

mientras que para  $N_{ee}$  se debe realizar el cambio  $\cos^2 \alpha \rightarrow \sin^2 \alpha$ . Cuando  $N$  es grande,  $N_{ij} \approx \frac{1}{4}C_{ij}^2$ , con

$$C_{oe} = \frac{2|\sin 2\alpha|}{N} = \frac{2}{N} \frac{2s|J|}{\sqrt{\left(\frac{h_1-h_2}{2}\right)^2 + (2sJ)^2}}, \quad (5.27)$$

$$C_{oo} = \frac{4\cos^2 \alpha}{N} = \frac{2}{N} \left(1 - \frac{(h_1-h_2)/2}{\sqrt{\left(\frac{h_1-h_2}{2}\right)^2 + (2sJ)^2}}\right), \quad (5.28)$$

$$C_{ee} = \frac{4\sin^2 \alpha}{N} = \frac{2}{N} \left(1 + \frac{(h_1-h_2)/2}{\sqrt{\left(\frac{h_1-h_2}{2}\right)^2 + (2sJ)^2}}\right), \quad (5.29)$$

las Concurrencias de los pares. En la factorización, (5.25)–(5.29) coinciden con los resultados obtenidos a partir de (5.17) para  $M = Ns - 1$ .

Cabe mencionar que los resultados para  $M = -Ns + 1$  se obtienen reemplazando  $h_i$  por  $-h_i$ . Así pues, para campos  $h_1$  grandes y positivos y para  $M = Ns - 1$ , tanto  $C_{oo}$  como  $C_{oe}$  se anulan, mientras que  $C_{ee} \rightarrow 4/N$  (es decir, coincide con el resultado obtenido para un estado tipo  $W$  de  $N/2$  espines). Por otro lado, cuando los campos  $h_2$  en los sitios pares son grandes y negativos y si  $M = -Ns + 1$ , entonces  $C_{oo} \rightarrow 4/N$  mientras que  $C_{oe}$  y  $C_{ee}$  se anulan.

Las Ecs. (5.25) y (5.26) muestran que los plateaus  $\pm(Ns - 1)$  determinan regiones críticas en las que comienza el entrelazamiento (el plateau adyacente de máxima magnetización  $M = \pm Ns$  corresponde a un GS completamente separable) y en las que cualquier par de espines  $i$  y  $j$  están entrelazados debido a la estructura tipo  $W$  del GS.

## 5.3. Resultados: magnetización y entrelazamiento

Si bien los resultados obtenidos previamente son generales y válidos para sistemas  $d$ -dimensionales de  $N$  espines, en la presente sección se presentan diagramas de magnetización y entrelazamiento obtenidos mediante diagonalización exacta de Hamiltoniano finitos.

### 5.3.1. De la magnetización

Según lo previamente discutido, los CF son *campos críticos* en el espacio multi-dimensional  $(h^1, \dots, h^N)$ . Así, como se muestra en el diagrama de magnetización de una cadena cíclica finita de espines 1 en campos alternantes  $(h_1, h_2, h_1, \dots)$  (Fig. 5-2), para  $\Delta \geq 1$  gran parte del plano  $(h_1, h_2)$  corresponde al GS completamente alineado ( $M = \pm Ns$ ); mientras que los sectores en los que el GS tiene  $|M| < Ns$  emergen exactamente del CF  $h_1 = -h_2 = \pm 2h_s$ .

Sorprendentemente, para cadenas de espines 1/2 estos campos coinciden con aquellos que dan lugar a una transición de tipo Pokrovsky-Talapov de una fase conmensurada a una fase inconmensurada [105]. Este hecho indica que esta transición surge debido a la factorización y que por lo tanto sigue siendo válida para *cualquier* sistema de espín  $s$  compatible con factorización.

Ya que gran parte del diagrama de magnetización se corresponde con estados máximamente alineados, podríamos preguntarnos si es posible determinar el borde de esta fase ferromagnética. Como se discutirá en el Capítulo 7, existen familias de configuraciones de campos para las cuales sí es posible hallar una expresión analítica que describa estos bordes. Por ejemplo, para el caso de campos alternante de la Fig. 5-2, los bordes de los sectores completamente alineados están determinados por las ramas de las hipérbolas

$$\left(\frac{h_1}{2sJ} \pm \Delta\right)\left(\frac{h_2}{2sJ} \pm \Delta\right) = 1, \quad (5.30)$$

(con  $|h_i| > 2h_s$ ,  $\frac{h_i}{2sJ} > \mp\Delta$ ). De hecho, es fácil demostrar que estas hipérbolas *se cruzan exactamente en los CF* si  $\Delta \geq 1$ . Además, la Ec. (5.30) determina también el

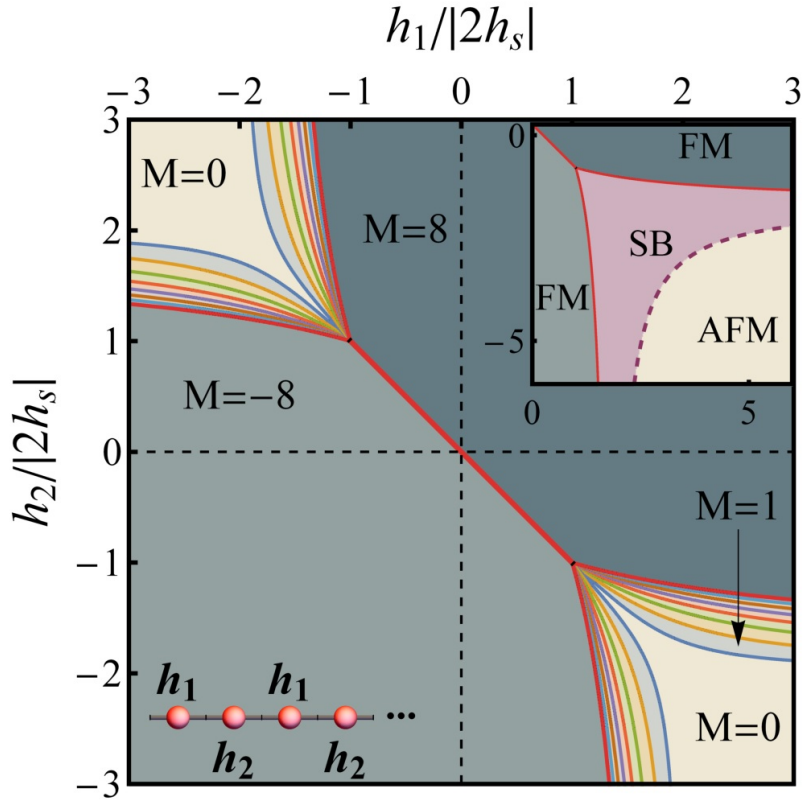


Figura 5-2: Diagrama de magnetización del GS exacto de una cadena de  $N = 8$  espines 1 con  $\Delta = 1,2$  en un campo alternante  $h^{2i-1} = h_1$ ,  $h^{2i} = h_2$ . Todos los plateaus de magnetización  $M = Ns, \dots, -Ns$  convergen en los CF  $h_1 = -h_2 = \pm 2h_s$ . El recuadro muestra las fases obtenidas en la aproximación de campo medio.

comienzo de la fase de campo medio (MF) con simetría rota (symmetry-breaking, SB por sus siglas en inglés); que a su vez termina en una fase antiferromagnética AFM para campos opuestos suficientemente grandes (ver el recuadro de la Fig. 5-2).

Finalmente, es importante mencionar que si  $\Delta > 1$ , entonces a lo largo de cualquier línea  $h_2 = h_1 + \delta$  el GS exacto experimenta una sola transición  $-Ns \rightarrow Ns$  si  $|\delta| < 4h_s$ ; pero experimenta  $2Ns$  transiciones  $M \rightarrow M+1$  si  $|\delta| > 4h_s$ , donde la primera de ellas está dada por el borde (5.30). Así pues, dado que todas las magnetizaciones surgen del CF, entonces al aplicar campos adicionales  $(\delta h_1, \delta h_2) = \delta h(\cos \gamma, \sin \gamma)$  se puede seleccionar *cualquier* plateau de magnetización. De hecho, todos los plateaus emergen a lo largo de líneas rectas con ángulos  $\tan \gamma_M = \frac{\langle S_1^z \rangle_M - \langle S_1^z \rangle_{M-1}}{\langle S_2^z \rangle_{M-1} - \langle S_2^z \rangle_M}$ .

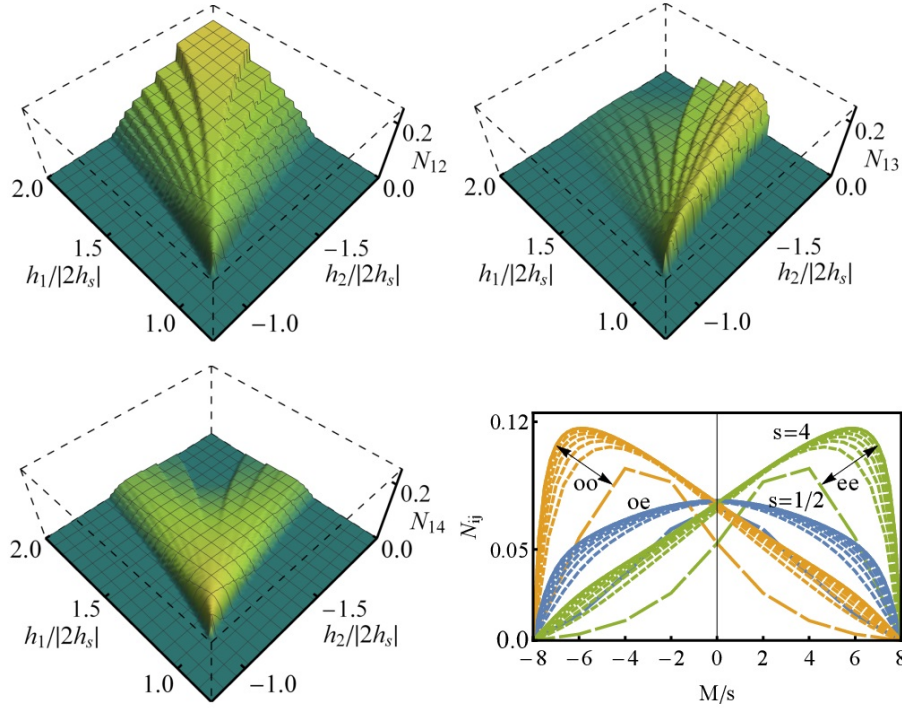


Figura 5-3: Negatividad  $N_{ij}$  para el par de espines  $i$  y  $j$  en el GS exacto de la cadena de espines 1 de la Fig. 5-2 con campos  $h_1, h_2$  de signo opuesto. Los paneles superiores muestran resultados para primeros (izquierda) y segundos (derecha) vecinos, mientras que el panel inferior izquierdo corresponde a terceros vecinos. Por otro lado, el panel inferior derecho muestra las Negatividades de pares en el campo factorizante ( $h_1 = -h_2 = 2h_s$ ) en los GS de magnetización definida. En este último caso se estudiaron cadenas idénticas de  $N = 8$  espines  $s$  con  $s = 1/2, \dots, 4$ . Como ya se ha mencionado, en la factorización solo existen 3 estados de pares distintos, y por lo tanto habrá solamente tres Negatividades  $N_{oe}$  (odd-even),  $N_{oo}$  and  $N_{ee}$ , que dependerán de  $M$  pero que serán independientes de la separación real  $|i - j|$  entre los espines.

### 5.3.2. Del entrelazamiento

En esta sección se discutirá primero el entrelazamiento entre los pares  $i, j$  en la cadena de la Fig. 5-2. Así pues, como se muestra en la Fig. 5-3 la Negatividad del par presenta un comportamiento de escalones que reflejan los plateaus de magnetización. A su vez, se puede ver que el entrelazamiento comienza precisamente en los CF y en los bordes de los plateaus  $|M| = Ns - 1$  (Ec. (5.30)).

Debido a la competencia entre los campos magnéticos y la interacción de intercambio, la Negatividad  $N_{ij}$  de pares contiguos (panel superior izquierdo) incrementa cuando la magnetización  $|M|$  decrece; ya que los espines están menos alineados con

el campo aplicado. Sin embargo, para segundos vecinos (panel superior derecho)  $N_{ij}$  es asimétrico, ya que estos pares se alinean cuando  $M$  incrementa y tiene el mismo signo que el campo aplicado correspondiente. Para terceros vecinos (panel inferior izquierdo), el entrelazamiento sigue siendo apreciable en la vecindad del CF ya que allí  $N_{14} = N_{12} = N_{oe}$ . Sorprendentemente, esta propiedad sigue siendo válida en todo el borde (5.30) debido a la estructura tipo  $W$  del GS en el plateau  $M = Ns - 1$  (ver Sección 5.2.5). Finalmente, en el panel inferior derecho se muestra la Negatividad exacta en el campo factorizante para los GS de magnetización definida (5.14), que puede obtenerse de los estados reducidos (5.17). En esta figura se puede ver que las Negatividades para distintos  $s$  muestran el mismo comportamiento en cada magnetización  $M$ . A su vez, estas cantidades están en acuerdo con la propiedad de monogamia del entrelazamiento (ver Sección 1.4.2) ya que decrecen como  $N^{-1}$  para grandes valores de  $N$  y para  $M$  finito.

## 5.4. Resultados: otras configuraciones de espines

Los resultados presentados en la sección previa fueron obtenidos para una cadena de espines inmersa en campos alternantes. En esta sección se presentan resultados representativos para otras configuraciones de campos, donde se muestra que si bien el comportamiento es *-grosso modo-* el mismo; surgen diferencias que resultarán de gran interés.

En primer lugar, como se puede ver en la Fig. 5-4, en todos los casos considerados los plateaus de magnetización  $|M| < Ns$  surgen del CF. Luego, resulta evidente que el comportamiento para la red cuadrada en campos alternantes (panel inferior derecho) es similar al de la cadena de espines mostrado en la Fig. 5-2. Sin embargo, el comportamiento de la cadena con campos “*next-alternating*”  $(h_1, 0, h_2, 0, \dots)$  es diferente al de los dos casos previamente considerados. En particular, el sector  $M = 0$  es mucho más reducido, mientras que los plateaus  $|M| \leq Ns/2$  son más anchos. Este efecto se debe al hecho que los espines en sitios intermedios sin campo están *frustrados* para  $M = 0$ , y por lo tanto se alinean más rápido con el campo más fuerte a medida



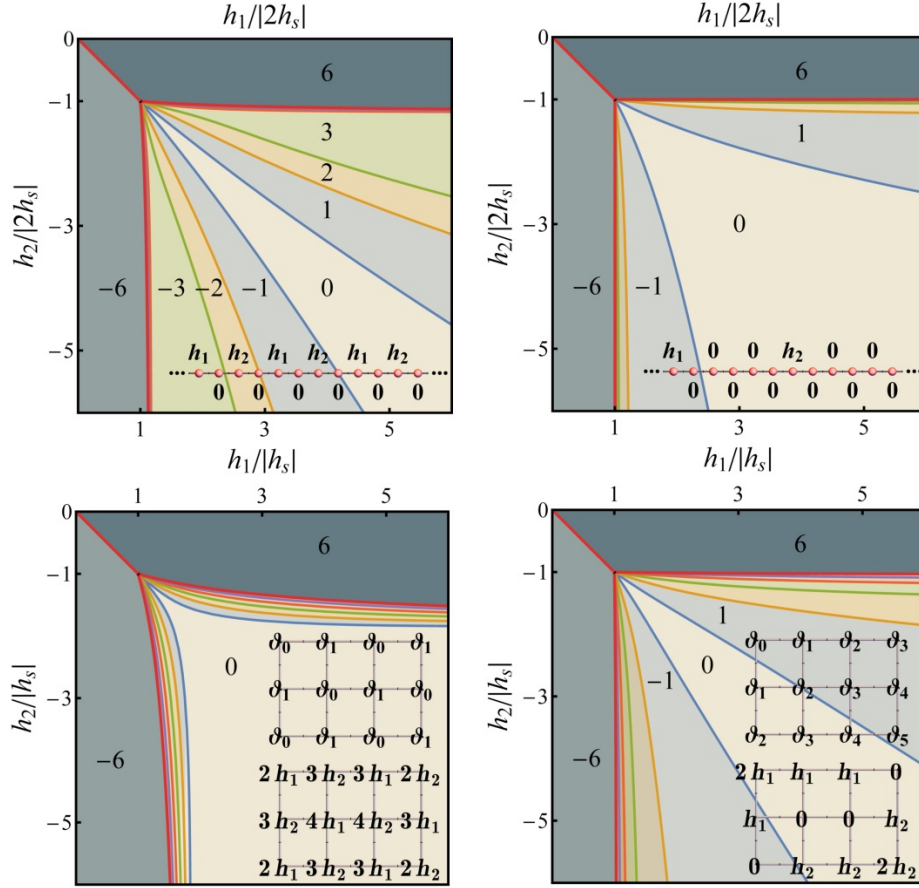


Figura 5-4: Diagramas de magnetización para el GS exacto en diferentes sistemas de espines  $XXZ$  con  $\Delta = 1,2$  inmersos en distintas configuraciones de campo. Arriba: cadena cíclica de  $N = 12$  espines  $1/2$  con configuraciones de campo next-alternating (izquierda) y con campos nulos en el bulk (derecha). Abajo: sistema abierto de  $3 \times 4$  espines  $1/2$  con campos alternantes (izquierda) y con campos nulos en el bulk (derecha). Todos los plateaus convergen en los puntos de factorización, donde el GS tiene los ángulos indicados en las figuras. Debido a la frustración inducida por campos, los diagramas presentan sectores reducidos con  $M = 0$ .

que este último aumenta. Este fenómeno permite por lo tanto seleccionar diferentes valores de magnetización en el GS variando los campos no uniformes. Un efecto similar al previamente mencionado -aunque atenuado- surge para las configuraciones con campos nulos en el bulk (paneles derechos). En estos tres casos, los espines en sitios sin campo pueden estar muy entrelazados en el plateau  $M = 0$  para campos grandes de signo opuesto. Para una discusión más detallada del diagrama de entrelazamiento en estos últimos casos ver el Apéndice B.

Para finalizar este capítulo, cabe mencionar que la frustración previamente men-

cionada, a la que hemos denominado *frustración inducida por campos*, es diferente a los otros tipos de frustración conocidos. Generalmente, la frustración surge debido a la geometría del sistema (arreglos triangulares de espines con interacción AFM) o debido a la competencia de interacciones de distintos vecinos (interacción de primeros vecinos FM e interacción de segundos vecinos AFM); pero en este caso es posible frustrar espines en *una cadena con interacción FM de primeros vecinos*. Como se discutirá en el Capítulo 7 las configuraciones de campos *n-alternating*, es decir, configuraciones de la forma  $h_1, 0, \dots, 0, h_2, 0, \dots$ , darán lugar a éste y otros fenómenos críticos no triviales aún en sistemas simples como la cadena ferromagnética con interacción de primeros vecinos.

## Comentarios finales

En este capítulo demostramos la existencia de familias de GS completamente separables que rompen con la simetría del Hamiltoniano y que por lo tanto surgen en un punto excepcionalmente degenerado donde todos los plateaus de magnetización convergen. A su vez, demostramos que este fenómeno puede aparecer para sistemas generales de espines  $s$  y para una amplia gama de configuraciones de campos. En particular, se discutió cómo al aplicar pequeñas variaciones en los CF es posible obtener distintos GS: desde separable, a entrelazados, y con cualquier magnetización  $|M| \leq S$ . En el siguiente capítulo se discuten con más detalle estas ideas de realizar ingeniería de estados fundamentales.

# Capítulo 6

## Ingeniería de estados separables

*“La Máquina no es más que una herramienta, al fin y al cabo, que puede contribuir al progreso humano encargándose de una parte de los cálculos e interpretaciones. La tarea del cerebro humano sigue siendo la que siempre ha sido; la de descubrir nuevos datos para ser analizados e inventar nuevas fórmulas para ser probadas.”*

- Extracto de “Yo, Robot” por I. Aasimov.

En los capítulos previos se estudió el fenómeno de factorización en distintos modelos de espín: cadenas con interacción  $XYZ$  FM y AFM en campos no transversos, y sistemas con interacción  $XXZ$  en campos transversos no uniformes. En cierto modo, los resultados presentados hasta ahora siguen el paradigma histórico con el cual se solía estudiar el fenómeno de factorización; ya que la “receta” a seguir es la siguiente

- 1) Definir el modelo bajo estudio. Es decir, especificar el Hamiltoniano del sistema

$$H = - \sum_i \mathbf{h}^i \cdot \mathbf{S}_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{S}_j,$$

aclarando el tipo de interacción  $\mathcal{J}^{ij}$  (si serán de tipo  $XX$ ,  $XYZ$ , etc.) y de campos aplicados  $\mathbf{h}^i$  (transversos, no transversos, uniformes, etc).

2) Dada la matriz de interacción  $\mathcal{J}^{ij}$ , resolver las EIC

$$\mathbf{n}_i^{x'} \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j^{x'} = \mathbf{n}_i^{y'} \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j^{y'}, \quad (6.1)$$

$$\mathbf{n}_i^{x'} \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j^{y'} = \mathbf{n}_i^{y'} \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{n}_j^{x'}, \quad (6.2)$$

para cada par de espines acoplados. De esta forma se determina cual es la dirección de alineación  $\mathbf{n}_i = (\sin \theta_i \cos \phi_i, \sin \theta_i \sin \phi_i, \cos \theta_i)$  de los espines del estado separable

$$|\Theta\rangle = \otimes_{i=1}^N R_i(\theta_i, \phi_i) |\uparrow_i\rangle = |\nearrow \rightarrow \swarrow \nwarrow\rangle, \quad (6.3)$$

que sea compatible con el modelo bajo estudio.

3) Habiendo determinado el estado  $|\Theta\rangle$ , resolver las EDC

$$\mathbf{h}_s^i = \mathbf{h}_{\parallel}^i + \mathbf{h}_{\perp}^i, \quad \mathbf{h}_{\parallel}^i = h_{\parallel} \mathbf{n}^i, \quad (6.4)$$

$$\mathbf{h}_{\perp}^i = \mathbf{n}^i \times \left( \mathbf{n}^i \times \left( \sum_j \mathcal{J}^{ij} \langle \mathbf{S}_j \rangle \right) \right). \quad (6.5)$$

para obtener cuales son los CF que se deben aplicar a cada sitio.

Este procedimiento se muestra esquemáticamente en el panel izquierdo de la Fig. 6-1.

Sin embargo, la simetría en las EIC (6.1)–(6.2) entre las direcciones de alineación y las constantes de acoplamiento permite pensar en realizar *ingeniería de estados separables*, donde se busca responder a la siguiente pregunta (ver panel derecho de la Fig. 6-1):

*Dado un estado separable, cuales son los Hamiltonianos que lo tienen como autoestado exacto?*

Como se mencionó en la introducción de la presente tesis, la idea de realizar ingeniería de GS separables está basada en el hecho que la gran mayoría de protocolos de procesamiento de información cuántica [23] y de simulación cuántica [37] presuponen que es posible inicializar al sistema en un estado separable al que se puede

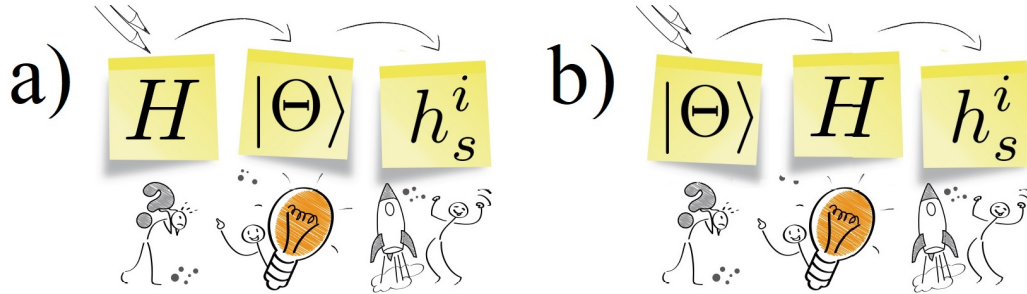


Figura 6-1: a) Representación esquemática del procedimiento usual a través del cual se estudia la factorización en sistemas de espines. El modelo bajo estudio -es decir, el Hamiltoniano del sistema- define cual es el estado separable realizable; y estos últimos permiten determinar los campos factorizantes. b) Representación esquemática del procedimiento de ingeniería de estados separables. Ahora, la idea es definir de antemano cual es el estado separable que queremos tener como GS. Así pues, a partir de este se define cómo se deben ajustar los parámetros del sistema; y estos últimos permiten determinar los campos factorizantes.

llegar con gran fidelidad. En particular, cuando un estado inicial producto no puede ser realizado con alta fidelidad dado que solo se puede acceder a una aproximación de éste -o, similarmente, cuando el sistema tiene muchas decoherencias- entonces se torna necesario implementar protocolos adicionales de corrección de errores [140].

Por lo general, la forma en que se suelen inicializar los ordenadores cuánticos basados en sistemas de espines es mediante la aplicación de campo magnético extremadamente intenso, de modo que los espines se alineen con el mismo (por ejemplo  $h_z \gg J_{\mu,\nu}^i$ ). Sin embargo, *la posibilidad de obtener un estado fundamental completamente separable -y no degenerado- para campos finitos y en presencia de interacciones no había sido explorada hasta ahora*. Así pues, en la Sección 6.1 del presente capítulo se estudiará -a través de varios ejemplos- la idea de realizar ingeniería de estados separables. Luego, en la Sección 6.2 se presentarán recetas para realizar esta ingeniería y se introducirá una notación que permite cuantificar la *complejidad* de una dada solución según el control que se requiera sobre los acoplamientos y campos del sistema. Finalmente, en 6.3 se analizará la posibilidad de utilizar estos estados iniciales separables para realizar protocolos de quantum annealing. Los resultados presentados en este capítulo fueron publicados en [2].

## 6.1. Ejemplos de ingeniería de estados separables

Como se demostró en el Lema 2 (Sección 2.3.2), dadas dos direcciones de alineación  $\mathbf{n}_i$  y  $\mathbf{n}_j$  -arbitrarias- en los sitios  $i$  y  $j$ , *siempre* existe un acoplamiento no nulo de tipo  $XYZ$   $J_{\mu\nu}^{ij} = \delta_{\mu\nu} J_{\mu}^{ij}$  tal que se cumplan las EIC. A continuación se muestran varios ejemplos de ingeniería de estados separables, y se presentan además resultados del entrelazamiento de pares en la vecindad de la factorización.

### 6.1.1. De la espirales de espín y otras soluciones separables

Vamos a considerar ahora tres casos en los que se empieza con el estado para luego derivar los acoplamientos y los campos compatibles: 1) ángulo  $\theta$  constante ( $\theta_i = \theta$  en todas las direcciones de alineación  $\mathbf{n}_i$ ), que incluye en particular los autoestados tipo *espiral de espín*; 2) ángulo  $\phi$  constante ( $\phi_i = \phi \forall \mathbf{n}_i$ ); y 3) solución uniformes ( $\theta$  y  $\phi$ ). Cabe recordar al lector que para un interacción tipo  $XYZ$   $J_{\mu\nu}^{ij} = \delta_{\mu\nu} J_{\mu}^{ij}$ , las EIC (6.1)–(6.2) se pueden escribir en la notación vectorial (ver Sección 2.3.2)

$$\mathbf{J}^{ij} \cdot \mathbf{U}^{ij} = 0, \quad \mathbf{J}^{ij} \cdot \mathbf{V}^{ij} = 0. \quad (6.6)$$

#### Ángulo $\theta$ constante

Sea el caso de  $\theta_i = \theta$  para todos los espines, con  $\phi_i$  arbitrario. Si  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son linealmente independientes -lo que implica aquí que  $\mathbf{n}_i + \mathbf{n}_j$  no pertenece a un plano principal- entonces las Ecs. (6.6) conducen a un *acoplamiento tipo XXZ*,

$$J_x^{ij} = J_y^{ij} = J^{ij}, \quad J_z^{ij} = J^{ij} \cos(\phi_i - \phi_j), \quad (6.7)$$

con  $J^{ij}$  arbitrario. Sorprendentemente, estas ecuaciones son *independientes de  $\theta$  y del promedio*  $(\phi_i + \phi_j)/2$ . De la Ec. (6.5) se obtiene que la componente perpendicular del CF pertenece al plano  $xy$ :  $\mathbf{h}_{\perp}^{ij} = J^{ij} s_j \sin(\phi_i - \phi_j)(\mathbf{e}_z \times \mathbf{n}_i)$ .

En particular, las cadenas de espines con interacción a primeros vecinos admiten una solución con *anisotropía uniforme*  $J_z^{ij}/J^{ij} = \cos \Delta\phi$ ; y por ende también existen

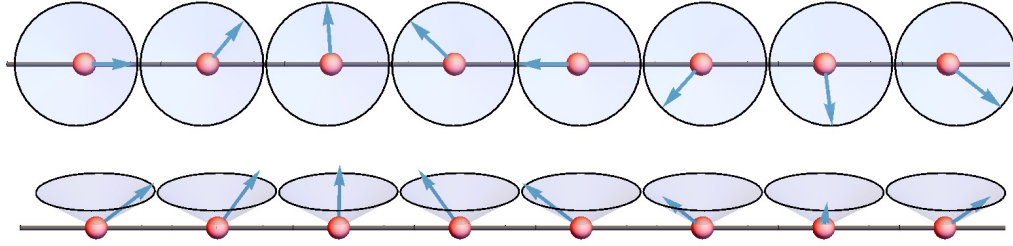


Figura 6-2: Representación esquemática de la solución separable de espiral de espín en una cadena. La dirección de alineación del espín en el sitio  $i$  está dada por  $\theta_i = \theta$  y  $\phi_i = \phi_1 + (i - 1)\Delta\phi \forall i$ . El panel superior se corresponde con una vista desde arriba, mientras que el inferior con una vista lateral.

soluciones con *acoplamientos uniformes* si  $\Delta\phi = \phi_{i+1} - \phi_i$  es *constante*. Cabe mencionar que en una cadena cíclica se debe imponer además la condición  $\Delta\phi = 2\pi k/N$ , con  $k$  cualquier número entero entre 1 y  $N - 1$ . Este tipo de solución, denominada *espiral de espín*, se muestra esquemáticamente en la Fig. 6-2.

En una cadena de espines  $s$ , el campo perpendicular total  $\mathbf{h}_\perp^i = \mathbf{h}_\perp^{i,i-1} + \mathbf{h}_\perp^{i,i+1}$  es

$$\mathbf{h}_\perp^i = (J^{i-1,i} - J^{i,i+1})s \sin \Delta\phi (\mathbf{e}_z \times \mathbf{n}_i). \quad (6.8)$$

La Ec. (6.8) muestra que si los acoplamientos son *uniformes* ( $J^{i,i+1} = J \forall i$ ), entonces  $\mathbf{h}_\perp^i = \mathbf{0}$ , y por lo tanto *la espiral de espines es un autoestado exacto en las cadenas cíclicas con interacción XXZ en ausencia de campos magnéticos* (para cadenas abiertas, se deben aplicar campos en los bordes  $\mathbf{h}_\perp^1$  y  $\mathbf{h}_\perp^N$ ). Dado que este estado rompe con la simetría del Hamiltoniano -pues no posee magnetización bien definida- entonces se corresponde con un autoestado muy degenerado de  $H$ , y en cadenas cíclicas surge cuando  $J_z^{ij}/J^{ij} = \cos \frac{2\pi k}{N}$ .

Es importante resaltar que para el caso previamente considerado -cadena con interacción XXZ de primeros vecinos- este autoestado será un estado excitado. Sin embargo, añadiendo en la cadena una interacción de segundos vecinos -o equivalentemente considerando una escalera de espín- entonces es posible que la espiral de espín sea el GS exacto del sistema a campo nulo [141]. En caso contrario, en la cadena con interacción de primeros vecinos siempre es posible aplicar campos paralelos  $\mathbf{h}_\parallel^i = h_\parallel \mathbf{n}_i$  para romper la degeneración y extraer la espiral de espines hasta que sea un GS no

degenerado con energía

$$E_{\Theta} = -Ns(h_{\parallel} + Js \cos \Delta\phi). \quad (6.9)$$

### Ángulo $\phi$ constante

Sea ahora el caso con  $\phi_i = \phi$  para todos los espines, mientras que los ángulos  $\theta_i$  son arbitrarios. Se asume por simplicidad que  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son linealmente independientes, es decir que  $\mathbf{n}_i + \mathbf{n}_j$  no pertenecen al mismo plano principal<sup>1</sup>, de modo que la Ec. (2.26) implica una vez más que *el acoplamiento es del tipo XXZ*

$$J_x^{ij} = J_y^{ij} = J^{ij}(1 - \eta_{ij}^2), \quad J_z^{ij} = J^{ij}(1 + \eta_{ij}^2), \quad (6.10)$$

donde  $\eta_{ij} = \sin(\theta_j - \theta_i)/\sin \bar{\theta}_{ij}$ , y con  $\bar{\theta}_{ij} = (\theta_i + \theta_j)/2$  y  $J^{ij}$  arbitrario. Estos acoplamientos son *independientes de  $\phi$*  pero dependen de  $\theta_i$  y  $\theta_j$ , con  $|J_z^{ij}| \geq |J^{ij}|$ .

Cuando la diferencia entre los ángulos es pequeña  $\theta_i - \theta_j = \delta\theta$ , entonces los campos ortogonales son  $\mathbf{h}_{\perp}^{ij} \approx -J^{ij} s_j \delta\theta \cos \bar{\theta}_{ij} (\cos \phi, \sin \phi, -\tan \bar{\theta}_{ij})$ , y pertenecen al plano definido por  $\mathbf{n}_i$  y por  $\mathbf{n}_j$ . En un sistema unidimensional con interacción de primeros vecinos, es posible obtener acoplamientos constantes para una configuración de tipo Néel con ángulos alternantes  $\theta_1\theta_2\theta_1\dots$ , dado que en este caso  $\bar{\theta}_{ij}$  y  $|\theta_i - \theta_j|$  son constante. En cualquier caso, la energía  $E_{\Theta}$  será independiente de  $\phi$ , con  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathcal{J}^{ij} \mathbf{S}_j \rangle = s_i s_j J^{ij} [\eta_{ij}^2 \cos 2\bar{\theta}_{ij} + \cos(\theta_i - \theta_j)]$ .

### Solución uniforme

Sea finalmente el caso en el que la dirección de alineación es  $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}$  para todos los espines ( $\theta_i = \theta$ ,  $\phi_i = \phi \forall i$ ). Si  $\mathbf{n}$  no pertenece a un plano principal,  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son linealmente independientes, entonces las Ecs. (6.7) o (6.10) conducen a  $J_{\mu}^{ij} = J^{ij}$ , es decir, acoplamientos *isotrópicos*  $\propto \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ . A su vez, la Ec. (2.27) implica que  $\mathbf{h}_{\perp}^{ij} = \mathbf{0}$ , de modo que no se requieren campos ortogonales pues el estado uniforme es un autoestado obvio de  $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$  para *cualquier* orientación  $\mathbf{n}$ .

<sup>1</sup>Cuando  $\mathbf{n}_i$  y  $\mathbf{n}_j$  pertenecen al mismo plano principal (de modo que  $\mathbf{U}^{ij}$  y  $\mathbf{V}^{ij}$  son linealmente dependientes) se obtienen las Ecs. (5.4)–(5.5) estudiadas en el Capítulo 5.



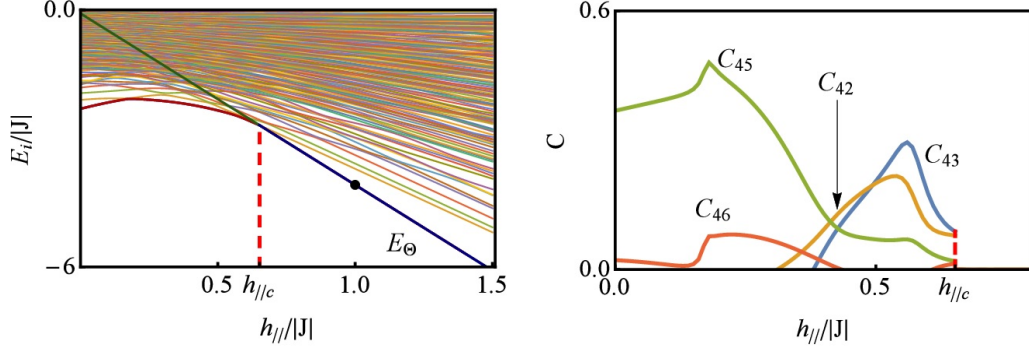


Figura 6-3: Panel izquierdo: espectro de energía escalizado para una cadena finita de  $N = 8$  espines  $1/2$  con interacción  $XYZ$  de primeros vecinos cuando se aplican los CF  $\mathbf{h}^i = \mathbf{h}_\perp^i + h_\parallel \mathbf{n}^i$ , con  $\mathbf{h}_\perp^i$  fijo y  $h_\parallel \geq 0$ . La línea decreciente representa la energía  $E_\Theta$  del autoestado separable  $|\Theta\rangle$ , que deviene el GS cuando  $h_\parallel > h_{\parallel c}$  (línea puntada). Panel derecho: Concurrencia  $C_{ij}$  en el GS exacto entre el espín central y sus primeros y segundos vecinos. Se puede ver que para  $h_\parallel < h_{\parallel c}$  el GS está entrelazado, mientras que si  $h_\parallel > h_{\parallel c}$  entonces es completamente separable. Todos los ejes son adimensionales.

Por otro lado, si  $\mathbf{n}$  pertenece a un plano principal  $\mu\nu$  ( $n_\sigma = 0$ ), entonces  $\mathbf{V}^{ij} = \mathbf{0}$  y también es posible determinar soluciones con acoplamientos uniformes siempre que  $\mathbf{J}$  sea ortogonal a  $\mathbf{U}^{ij}$ . Esta condición conduce a

$$J_\sigma^{ij} = J_\mu^{ij} n_\nu^2 + J_\nu^{ij} n_\mu^2 = J_\nu^{ij} + (J_\mu^{ij} - J_\nu^{ij}) \cos^2 \gamma, \quad (6.11)$$

con  $J_\mu^{ij}$ ,  $J_\nu^{ij}$  arbitrarios y  $\gamma$  el ángulo entre  $\mathbf{n}$  y el eje  $\mu$ . Este resultado implica por lo tanto un cociente fijo  $\frac{J_\sigma^{ij} - J_\nu^{ij}}{J_\mu^{ij} - J_\nu^{ij}}$ . Los CF pertenecen entonces al mismo plano principal, con

$$\mathbf{h}_\perp^i = \sin \gamma \cos \gamma (\mathbf{e}_\sigma \times \mathbf{n}) \sum_j s_j (J_\mu^{ij} - J_\nu^{ij}). \quad (6.12)$$

Este caso se corresponde por lo tanto al estudiado en el Capítulo 3 [1].

### 6.1.2. Sobre el entrelazamiento de pares

En las Figs. 6-3 y 6-4 se muestra el comportamiento del entrelazamiento de pares en el GS exacto de una cadena de espines  $1/2$  con interacción de primeros vecinos inmersa en campos no uniformes; la misma fue medida a través de la Concurrencia

(ver (1.37) en la Sección 1.4.2). Así pues, se consideró para este ejemplo un autoestado completamente separable en el que las direcciones de alineación de los espines fueron elegidas *al azar*. Luego, las constantes de acoplamiento entre cada par de espines fueron determinadas mediante la Ec. (2.25) ( $\mathbf{J}^{ij} = j^{ij}(\mathbf{U}^{ij} \times \mathbf{V}^{ij})$ ) con la salvedad que se fijó una norma uniforme  $|\mathbf{J}^{ij}| = J$  para todos los vectores de acoplamiento.

Como se mencionó en el Lema 1 de la Sección 2.3.1, para que  $|\Theta\rangle$  sea el GS se aplicaron en cada sitio campos no uniformes  $\mathbf{h}^i = \mathbf{h}_\perp^i + h_\parallel \mathbf{n}^i$  con  $\mathbf{h}_\perp^i$  los CF ortogonales (6.5) y  $h_\parallel \geq 0$ . Cuando  $h_\parallel = 0$ ,  $|\Theta\rangle$  es un autoestado exacto de  $H$ , aunque no es el GS. No obstante, como se muestra en el panel izquierdo de la Fig. 6-3, la energía  $E_\Theta = \langle \Theta | H | \Theta \rangle$ , dada por la Ec. (2.21), decrece linealmente -con la máxima pendiente posible- a medida que aumenta  $h_\parallel$ . Finalmente, existe un valor crítico  $h_\parallel = h_{\parallel c}$  en el que ocurre una transición en el GS tal que  $|\Theta\rangle$  es el GS del sistema  $\forall h_\parallel > h_{\parallel c}$  (Lema 1 del Capítulo 2). Consecuentemente, las Concurrencias de pares en el GS se anulan cuando  $h_\parallel > h_{\parallel c} \forall i, j$ , como se puede ver en el panel derecho de la Fig. 6-3.

Por otro lado, en la Fig. 6-4 se muestra el comportamiento de la Concurrencia de pares en la vecindad de la factorización. En particular, es importante mencionar que se eligió un punto de factorización estable (el punto en  $h_\parallel/|\mathbf{J}| = 1$  de la Fig. 6-3); es decir, en el que el gap con el primer estado excitado es suficientemente grande, y por lo tanto cualquier pequeña perturbación genera simplemente variaciones suaves en el GS sin que se llegue a un cruce de estados. Obviamente, las correcciones al campo fueron elegidas en una dirección perpendicular a la dirección de alineación, ya que cualquier perturbación  $\Delta h_\parallel \mathbf{n}_i$  solamente cambiará la energía del GS. En acuerdo con el Lema 5 de la Sección 2.3.5, se verifica que todas las Concurrencias  $C_{ij}$  se prenden en la vecindad cercana a la factorización para perturbaciones en los acoplamientos (paneles superiores) y en los campos (paneles inferiores). Se ve además que para pares distantes este entrelazamiento será pequeño -pero no nulo- y se anula cuando la perturbación es grande.

Estos resultados muestran que los puntos de factorización son en efecto puntos críticos cuánticos, ya que el rango de las correlaciones diverge en su vecindad.

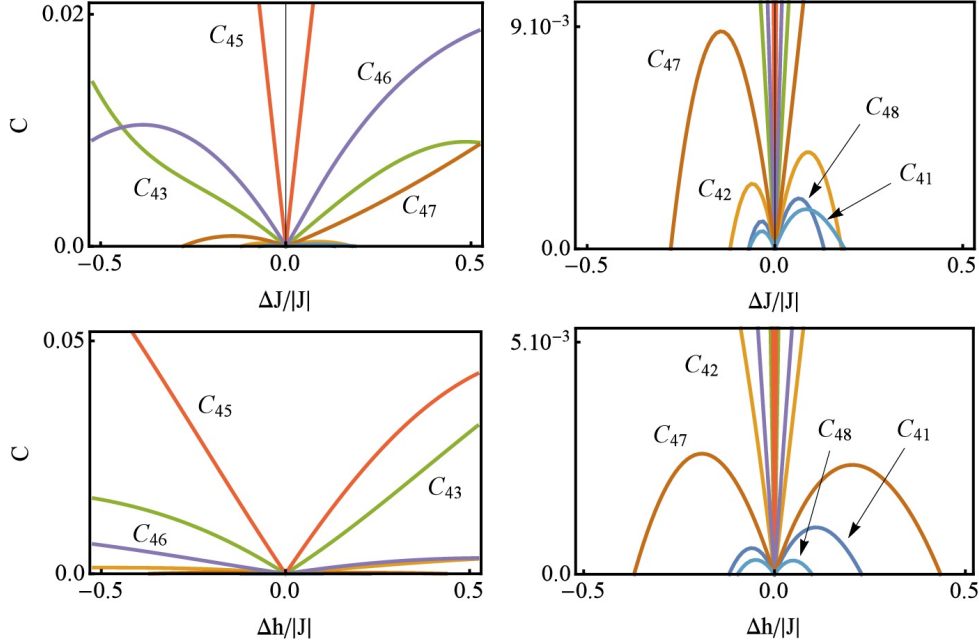


Figura 6-4: Concurrencias  $C_{ij}$  entre los espines  $i$  y  $j$  en el GS de la cadena de la Fig. 6-3 en la vecindad de la factorización (punto  $h_{\parallel}/|\mathbf{J}| = 1$  en la Fig. 6-3). En los paneles superiores se fijaron los acoplamientos como  $J_{\mu}^{ij} + \Delta J \forall i, j$ , con  $J_{\mu}^{ij}$  los valores que conducen a la factorización, de forma que  $C_{ij} = 0 \forall i, j$  si  $\Delta J = 0$ . En los paneles inferiores se fijaron los valores de los acoplamientos a los valores de la factorización, pero ahora los campos están dados por  $\mathbf{h}^i + \Delta h \mathbf{n}_{i\perp}$ , con  $\mathbf{n}_{i\perp} \propto \mathbf{h}_{\perp}^i$ , de tal forma que  $C_{ij} = 0 \forall i, j$  si  $\Delta h = 0$ . Se verifica que  $C_{ij}$  alcanza rango completo en la vecindad del punto de factorización. Los paneles de la derecha muestran con más detalle las mismas cantidades del panel izquierdo pero a una escala más pequeña.

## 6.2. Recetas para preparar estados separables

Como se discutió al principio del presente capítulo, uno de los objetivos principales de nuestro trabajo [2] era el proveer “recetas” para realizar ingeniería de estados separables no triviales en sistemas de espines en interacción.

Como se muestra esquemáticamente en la Fig. 6-1, hemos considerado que existen dos formas de obtener estados separables:

- Cuando se especifican las direcciones de alineación  $\mathbf{n}_i$  de los espines y luego se determinan las constantes de acoplamiento  $\mathbf{J}^{ij}$  compatibles (Lema 2).
- Cuando las constantes de acoplamiento  $\mathbf{J}^{ij}$  están fijas y se determinan las direcciones de alineación compatibles (Lema 3).

Por un lado, para el primer caso, es obvio que una condición necesaria para realizar la ingeniería de GS separables es que los acoplamientos entre los espines sean *regulables*. Si bien esta condición parece muy exigente, existen diversos sistemas físicos que pueden simular sistemas de espines y en los que se tiene suficiente control sobre los parámetros del Hamiltoniano. Por ejemplo, se pueden mencionar los sistemas de espines basados en puntos cuánticos (quantum dots) [142, 143], junturas de Josephson superconductoras [144], y estados de espín nuclear (o electro-nuclear) [145] (ver el Apéndice A para una discusión detallada sobre la simulación de sistemas de espines con acoplamientos y campos controlables). Por otro lado, en el segundo caso previamente mencionado, los constantes de interacción están *fijas* y el Lema 3 determina los posible autoestados separables que el sistema puede poseer. Este caso es más restrictivo que el anterior, ya que suponemos que se tiene poco -o ningún- control sobre los acoplamientos.

Por lo tanto, dependiendo de cuanto control se tenga sobre el sistema, el problema puede ser considerado desde un punto de visto o el otro. Así pues, para cuantificar este control (y suponiendo que siempre es posible aplicar un campo uniforme al sistema) introducimos la *complejidad experimental*

$$\varepsilon_c = (\mathbf{m}, \mathbf{k}). \quad (6.13)$$

Esta última indica que un sistema de  $N$  espines interactuantes tendrá un dado autoestado separable como su GS, si se tiene control sobre  $m \leq N - 1$  campos locales y sobre  $k$  constantes de acoplamiento entre los espines. Como se demostrará más adelante, los estados que requieren el menor control son aquellos en los que el estado es uniforme.

### 6.2.1. Constantes de acoplamiento regulables

Como se demostró en el Lema 2, al especificar las direcciones de alineación  $\mathbf{n}_i$  y  $\mathbf{n}_j$  de un par de espines interactuantes, siempre es posible determinar el vector de intercambio  $\mathbf{J}^{ij}$  y los CF  $\mathbf{h}_{\perp}^{ij}$ ,  $\mathbf{h}_{\perp}^{ji}$ . Luego, aplicando campos paralelos en cada sitio,

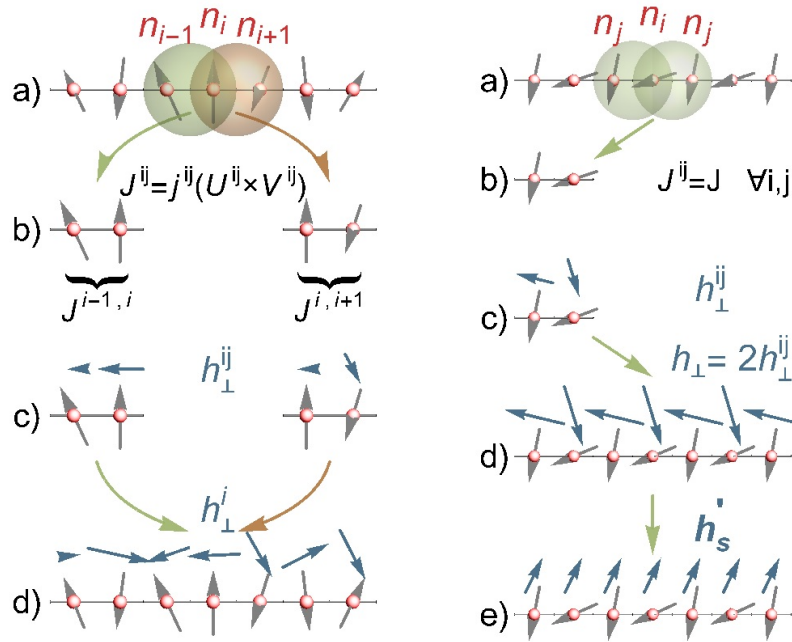


Figura 6-5: Representación esquemática de protocolos de ingeniería de estado separable con direcciones de alineación  $\mathbf{n}_i$  arbitrarias en cada sitio (panel izquierdo), y con una configuración de tipo Néel (panel derecho). De arriba hacia abajo: a) Se especifican las direcciones de alineación en cada sitio. Luego, para cada par se determinan b) las constantes de acoplamiento y c) los campos perpendiculares. d) El campo perpendicular total en cada sitio es  $\mathbf{h}_{\perp}^i = \sum_j \mathbf{h}_{\perp}^{ij}$ . e) El campo factorizante uniforme  $\mathbf{h}'_s$  queda determinado por el Lema 4.

el estado separable  $|\Theta\rangle$  puede llegar a ser un GS no degenerado de  $H$  (Lema 1). Asumiendo que siempre se puede aplicar un campo uniforme, entonces para un único par de espines se obtiene  $\boldsymbol{\varepsilon}_c = (\mathbf{1}, \mathbf{1})$ . Similarmente, para una cadena de  $N$  espines con interacción de primeros vecinos:  $\boldsymbol{\varepsilon}_c = (N - \mathbf{1}, N - \mathbf{1})$  en el caso de la cadena abierta; y  $\boldsymbol{\varepsilon}_c = (N - \mathbf{1}, N)$  para el caso cíclico (Fig. 6-5).

Para reducir la complejidad requerida, se puede determinar bajo qué condiciones se obtiene separabilidad aplicando solamente un campo uniforme. Según el Lema 4, siempre será posible determinar un campo factorizante uniforme en sistemas de dos espines idénticos si las direcciones de alineación  $\mathbf{n}_1$  y  $\mathbf{n}_2$  cumplen con las Ecs. (6.6) (y si no son antiparalelas). Sin embargo, si  $\mathbf{n}_1 \neq \mathbf{n}_2$  este autoestado será doblemente degenerado -debido a que rompe la simetría básica de permutación- y se deberán añadir campos paralelos para romper esta degeneración. Por lo tanto, la complejidad

sigue siendo la misma si queremos un GS no degenerado.

Este último resultado sigue siendo válido en cadenas cíclicas con interacción de primeros vecinos y un número par de espines si se busca que el estado separable tenga una configuración alternante tipo Néel ( $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}_1$  ( $\mathbf{n}_2$ ) para  $i$  par (impar)). Siguiendo la misma receta anteriormente discutida (con la salvedad que los campos perpendiculares deben ser multiplicados por un factor de 2 debido a la presencia de ambos vecinos), entonces es posible obtener tal autoestado al aplicar un campo uniforme (panel derecho de la Fig. 6-5). Como se mencionó en el Capítulo 3, esta solución fue determinada por Kurmann y se corresponde con el GS para acoplamientos de tipo AFM [34], pero seguirá siendo doblemente degenerada. Esta degeneración se puede romper al aplicar un campo alternante.

Por el otro lado, si  $s_i = s_j$  y  $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}_j$  (solución uniforme), el CF uniforme es simplemente  $\mathbf{h}_s = \mathbf{h}_{\parallel} + \mathbf{h}_{\perp}$ , donde la intensidad del campo paralelos  $h_{\parallel}$  es completamente arbitraria. Por lo tanto, según el Lema 1, es posible que este autoestado sea un GS no degenerado al aplicar un solo campo uniforme  $\mathbf{h}_s$ ; y es tal que el gap con el primer estado excitado es arbitrariamente grande. Así pues, para un par de espines esto último implica que la complejidad es  $\epsilon_c = (\mathbf{0}, \mathbf{1})$ . Siguiendo los mismos argumentos, en una cadena cíclica de  $N$  (par o impar) espines con interacción de primeros vecinos tal estado requiere  $\epsilon_c = (\mathbf{0}, \mathbf{N})$ . Sin embargo, en el caso de una cadena abierta hace falta corregir los campos en el borde -ya que los espines en estos sitios tienen un solo vecino- y por lo tanto  $\epsilon_c = (\mathbf{2}, \mathbf{N} - \mathbf{1})$ .

## Ingeniería de estados en bulk

Ciertamente, lograr tal control sobre las interacciones y campos locales presenta un enorme desafío en sí mismo. Sin embargo, este requisito puede ser relajado si se consideran esquemas de computación basados en clusters de espines [146], en los que el qubit está codificado en varios espines. De esta forma, los resultados previos pueden ser utilizados como ladrillos fundamentales para realizar ingeniería de estados separables por bulk. Si la configuración de espines de cada bulk es uniforme, entonces el campo factorizante es también uniforme, y solo se requiere tener control sobre las

interacciones y los campos locales en los bordes del bulk.

### 6.2.2. Constantes de acoplamiento fijas

Sea un par de espines interactuantes, dadas la dirección de alineación  $\mathbf{n}_j$  para uno de ellos, según el Lema 3 siempre se puede determinar una dirección de alineación  $\mathbf{n}_i$  para el otro espín, independientemente del tipo de acoplamiento entre ellos. Por lo tanto, al aplicar los campos adecuados se puede obtener un GS completamente separable con  $\boldsymbol{\varepsilon}_c = (\mathbf{1}, \mathbf{0})$ . Así pues, este resultado se puede utilizar para determinar las soluciones separables compatibles con los acoplamientos fijos en sistemas finitos. Por ejemplo, en una cadena abierta de  $N$  espines con interacción de primeros vecinos, al especificar la dirección de alineación de uno de los espines, este método permite determinar las posibles direcciones de alineación del resto de los espines (como se muestra en el panel derecho de la Fig. 2-3, típicamente habrá  $2^{N-1}$  configuraciones). Este protocolo de ingeniería de estados separables está esquemáticamente representado en el panel izquierdo de la Fig. 6-6. En este caso,  $\boldsymbol{\varepsilon}_c = (N - \mathbf{1}, \mathbf{0})$ . Finalmente, es importante mencionar que para cadenas cíclicas se requiere control de las constantes de acoplamiento entre dos espines, es decir, que  $\boldsymbol{\varepsilon}_c = (N - \mathbf{1}, \mathbf{1})$ .

Si ahora se considera el caso de sistemas unidimensionales con interacciones *uniformes*,  $\mathbf{J}^{ij} = \mathbf{J}$ , entonces la solución uniforme  $\mathbf{n}_i = \mathbf{n} \forall i$  será *siempre* realizable si se elige convenientemente la dirección de alineación  $\mathbf{n}$ . Luego, si los acoplamientos son *isotrópicos*,  $J_\mu = J$ ,  $\mu = x, y, z$ , entonces  $\mathbf{n}$  será arbitrario. Es decir, dado cualquier dirección de alineación en el sitio  $j$ , la solución para  $\mathbf{n}_i$  que se obtiene mediante el Lema 3 será exactamente  $\mathbf{n}_j$  para cualquier elección de  $\mathbf{n}_j$ . Sin embargo, si las constantes de intercambio son *anisotrópicas*, entonces se podrá obtener una solución uniforme siempre que  $\mathbf{n}_j$  pertenezca a un plano principal y cumpla con las Ec. (6.11) (ver panel derecho de la Fig. 6-6).

Así pues, cuando la cadena es cíclica (con interacciones isotrópicas o anisotrópicas), las soluciones uniformes  $|\Theta\rangle$  pueden ser GS no degenerados mediante la aplicación de un campo uniforme. Es decir, que en este caso  $\boldsymbol{\varepsilon}_c = (\mathbf{0}, \mathbf{0})$ ; mientras que para cadenas abiertas  $\boldsymbol{\varepsilon}_c = (\mathbf{2}, \mathbf{0})$ , debido a las correcciones en los bordes. Por otra parte,

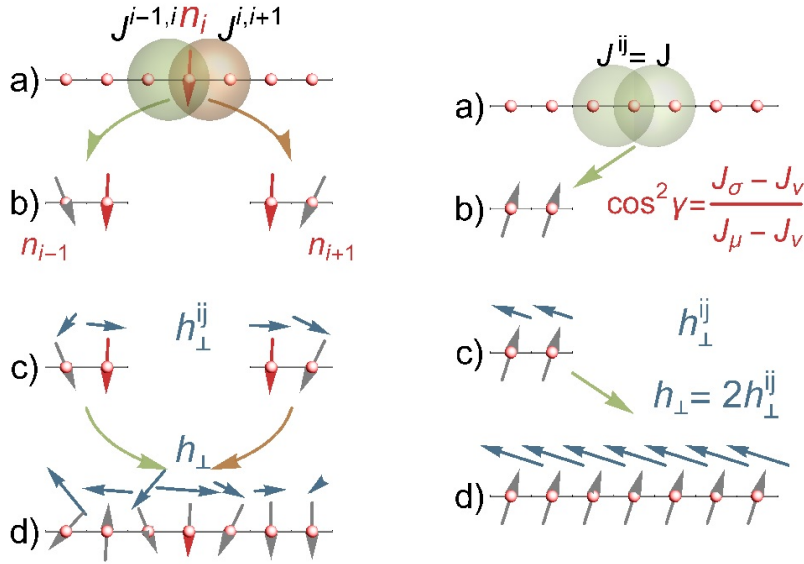


Figura 6-6: Representación esquemática de protocolos de ingeniería de estados separables en una cadena con acoplamientos no uniformes (panel izquierdo) y con acoplamientos uniformes anisotrópicos (panel derecho). De arriba hacia abajo: a) Las constantes de interacción están fijas. Izquierda: b) dada la dirección de alineación de uno de los espines el resto de las direcciones de alineación se obtienen mediante aplicaciones sucesivas del Lema 3. Derecha: b) la solución factorizada puede ser uniforme, con  $\mathbf{n}$  perteneciendo a un plano principal  $\mu\nu$  determinado por las constantes de acoplamiento. c-d) Los campos factorizantes se obtienen mediante las EDC.

las soluciones de tipo Néel son realizables en cadenas con interacción uniforme de primeros vecinos, pero requieren de la aplicación de campos alternantes para romper la degeneración y llegar a ser un GS no degenerado.

Para terminar esta sección cabe mencionar que las soluciones uniformes se pueden extender fácilmente para sistemas de mayor dimensión, con diferentes geometrías y con acoplamientos de mayor rango [1]. Así, si el sistema es abierto, se deberán simplemente corregir los campos en los bordes adecuadamente. De este modo, el GS separable uniforme es aquel que requiere el menor control sobre el sistema.

### 6.3. Implementación para quantum annealing

Dado un GS completamente factorizado, este se puede usar como estado inicial de protocolos de computación que requieren ser inicializados en un estado separable



[18, 23, 36]. En esta sección se discute brevemente una posible implementación que permite utilizar los estados factorizados en protocolos de quantum annealing <sup>2</sup>.

En los protocolos de *quantum annealing*, se busca resolver algún problema de optimización o de muestreo. Si bien el problema consiste en encontrar el mínimo de una función, se puede demostrar que este puede ser mapeado a un problema que consiste en determinar el GS de un dado Hamiltoniano. En la versión clásica de este algoritmo, conocida como *simulated annealing*, se provocan alteraciones térmicas en los estados para verificar si atraviesan una barrera de potencial. Por otro lado, en el quantum annealing se aprovecha además del efecto túnel para cruzar barreras de potencial. Por consiguiente, el quantum annealing permite determinar más rápido y con mayor fidelidad la solución al problema cuando el perfil de la función está compuesto por mínimos en valles separados por crestas altas y estrechas. En el año 1998, T. Kadowaki y H. Nishimori publicaron un trabajo seminal llamado “*Quantum Annealing in the Transverse Ising Model*” [147], en el cual demuestran que un protocolo de quantum annealing realizado en un sistema de espines con interacción de Ising de primeros vecinos en campos no transversos permite obtener mejores resultados que aquellos obtenidos mediante un simulated annealing.

En general, en los algoritmos típicos de quantum annealing, el sistema es inicializado en el GS separable de un Hamiltoniano trivial no interactuante. Es decir, dado un modelo de Ising en campos no transversos, se aplica al sistema un campo “infinito” (o, equivalentemente, se apagan las interacciones y el campo transversal)

$$H(t = 0) = - \sum_i JS_i^z S_{i+1}^z - \sum_i h_z S_i^z - \sum_i h_x S_i^x. \quad (6.14)$$

Luego, el sistema es llevado en forma continua hacia un Hamiltoniano final cuyo GS se busca determinar [148, 149]

$$H(t = \infty) = - \sum_i JS_i^z S_{i+1}^z - \sum_i h_z S_i^z - \sum_i h_x S_i^x. \quad (6.15)$$

---

<sup>2</sup>Actualmente estamos estudiando este problema en colaboración con M.Sc. J. D. Chang y con el Dr. G. Ramirez de la Universidad de San Carlos de Guatemala.

Así pues, con los resultados previamente obtenidos se puede pensar en un protocolo de quantum annealing en el cual las interacciones *siempre están prendidas*. Ahora, el Hamiltoniano inicial es

$$H(t = 0) = - \sum_i JS_i^z S_{i+1}^z - \sum_i h_{zs}^i S_i^z - \sum_i h_{xs}^i S_i^x, \quad (6.16)$$

con  $h_{xs}^i$  y  $h_{zs}^i$  las componentes del CF; mientras que el Hamiltoniano final sigue siendo (6.15). Cabe mencionar que este novedoso protocolo de iniciación permite empezar de un GS separable con un gap arbitrariamente grande, y la idea fundamental es aprovechar las correlaciones de largo alcance en la vecindad de la factorización para recorrer el espacio de fase y converger hacia la solución del problema. Adicionalmente, dado que el Lema 3 asegura la existencia de múltiples estados separables, entonces puede resultar también de gran interés estudiar el efecto que la semilla inicial del estado separable pueda tener con el resultado del annealing.

## Comentarios finales

A raíz de haber estudiado el fenómeno de factorización en sistemas de espines hemos sido capaces de descubrir nuevos GS separables y nuevos fenómenos críticos (Capítulos 3, 4 y 5); así como hemos propuestos métodos de ingeniería de estados separables que pueden ser utilizados como estados iniciales en protocolos de computación e información cuántica. En el próximo capítulo se mostrará que el análisis de la factorización nos permitió también demostrar la posibilidad de inducir fenómenos críticos no triviales mediante la aplicación de campos no uniformes.

# Capítulo 7

## Induciendo fenómenos críticos a través de campos $n$ -alternantes

*Es correcto, necesario e importante establecer metas y perseguirlas. Pero hacerlo de manera excepcional, particularmente con respecto a aquellos caminos que llevarán muchos meses, incluso años, es perder de vista el propósito más grande. Es el viaje en sí lo que es importante, ya que es la suma de todas esas aventuras, planeadas o inesperadas, la que nos hace quienes somos.*

- Extracto de “*Los compañeros*” por R. A. Salvatore.

Quizás uno de los resultados más interesantes del Capítulo 5 -donde se consideraron sistemas de espines con interacción  $XXZ$  en campos transversos no uniformes- es el haber descubierto que los puntos multicríticos de factorización puede surgir para una amplia configuración de campos. En particular, al estudiar los distintos diagramas de fase resultó evidente que existen configuraciones de campos que conducen a novedosos fenómenos críticos (ver Fig. 5-4 en la Sección 5.4).

Cabe remarcar que los comportamientos críticos y las transiciones de fase que surgen cuando algún parámetro de control es variado constituyen una de las características más distintivas del comportamiento cooperativo en sistemas cuánticos de muchos cuerpos interactuantes [150–155]. En este contexto, la emergencia de fenómenos como la frustración [156, 157] y la aparición de mesetas (o plateaus) de magnetización en

el límite de sistemas grandes [158–163] son típicamente asociados con sistemas anti-ferromagnéticos con interacciones que compiten entre ellas [164, 165], o con sistemas con geometrías no triviales [166].

Sin embargo, se sabe muy poco sobre las propiedades críticas que pueden ser inducidas en sistemas de espines a través de la aplicación de campos o acoplamientos no uniformes [1, 3, 90, 167–170]. Así pues, la gran mayoría de trabajos con campos no homogéneos analizan el caso de campos alternantes. Sin embargo, como se demostró en el Capítulo 5, las configuraciones de campos dispersos periódicos (como por ejemplo el caso next-alternating) dan lugar a fenómenos interesantes y se pueden considerar como una generalización simple del caso alternante estándar. Como se discute en detalle en el Apéndice A, la posibilidad de simular sistemas de espines finitos con acoplamientos y campos controlables hace que sea de gran interés estudiar fenómenos críticos en sistemas finitos con acoplamientos y campos más generales.

Así pues, en este capítulo se discuten los recientes resultados obtenidos en nuestro trabajo [5], en el que mostramos -a través del estudio del modelo  $XXZ$ - que la aplicación de campos dispersos periódicos en cadenas con interacción ferromagnética conduce a novedosos diagramas de fase de magnetización y entrelazamiento para el GS del sistema.

En primer lugar, en la Sección 7.1 se introducirán las configuraciones de campos  $n$ -alternantes. Luego, en 7.2 se determinará analíticamente el borde de la fase completamente alineada y se mostrará que existe un valor crítico de la anisotropía, debajo del cual la máxima magnetización que el sistema alcanza es mucho menor. En la Sección 7.3 se discutirá cómo es que estos campos no uniformes conducen a la aparición de plateaus de magnetización que persisten para cadenas grandes (como pudimos verificar con cálculos de density matrix renormalization, o DMRG); y que cumplen con una condición que normalmente está asociada con sistemas antiferromagnéticos más complejos. Asimismo, se explica la presencia de estos plateaus mediante la aparición de un fenómeno de polimerización inducida por los campos. Finalmente, en la Sección 7.4 se estudiará el entrelazamiento en el GS.

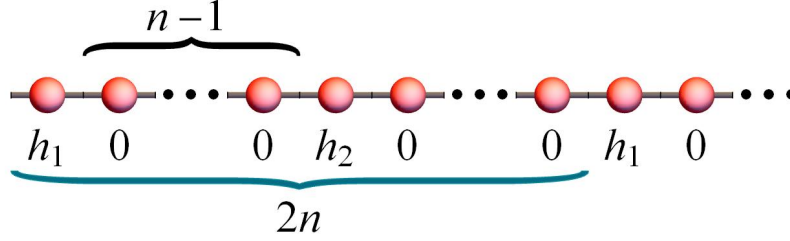


Figura 7-1: Representación esquemática de una cadena de espines inmersa en una configuración de campos  $n$ -alternante (Ec. (7.2)). El número de sitios intermedios sin campo es  $n - 1$ , mientras que el período es  $2n$ .

## 7.1. De las configuraciones de campo $n$ -alternantes

En este capítulo se considera una cadena cíclica de  $N$  espines  $s$  acoplados mediante una interacción de primeros vecinos de tipo  $XXZ$  en presencia de campos uniformes no transversos a lo largo del eje  $z$ . Así, el Hamiltoniano del sistema es

$$H = - \sum_{j=1}^N [h^j S_j^z + J(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y) + J_z S_j^z S_{j+1}^z], \quad (7.1)$$

con  $h^j$ ,  $S_j^\mu$  las componentes del campo y del espín respectivamente, y con  $J$  y  $J_z$  las constantes de acoplamiento uniforme. Como se discutió en la Sección 5.1, los autoestados de (7.1) poseen buena magnetización  $M$  en el eje  $z$ . En este caso, se puede fijar -sin pérdida de generalidad-  $J > 0$ , ya que el espectro de energías y las propiedades de entrelazamiento son las mismas para  $\pm J$  (el signo puede ser cambiado mediante rotaciones locales de ángulo  $\pi$  al rededor del eje  $z$  en los sitios pares). Luego, estas propiedades son también idénticas para  $(\{h^j\}, M)$  y para  $(-\{h^j\}, -M)$  (ya que estos casos se pueden mapear entre ellos mediante una rotación global de ángulo  $\pi$  al rededor del eje  $x$ , que a su vez no modifica los acoplamientos).

En cuanto a la configuración de campos, se estudiarán las *configuraciones de campos  $n$ -alternantes*, que se muestran en la Fig. 7-1, y que están definidas por

$$h^j = \begin{cases} h_1, & j = 1, 2n + 1, 4n + 1, \dots \\ h_2, & j = n + 1, 3n + 1, 5n + 1, \dots \\ 0, & \text{caso contrario} \end{cases} \quad (7.2)$$

Nótese que el caso alternante (A) usual  $(h_1, h_2, h_1, h_2, \dots)$  corresponde a  $n = 1$ , mientras que  $n = 2$  define el caso “next-alternating” (NA)  $(h_1, 0, h_2, 0, \dots)$  (que ya fue mencionado en la Sección 5.4), y  $n = 3$  indica el caso “next-next-alternating” (NNA)  $(h_1, 0, 0, h_2, 0, 0, \dots)$ . En este trabajo, se fijó  $N = 2nK$ , con  $K$  el número de celdas de  $2n$  espines. En lo que sigue del presente capítulo, primero se derivarán resultados generales válidos  $\forall n$ , y luego nos centraremos en los tres casos previamente mencionados.

## 7.2. Sobre el borde de la fase alineada

Dado que la interacción es ferromagnética, es evidente que en el caso alternante  $n = 1$  cuando los campos  $h_1$  y  $h_2$  son paralelos y suficientemente intensos entonces los espines se alinearán con los campos aplicados y el sistema estará en una fase ordenada ferromagnética. Sin embargo, al considerar configuraciones con  $n \geq 2$  (campos disperso) surge una primer pregunta fundamental:

*¿Es posible inducir una fase completamente alineada de magnetización máxima -y por lo tanto separable- para configuraciones  $n$ -alternantes con  $n \geq 2$ ?*

Como se demostrará a continuación, es posible que esta fase sea inalcanzable sin la ayuda de una interacción ferromagnética finita  $S_j^z S_{j+1}^z$ ; es decir, que existe un valor umbral  $J_z^c(n) > 0$  de  $J_z$ .

El borde de la fase alineada puede ser obtenido mediante la determinación de los campos en los cuales el GS del sistema experimenta la transición de magnetización  $|M| = Ns \rightarrow Ns - 1$ . Como se demuestra en el Apéndice C, estos bordes están dados por *ramas de hipérbolas*  $\forall n \geq 1$ : El GS tendrá  $M = Ns$  si

$$(h_1 + \beta_n)(h_2 + \beta_n) > \alpha_n^2, \quad (7.3)$$

siempre que  $h_1 + h_2 > 0$  y  $h_i > -\beta_n$ ; y tendrá  $M = -Ns$  si

$$(h_1 - \beta_n)(h_2 - \beta_n) > \alpha_n^2, \quad (7.4)$$

siempre que  $h_1 + h_2 < 0$  y  $h_i < \beta_n$ . Aquí se definieron

$$\alpha_n = 2h_s \frac{j^n}{(j_z + h_s)^n - (j_z - h_s)^n}, \quad j_z > j_z^c(n), \quad (7.5)$$

$$\beta_n = h_s \frac{(j_z + h_s)^n + (j_z - h_s)^n}{(j_z + h_s)^n - (j_z - h_s)^n} = \sqrt{\alpha_n^2 + h_s^2}, \quad (7.6)$$

con  $j = 2sJ$ ,  $j_z = 2sJ_z$  y

$$h_s = \sqrt{j_z^2 - j^2}, \quad (7.7)$$

el *campo factorizante* determinado para este modelo en el Capítulo 5 [3].

De estas ecuaciones se puede ver que  $\alpha_n$  y  $\beta_n$  dependen de las constantes de acoplamiento escalizadas  $j$  y  $j_z$  (de forma que  $\alpha_n/j$  y  $\beta_n/j$  dependen solamente de la anisotropía  $j_z/j$ ), pero son *estrictamente independientes del número total de celdas*  $K$ . Las Ecs. (7.5)-(7.6) son válidas (y reales) tanto para  $h_s$  real ( $j_z > j$ ) o imaginario ( $j_z < j$ ), pero en este último caso el denominador de (7.5) y (7.6) se anula para

$$j_z \rightarrow j_z^c(n) = j \cos(\pi/n), \quad n \geq 2. \quad (7.8)$$

Esta ecuación implica que  $\alpha_n$  y  $\beta_n$  *divergen* para  $j_z \rightarrow j_z^c(n)^+$ . De esta forma, *la fase alineada es inalcanzable cuando  $j_z \leq j_z^c(n)$* . Esencialmente esta condición se deriva del hecho que por debajo de  $j_z^c(n)$  el estado máximamente alineado es inestable frente a excitaciones de spin flip para cualquier valor de los campos (ver Apéndice C). De hecho, como se muestra en ese Apéndice,  $-j \cos(\pi/n)$  representa la energía más baja de los  $n - 1$  espines intermedios cuando  $j_z = 0$  y la magnetización es  $M_{n-1} = (n - 1)s - 1$ .

### 7.2.1. De los casos $n = 1, 2, 3$ (A, NA y NNA)

En el caso alternante estándar  $n = 1$ , las Ecs. (7.5)-(7.6) implican que

$$\alpha_1 = j, \quad \beta_1 = j_z, \quad (7.9)$$

y se verifica que la fase alineada se puede alcanzar  $\forall j, j_z$  si los campos  $h_1, h_2$  son lo suficientemente intensos.

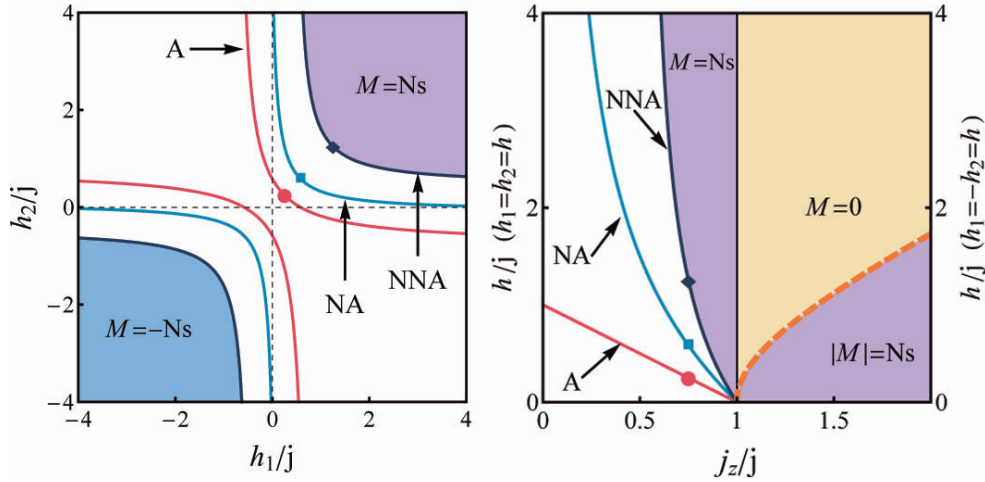


Figura 7-2: Diagramas de fase del GS de una cadena de espines  $s$  con interacción tipo  $XXZ$  en configuraciones de campo A ( $n = 1$ ), NA ( $n = 2$ ) y NNA ( $n = 3$ ). Izquierda: las ramas de hipérbola (7.3)–(7.4) delimitan las fases  $M = \pm Ns$  completamente alineadas (para  $j_z/j = 0,75$ ). Las regiones coloreadas indican que la magnetización del GS es  $|M| = Ns$  en los tres casos. Derecha: Valor umbral (7.12) (línea sólida) de la fase de GS máximamente alineado para campos paralelos  $h_1 = h_2$  y  $j_z < j$ . Como se puede ver, este valor diverge cuando  $j_z \rightarrow 0$  en el caso NA y cuando  $j_z \rightarrow j/2$  en el NNA. El límite (7.7) (línea puntada) que surge para campos antiparalelos  $h_1 = -h_2$  y  $j_z > j$  es común para todo valor de  $n$ . Los puntos indicados en ambos paneles indican el valor umbral de  $h_1 = h_2$  cuando  $j_z/j = 0,75$ .

Sin embargo, en el caso NA  $n = 2$ , (7.5)–(7.6) conducen a

$$\alpha_2 = \frac{j^2}{2j_z}, \quad \beta_2 = j_z - \frac{j^2}{2j_z}, \quad j_z > 0, \quad (7.10)$$

que *divergen* cuando  $j_z \rightarrow j_z^c(2) = 0$ . Así pues, si  $j_z$  decrece entonces se requieren campos cada vez más intensos para alcanzar la fase máximamente alineada; y de hecho divergen en el límite  $j_z = 0$  (donde (7.1) se reduce a un Hamiltoniano  $XX$ ). De hecho, para  $j_z \leq 0$  esta fase se vuelve inalcanzable (ver Apéndice D).

Por último, en el caso NNA  $n = 3$ , se obtiene

$$\alpha_3 = \frac{j^3}{4j_z^2 - j^2}, \quad \beta_3 = j_z \frac{4j_z^2 - 3j^2}{4j_z^2 - j^2}, \quad j_z > j/2. \quad (7.11)$$

Estas ecuaciones muestran que  $\alpha_3$  y  $\beta_3$  divergen cuando  $j_z \rightarrow j_z^c(3) = j/2$ ; de modo que ahora el GS alineado es inalcanzable si  $j_z \leq j/2$  (Figs. 7-2, 7-3).



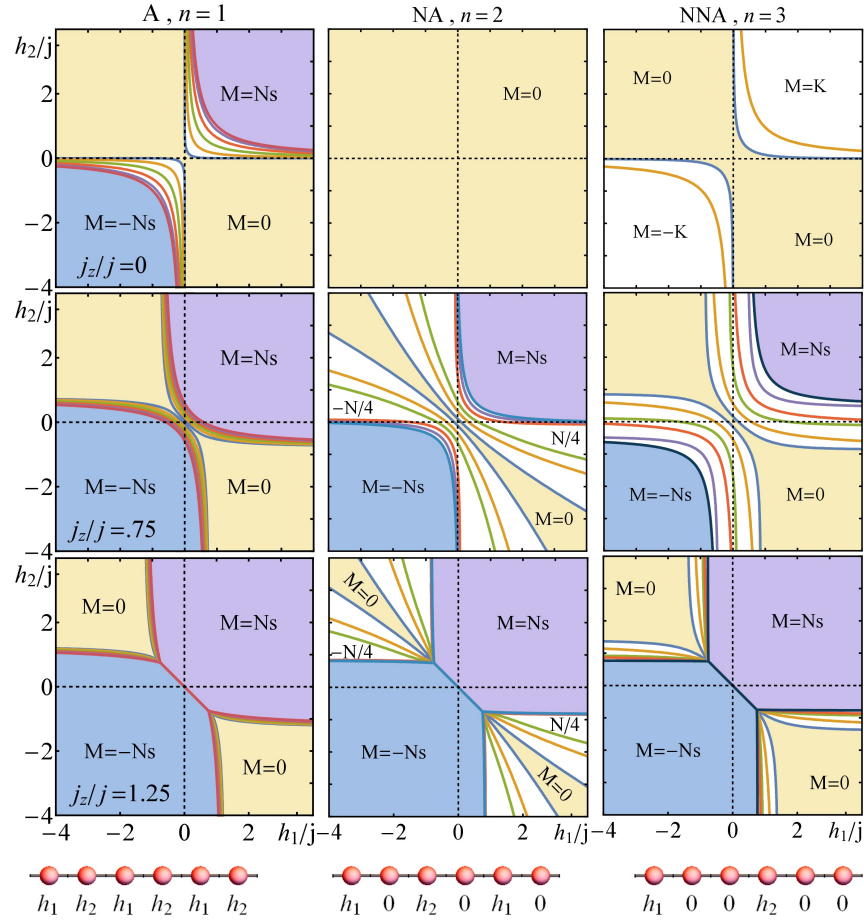


Figura 7-3: Diagramas de magnetización del GS en el plano  $(h_1, h_2)$  para una cadena de  $N = 12$  espines  $1/2$  con interacción tipo  $XXZ$  en configuraciones de campo  $n = 1$  (izquierda),  $n = 2$  (centro) y  $n = 3$  (derecha) (7.2), indicadas en la fila inferior. La anisotropía es:  $j_z/j = 0$  (paneles superiores),  $0,75$  (centrales) y  $1,25$  (inferiores). Las curvas separan las diferentes magnetizaciones. Para  $j_z = 0$ , en el caso A el GS alcanza todas las magnetizaciones  $-N/2 \leq M \leq N/2$ , pero en el NA,  $M = 0 \forall (h_1, h_2)$ ; finalmente, para campos NNA alcanza solamente los plateaus  $M = \pm K = \pm 2$ . Cuando  $j_z/j = 0,75$ , las tres configuraciones alcanzan todas las magnetizaciones, ya que ahora  $j_z > j_z^c(n)$ . Sin embargo, el caso NA sobresale por la presencia de sectores anchos con  $|M| \leq N/4$ . Finalmente, para  $j_z > j$ , las magnetizaciones  $|M| < N/2$  solo pueden ser alcanzadas para campos de signo opuesto más allá del punto de factorización  $h_1 = -h_2 = \pm h_s$ , que es independiente de  $n$ .

### 7.2.2. Sobre los campos críticos

Las Ecs. (7.3)–(7.5) también implican que si  $j_z^c(n) < j_z < j$ , entonces la fase de GS completamente alineado se alcanzará solamente si se aplican campos no nulos al sistema. Si los campos son paralelos ( $h_1 = h_2 = h$ ) entonces estas ecuaciones conducen

a

$$|h| > h_c^{\parallel}(n) = \alpha_n - \beta_n, \quad (7.12)$$

con  $h_c^{\parallel}(n) > 0$  cuando  $j_z^c(n) < j_z < j$ . Y si uno de los campos es nulo (por ejemplo,  $h_2 = 0$ ) entonces un solo campo  $|h_1| > -h_s^2/\beta_n = h_c^{\parallel}(2n)$  será suficiente siempre que  $\beta_n > 0$ ; o equivalentemente,  $j_z > j_z^c(2n)$ . Cabe remarcar que  $h_2 = 0$  en una configuración  $n$ -alternante es equivalente a  $h_2 = h_1$  en el caso  $2n$ -alternante.

Por el otro lado, cuando  $j_z > j$  el GS estará máximamente alineado  $\forall n$  aún cuando los campos son nulos; y los GS con menor magnetización  $|M| < Ns$  surgirán solamente para campos de signo opuesto más allá de los puntos de factorización determinados en el Capítulo 5 y dados por la ecuación (7.7) [3]. En este caso, las Ecs. (7.3)–(7.4) se intersecan en dos puntos críticos reales  $h_1 = -h_2 = \pm h_s \forall n$ , donde *todas* las magnetizaciones convergen y el GS es  $2Ns + 1$ -veces degenerado. Así pues, estos puntos surgen  $\forall n$  (Fig. 7-2, panel derecho; Fig. 7-3, paneles inferiores) y son *independientes* de  $K$  y de  $n$ .

Finalmente, vale la pena resaltar que para  $j_z > j$  y  $n > 1$ ,  $\alpha_n$  decrece rápidamente a medida que  $n$  crece ( $\alpha_n \approx 2h_s(\frac{j}{j_z+h_s})^n$ ) -o cuando la anisotropía  $j_z/j$  es grande ( $\alpha_n \approx j(\frac{j}{2j_z})^{n-1}$ )- y por lo tanto  $\beta_n \approx h_s$ . Por lo tanto, las fases no alineadas ( $|M| < Ns$ ) se alcanzan solamente cuando  $|h_i| \gtrsim h_s$  para  $i = 1, 2$  (y  $h_1 h_2 < 0$ ). Este comportamiento se puede verificar en los paneles inferiores de la Fig. 7-3. Además, es fácil ver de (7.6) y (7.12) que los campos críticos paralelos y antiparalelos (7.7)–(7.12) determinan completamente a  $\alpha_n, \beta_n$ , y por lo tanto también al borde de la fase alineada:

$$\alpha_n = \frac{1}{2}h_c^{\parallel}(n) - \frac{h_s^2}{2h_c^{\parallel}(n)}, \quad \beta_n = -\frac{1}{2}h_c^{\parallel}(n) - \frac{h_s^2}{2h_c^{\parallel}(n)}. \quad (7.13)$$

### 7.2.3. Del borde y el comienzo del entrelazamiento

Para terminar esta sección, es importante resaltar que las curvas límite en (7.3)–(7.4) también indican el *comienzo del entrelazamiento del GS*; y de hecho, indican una *transición de entrelazamiento*. Como se discutió en la Sección 5.2.5 -y como se muestra en el Apéndice C- el GS con  $|M| = Ns - 1$  es una combinación lineal de

estados tipo  $W$  [171] e implica que el entrelazamiento alcanza *rango completo*: el estado reducido de dos espines  $i$  y  $j$  depende solamente de su posición dentro de una celda *pero es independiente de la distancia que los separa*. De hecho, la Concurrencia (1.37) es

$$C_{ij} = 2|w_i w_j|/K, \quad (7.14)$$

donde los coeficientes  $w_i$  cumplen  $\sum_{i=1}^{2n} |w_i|^2 = 1$ . Es importante remarcar que estas Concurrencias *saturan* las relaciones de monogamia [58, 59] (ver Sección 1.4.2).

### 7.3. Plateaus de magnetización

Una segunda pregunta fundamental que surge en este contexto es:

*¿Emergen plateaus de magnetización con  $|M| < Ns$  que tengan un ancho significativa aun para sistemas grandes?*

Sorprendentemente, el GS *sí* tendrá tales plateaus (Fig. 7-4), y la magnetización escalizada  $m = M/(Ns)$  cumplirá con la regla de cuantización

$$2ns(1 - m) = q, \quad (7.15)$$

con  $q$  entero. Este resultado se puede entender al considerar la situación en la que uno de los campos ( $h_1$ ) es suficientemente intenso y la cadena puede ser aproximadamente considerada como  $K$  *subsistemas polimerizados* formados por  $2n - 1$  espines  $s$  con un campo  $h_2$  en el sitio central (Fig. 7-1); y donde estos subsistemas están separados por espines máximamente alineados. Así, al variar el campo  $h_2$ , la magnetización  $M_{2n-1}$  del GS de cada polímero será  $(2n - 1)s - q$  con  $q$  entero (tal que empieza en  $q = 0$  cuando  $j_z > j_z^c(n)$ ). Por lo tanto, la magnetización del GS total será  $K \{s + [(2n - 1)s - q]\}$ , y de allí se deriva (7.15). Este resultado muestra entonces que *los plateaus en  $m$  reflejan esencialmente las magnetizaciones del polímero*; y las magnetizaciones intermedias que surgen en las regiones de transición entre plateaus implican que las celda no tiene magnetización bien definida.

Es importante resaltar que la Ec. (7.15) coincide con el conocido *criterio de OYA*; descubierto por M. Oshikawa, M. Yamanaka y I. Affleck en 1997 [163]. Este criterio

ha sido aplicado con éxito para predecir la existencia de plateaus en cadenas antiferromagnéticas inmersas en campos uniformes.

### 7.3.1. Diagramas de magnetización en sistemas finitos...

En la Fig. 7-3 se graficaron resultados representativos de la magnetización del GS en cadenas pequeñas de espines  $1/2$ .

En el caso estándar alternante  $n = 1$  (paneles izquierdos), el GS alcanza *todas* las magnetizaciones para cualquier valor de la anisotropía  $j_z/j$ . Además, se ve que los sectores completamente alineados  $|M| = N/2$  están separados del plateau  $M = 0$  por una banda muy angosta que contiene todas las magnetizaciones intermedias.

En contraste, para el caso de una configuración de campos NA  $n = 2$  (centro), se puede verificar en primera instancia que para  $j_z = j_z^c(2) = 0$ , el GS no puede alcanzar magnetización máxima. De hecho, *tiene estrictamente*  $M = 0$  para cualquier valor de los campos. Este resultado puede ser rigurosamente demostrado a través de la fermionización de Jordan Wigner [152] (ver Apéndice D). En cuanto al caso  $j_z > 0$ , esta configuración presenta un comportamiento notable, ya que los sectores  $0 \leq |M| \leq N/4$  son más anchos que en los otros casos considerados. De hecho, el plateau  $|M| = N/4$  persiste para cadenas grandes ( $N$  grande), como se discute en la siguiente sección.

Finalmente, en el caso NNA  $n = 3$  (derecha), se verifica que si  $j_z \leq j_z^c(3) = j/2$ , entonces el GS no alcanza la fase completamente alineada (panel superior). Cuando  $j_z = 0$ , la magnetización máxima que se alcanza es  $|M| = 2sK = N/6$  (este resultado persiste en la región  $0 < j_z < j/2$  si  $s = 1/2$ ): para campos paralelos grandes, los espines en los sitios con campo se alinean con el mismo mientras que los espines en sitios sin campos forman *dímeros entrelazados* con magnetización nula; y esto implica que la magnetización total es  $|M| = 2sK$ . Finalmente, cuando  $j_z > j/2$  el diagrama de magnetización es similar al del caso  $n = 1$ , aunque ahora la región de transición entre los sectores  $M = 0$  y  $|M| = N/2$  es más ancha.

### $j_z^c(n)$ como punto crítico

Los resultados previos muestran que el umbral  $j_z^c(n)$  que determina la fase completamente alineada es en realidad un *punto crítico cuántico* ya que por debajo de este valor existe todo un intervalo de magnetizaciones que se vuelven inalcanzables. Este resultado puede ser entendido al considerar una vez más el límite de campos grandes  $h_1, h_2 \rightarrow \infty$ , donde ahora los espines con campo están completamente alineados mientras que el resto forma cadenas aisladas de  $n - 1$  espines con campos efectivos de magnitud  $sJ_z$  en los bordes.

De esta forma, para  $n = 2$ , cuando los campos son grandes y  $j_z \rightarrow 0^+$ , todas las magnetizaciones  $M \geq 0$  (y no solo  $N/2$  y  $N/2 - 1$ ) de la cadena se degeneran: ahora los estados  $M_1 = \pm 1/2$  de los  $2K$  espines sin campos están completamente degenerados (dejando al sistema en un estado con  $M = 0$  cuando  $j_z \leq 0$ ). Similarmente, para  $n = 3$  y  $j_z \rightarrow j/2$ , todas las magnetizaciones  $M \geq 2sK = N/6$  de la cadena se vuelven degeneradas a campos grandes, ya que ahora cada par de espines sin campo puede tener una magnetización  $M_2 = 1$  o  $0$ , que se degeneran precisamente si  $j_z = j/2$ .

### 7.3.2. ... y en cadenas grandes

En la Fig. 7-4 se muestran resultados obtenidos mediante *density matrix renormalization* (DMRG)<sup>1</sup> [172–174] para la magnetización escalizada del GS de una cadena de  $N = 120$  espines  $1/2$ . En el caso  $n = 1$  la región de transición  $M = 0 \rightarrow N/2$  es estrecha (panel superior izquierdo), en acuerdo con la Ec. (7.15), ya que en este caso el “polímero” para  $h_1$  grande está formado por un espín  $s$  cuyos autoestados de menor energía pueden tener solamente dos magnetizaciones:  $M_1 = s$  y  $-s$  (ver el recuadro); es decir,  $q = 0$  y  $q = 2s$ , que conducen a los plateaus  $|m| = 1, 0$ .

Para  $n = 2$  y  $j_z > 0$ , el GS tendrá plateaus en  $|m| = 1, 1/2$  (panel superior derecho), que reflejan las magnetizaciones  $M_3 = 3/2, 1/2$  ( $q = 0, 1$ ) del trímero formado por los tres espines confinados entre los dos espines alineados con el campo. En particular, el trímero no puede tener magnetización  $M_3 = -1/2$  (excepto para campos

<sup>1</sup>Los resultados de DMRG fueron realizados por el Dr. C. Lamas.

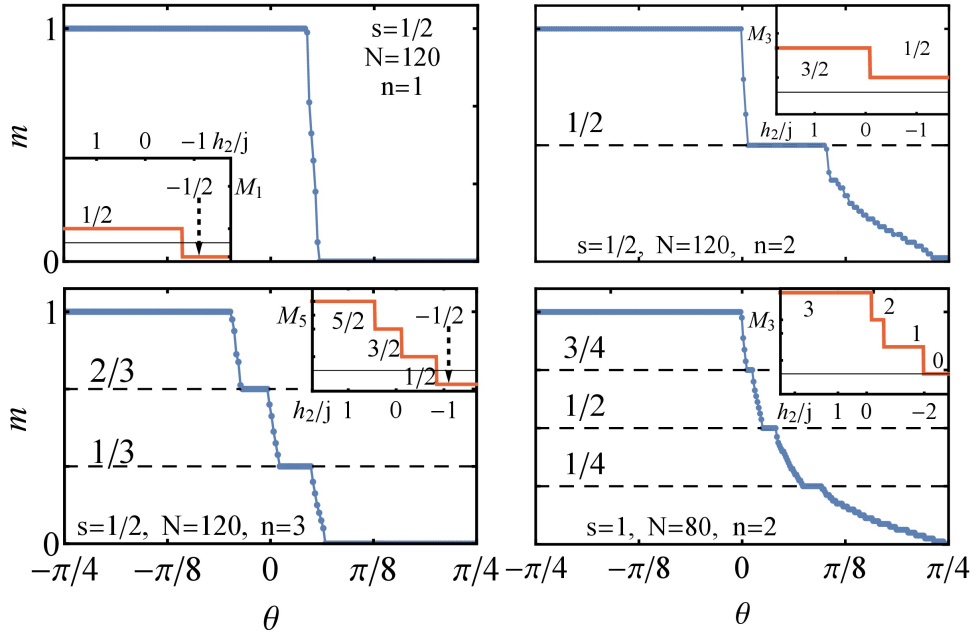


Figura 7-4: Magnetización escalizada del GS  $m = M/(Ns)$  para  $j_z/j = 0,75$  y para campos  $(h_1, h_2) = 4j(\cos \theta, -\sin \theta)$ . Se muestran resultados para  $s = 1/2$ ,  $N = 120$  y  $n = 1, 2, 3$ ; y para  $s = 1$ ,  $N = 80$  y  $n = 2$ . Los recuadros muestran la magnetización  $M_{2n-1}$  de los polímeros.

grandes  $h_2 \approx -h_1$ ); y esto implica que no existe un plateau amplio con  $m = 0$ .

Finalmente, para  $n = 3$ , la magnetización  $M_5$  del pentámero sí puede ser igual a  $-1/2$ , y por lo tanto este caso presenta un amplio plateau  $m = 0$ . Además, este sistema presenta también una fase alineada  $|m| = 1$  ( $M_5 = 5/2$ ,  $q = 0$ ) y plateaus intermedios en  $|m| = 2/3, 1/3$  ( $M_5 = 3/2, 1/2$ ,  $q = 1, 2$ , panel inferior izquierdo).

Para terminar esta sección, resaltamos que estos plateaus también aparecen para espines mayores, como se puede ver para  $s = 1$  y  $n = 2$  en el panel inferior derecho de la Fig. 7-4. En este caso  $|m| = 1, 3/4, 1/2, 1/4$ , en acuerdo con las magnetizaciones del trímero  $M_3 = 3, 2, 1, 0$ .

### 7.3.3. De las magnetización de espines individuales

En la Fig. 7-5 se muestran las magnetizaciones  $\langle S_i^z \rangle$  de espín individual de los primeros cuatro espines de las cadenas de la Fig. 7-3. De hecho, como se discutió en el Capítulo 4 para  $s = 1/2$ , la magnitud  $1/2 - |\langle S_i^z \rangle|$  es también una medida del

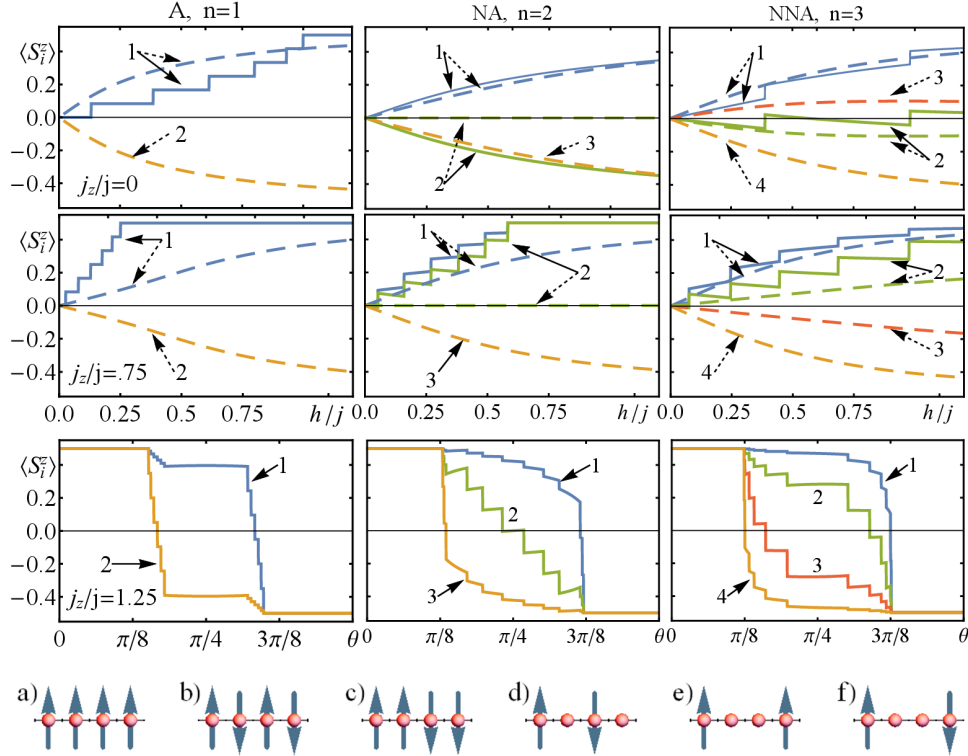


Figura 7-5: Arriba: magnetización individual  $\langle S_i^z \rangle$  de los primeros cuatro espines de las mismas cadenas de la Fig. 7-3. En la primera y segunda fila las líneas sólidas muestran la magnetización para campos paralelos  $h_1 = h_2 = h$ , mientras que las líneas punteadas para campos antiparalelos  $h_1 = -h_2 = h$ . En la tercer fila los campo son  $(h_1, h_2) = 2j(\cos \theta, -\sin \theta)$ , con  $\theta \in (0, \pi/2)$ . Los escalones en  $\langle S_i^z \rangle$  reflejan aquellos de la magnetización total  $M$ . Abajo: representación esquemática de las configuraciones de espín.

*entrelazamiento* del espín  $i$  con el resto de la cadena (es decir, de que tan mezclado está el estado reducido del espín); ya que  $|\langle S_i^z \rangle| = 0$  ( $1/2$ ) implica entrelazamiento  $i$ -resto máximo (nulo). Esto se debe al hecho que en un estado puro con magnetización total  $M$  bien definida a lo largo del eje  $z$ , el estado reducido  $\rho_i$  de un solo espín conmuta con  $S_i^z \forall s$ . Para  $s = 1/2$ , sus autovalores serán entonces  $1/2 \pm \langle S_i^z \rangle$ , y su pureza (1.17)  $\text{Tr} \rho_i^2 = \frac{1}{2} + 2\langle S_i^z \rangle^2$ .

En primer lugar, los espines en sitios con campo se alinean con el mismo a medida que el campo aplicado  $h_i$  aumenta; para  $n = 1$ , esto conduce a una configuración de espines de tipo a) (b) cuando los campos son paralelos (antiparalelos). Sin embargo, los espines en sitios sin campo ( $n \geq 2$ ) presentan un comportamiento más complejo.

Para  $n = 2$  y  $j_z = 0$ , la magnetización total del GS  $M$  es nula  $\forall h_1, h_2$ , y esto implica que los espines en sitios sin campo se *antialinean* para  $h_1 = h_2$ . Es decir, que para campos paralelos el sistema presenta una configuración de Néel tipo b. Por el otro lado, para campos antiparalelos  $h_1 = -h_2$ , estos espines tienen *magnetización nula* ( $\langle S_i^z \rangle = 0$ ), y por ende conducen a una configuración de tipo d. Es más, aun cuando  $j_z > 0$  y  $h_1 = -h_2$  (y para  $|h_i| > h_s$  si  $j_z > j$ ) los espines siguen ordenándose según esta configuración, dado que  $M$  debe anularse. Es decir, que estos espines están *frustrados*, dado que la interacción atractiva  $S_i^z S_{i+1}^z$  no puede ser satisfecha con ambos espines vecinos. Como ya se discutió en el Capítulo 5, este es un claro ejemplo de la frustración inducida por campos; y de hecho en este caso implica que *el entrelazamiento  $i$ -resto es máximo* y satura -en gran parte- con los espines vecinos que tampoco tienen campo. Por el otro lado, cuando los campos son paralelos y grande  $h_1 = h_2$ , y dado que  $j_z > 0$ , entonces todos los espines se alinean en la fase ferromagnética y la configuración es del tipo a.

Por el contrario, para  $n = 3$  los dos espines en sitios contiguos sin campo tienden a formar *dímeros entrelazados* con una configuración de tipo e si los campos son paralelos ( $h_1 = h_2$ ) y si  $j_z = 0$  ( $\langle S_i^z \rangle \approx 0$  para  $i = 2, 3$ ); y una configuración de tipo f si  $h_1 = -h_2$  (con una leve polarización hacia b). De hecho, cuando  $0 < j_z < j_z^c(3) = j/2$ , hay una transición de configuraciones donde  $\langle S_i^z \rangle$  cambia de signo en los espines centrales y la polarización cambia de tipo b a tipo c, cruzando exactamente una configuración de tipo f. Cuando  $j_z > j/2$ , estos espines centrales están fuertemente entrelazados para campos antiparalelos, con una polarización que tiende hacia el tipo c; mientras que para campos paralelos se alinean con el campo a medida que  $|h_i|$  -y por ende  $|M|$ - aumentan.

Los argumentos previos también pueden ser verificados en los paneles inferiores (donde  $j_z > j$ ), ya que allí se puede ver la “evolución” de  $\langle S_i^z \rangle$  con  $\theta = \tan^{-1}(-h_2/h_1)$  entre las fases completamente alineadas.



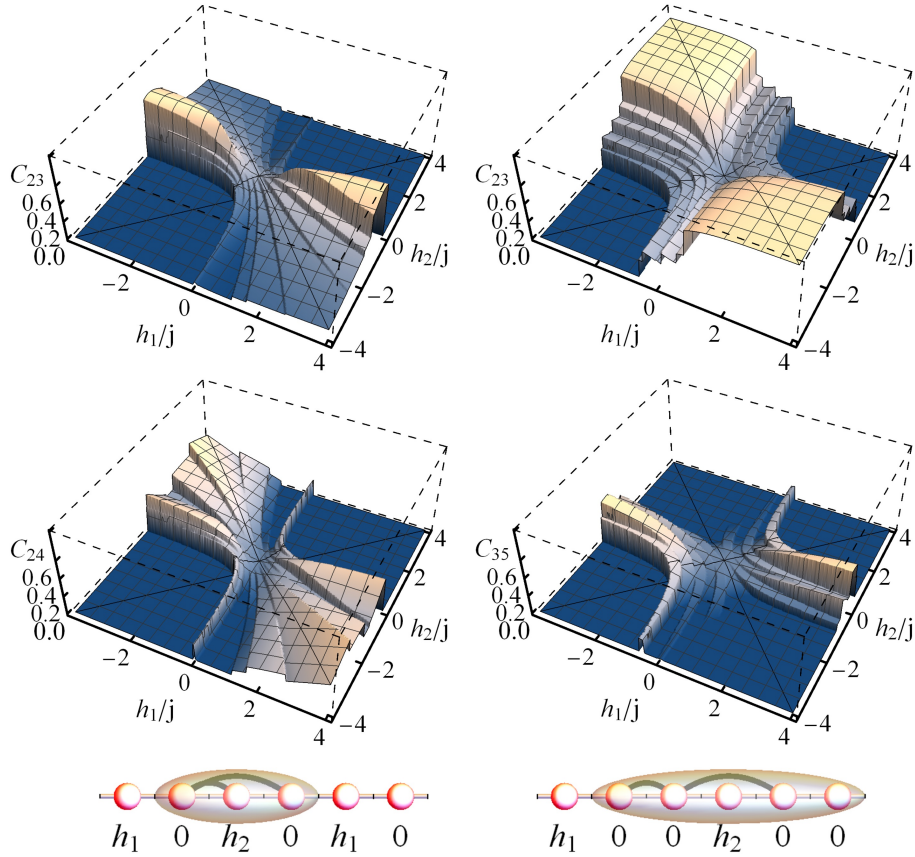


Figura 7-6: Concurrencia de pares  $C_{ij}$  entre los espines  $i$  y  $j$  (unidos con una línea en la fila inferior) de una cadena de  $N = 12$  espines  $1/2$  en el plano  $(h_1, h_2)$  del espacio de campos ( $j_z/j = 0,75$ ). En la columna izquierda la cadena está inmersa en una configuración de campos NA, mientras que en la derecha es NNA. Los escalones reflejan los diferentes valores de la magnetización total. El entrelazamiento comienza en el borde que determina la fase alineada. Abajo: representación esquemática de la trimerización aproximada que ocurre en los plateaus  $\pm N/4$  para  $n = 2$ , y la pentamerización en los plateaus  $\pm N/3$  y  $\pm N/6$  plateaus para  $n = 3$ .

## 7.4. Entrelazamiento de pares

En la Fig. 7-6 se graficaron resultados ilustrativos para la Concurrencia de pares en los espines de la cadena de la Fig. 7-3 para una anisotropía  $j_z/j = 0,75$ . En primera instancia, se verifica para el caso  $n = 3$  NNA que los dos espines contiguos en sitio sin campo ( $C_{23}$ , panel superior derecho) están fuertemente entrelazados en el plateau  $M = 0$  debido al hecho que los espines forman esencialmente una configuración dimerizada de tipo f (ver el panel inferior de la Fig. 7-5). A su vez, se verifica que la

Concurrencia de los espines sin campo en sitios no contiguos se anula en este plateau (panel inferior derecho). Por el otro lado, esta última es apreciable en los plateaus  $|M| = 4$  y  $|M| = 2$  ( $|m| = 2/3, 1/3$ ), ya que allí el campo intermedio  $h_2$  es débil y se verifica el argumento de la pentamerización.

Por el otro lado, en el caso  $n = 2$  NA, la Concurrencia  $C_{23}$  (entre un espín sin campo y un espín con campo  $h_2$ , panel superior izquierdo) es claramente significativa en los plateaus  $|M| = N/4$ . En particular, este entrelazamiento emerge para valores pequeños de  $|h_2|$ ; en acuerdo con el argumento de trimerización. A su vez, se puede verificar que los trímeros no están entrelazados, ya que  $C_{24}$  (panel inferior izquierdo) es apreciable (nulo) cuando  $C_{23}$  es grande (pequeño) en estos plateaus.  $C_{24}$  toma valores significativos también en el plateau  $M = 0$ , donde los espines sin campo más cercanos se entrelazan debido a la frustración inducida por campos.

Finalmente, se verifica que todas las Concurrencias son finitas en la región de  $|M| = Ns - 1$ . Este resultado está en acuerdo con la Ec. (7.14).

## Comentarios finales

Los resultados presentados en este capítulo muestran que las configuraciones de campos que presentan puntos multicríticos de factorización para  $J_z > J$  también exhiben fenómenos críticos interesantes en otras regiones; es decir, para  $J_z < J$ , campos paralelos, etc. En particular, existe un valor crítico de la anisotropía por debajo de la cual la fase alineada y todo un intervalo de magnetizaciones dejan de ser accesibles. Más aún, el borde de la fase alineada queda completamente determinado por el campo factorizante y un campo crítico paralelo. Estos resultados abren las puertas para el estudio de la emergencia de nuevos fenómenos inducidos por campos magnéticos no uniformes.

# Conclusiones y perspectivas

—*¡Entonces las profecías de las viejas canciones se han cumplido de alguna manera!*  
—*dijo Bilbo.*

—*¡Claro!* —*dijo Gandalf—. ¿Y por qué no tendrían que cumplirse? ¿No dejarás de creer en las profecías sólo porque ayudaste a que se cumplieran? No supondrás, ¿verdad?, que todas tus aventuras y escapadas fueron producto de la mera suerte, para tu beneficio exclusivo. Te considero una gran persona, señor Bolsón, y te aprecio mucho; pero en última instancia jeres sólo un simple individuo en un mundo enorme!* —*¡Gracias al cielo!* —*dijo Bilbo riendo, y le pasó el pote de tabaco—*

- Extracto de “*El Hobbit*” por J. R. R. Tolkien.

A lo largo de esta tesis se analizaron diferentes aspectos de la factorización y del entrelazamiento en sistemas de espines interactuantes. Se mostró que mediante este novedoso estudio de la factorización se pueden obtener fenómenos y propiedades críticas que no eran conocidas. Esto motivó una discusión sobre la posibilidad de realizar ingeniería de estados separables y sobre cómo inducir fenómenos críticos a través de la aplicación de campos magnéticos no uniformes. Discutiremos ahora algunas de las principales conclusiones.

**Ecuaciones generales de factorización.** En una primera instancia se determinaron en el Capítulo 2 las condiciones generales para la existencia de autoestados separables -de máximo espín en cada sitio- en sistemas de espines con acoplamiento cuadrático general en campos magnéticos, no necesariamente uniformes o transversos. Se mostró que los campos factorizantes pueden ser caracterizados en función de sus componentes perpendicular y paralela a la dirección de alineación local.

Además, se presentaron cinco lemas fundamentales sobre las ecuaciones de factorización: el Lema 1 muestra que los autoestados separables -si existen- siempre pueden ser llevados al estado fundamental del sistema mediante la aplicación de campos finitos. Los Lemas 2 y 3 aseguran la existencia de acoplamientos dadas las direcciones de alineación y de direcciones de alineación dado el acoplamiento, que cumplan con las ecuaciones de factorización. El Lema 4 muestra que es posible obtener campos factorizantes uniformes. Por último, el Lema 5 demuestra que el entrelazamiento de pares alcanza rango completo en la vecindad de la factorización. Los puntos o líneas de factorización pueden pues considerarse puntos críticos cuánticos en sistemas finitos.

**Factorización en sistemas con interacción  $XYZ$  en campos no transversos.** En el Capítulo 3 se identificó la posibilidad de que exista un GS separable uniforme no degenerado en una amplia gama de sistemas; incluidas las cadenas y redes con interacción de tipo ferromagnética (FM) y antiferromagnética (AFM). Al mismo tiempo, descubrimos que en cadenas con interacción AFM de primeros vecinos, la solución uniforme coexiste con una solución de tipo Néel.

Para la solución uniforme, se derivó que el entrelazamiento se anula linealmente en la factorización cuando el GS es no degenerado (Capítulo 4). En cuanto a la solución de tipo Néel, se demostró que para campos transversos el estado es degenerado; y se determinaron analíticamente los límites laterales finitos de la Concurrencia de pares. A su vez, se estudió la magnetización y las entropías de bloque; y se probó que estas últimas se anulan cuadráticamente en los campos factorizantes no transversos que determinan soluciones uniformes, mientras que alcanzan límites laterales finitos (que derivamos analíticamente) en los campos asociados a soluciones de tipo Néel.

**Factorización en sistemas con interacción  $XXZ$  en campos transversos no uniformes.** En el Capítulo 5 se mostró que en sistemas generales de espines con interacción  $XXZ$ , existen conjuntos de GS separables que rompen con la simetría del problema, son excepcionalmente degenerados y que surgen de puntos críticos de factorización en los cuales todas las magnetizaciones convergen. Tales puntos multicríticos existen para sistemas de cualquier tamaño, valor del espín y dimensión; así como para una amplia gama de configuraciones de campo no uniformes. En parti-

cular, estos puntos pueden surgir para arquitecturas de campos muy simples, como pueden ser sólo campos en los bordes de una cadena o en los bordes de una red.

En consecuencia, se determinó que estas distintas configuraciones de campos permiten generar diferentes diagramas de magnetización que pueden ser entendidos mediante la aparición de nuevos fenómenos, como por ejemplo la frustración inducida por campos. Finalmente, se derivaron fórmulas analíticas para los GS factorizados proyectados a buena magnetización.

**Ingeniería de estados separables.** Los resultados obtenidos previamente permitieron presentar un nuevo abordaje al problema de factorización, en el que se parte del estado separable y se determinan luego los acoplamientos y los campos factorizantes (Capítulo 6). Así, se proponen esquemas de ingeniería de estados separables que son realizables si se posee cierto control sobre los acoplamientos y sobre los campos locales. En este contexto, se demuestra además que es posible determinar soluciones no triviales en sistemas de espines que no tienen solución analítica (como puede ser la espiral de espín en una cadena con interacción  $XXZ$ ).

**Inducir fenómenos con campos magnéticos.** Finalmente, en el Capítulo 7 se demostró que las configuraciones de campos  $n$ -alternantes conducen a nuevos diagramas de fase que difieren significativamente de aquellos que se obtienen al aplicar campos alternantes estándar. En particular, estos pueden exhibir plateaus de magnetización no triviales que sobreviven para sistemas grandes. Concretamente, argumentamos que estos están asociados con los fenómenos de frustración y polimerización inducida por campos; y se derivó una condición que cuantiza estos plateaus y que sorpresivamente coincide con el criterio de Oshikawa, Yamanaka and Affleck. Estos resultados fueron verificados mediante cálculos de DMRG.

Por otro lado, se obtuvieron resultados analíticos para los bordes de la fase completamente alineada, mostrando que estos son independientes del tamaño del sistema y que implican la existencia de un valor umbral de la anisotropía bajo el cual todo un intervalo de magnetizaciones se vuelve inalcanzable. A su vez, se estudiaron en detalle los diagramas de magnetización total e individual, y se derivaron resultados analíticos en el plateau donde comienza el entrelazamiento.

## Perspectivas

Al finalizar la presente tesis me queda claro que aún quedan muchas preguntas abiertas. En primera instancia, cabe remarcar que de todos los sistemas de espines de interés, se estudió solamente un pequeño conjunto de modelos. Por otro lado, dado que los resultados presentados en esta tesis son teóricos, es fundamental realizar experimentos que permitan contrastar el experimento con nuestras predicciones. Es por esto que a lo largo de la tesis se han propuesto diversas formas en las que se podría determinar experimentalmente la factorización (como por ejemplo, midiendo la magnetización cuando el GS factorizado es uniforme y no degenerado, o rompiendo la degeneración aplicando campos adecuados).

Luego, es importante resaltar que si bien las ecuaciones de factorización derivadas son completamente generales para sistemas con interacción cuadrática y para soluciones separables en las que cada espín está máximamente alineado (y por lo tanto aptas para ingeniería de estados separables), estas no cubren sistemas con interacciones o soluciones más generales. Por ejemplo, se podría derivar un formalismo para la factorización de estados tipo cluster o en sistemas con interacciones de más cuerpos. Otra idea sería el estudiar la factorización en sistemas fermiónicos. Si bien el estudio y la cuantificación del entrelazamiento en estos sistemas está aun en su infancia, se sabe por el modelo de Lipkin que es posible generar factorización fermiónica tal que el estado separable se corresponda con un determinante de Slater.

Respecto a la ingeniería de estados separables, si bien las bases teóricas han sido establecidas, aún resta determinar si los estados iniciales factorizados no triviales aportan alguna ventaja sobre otros métodos de inicialización. Para esto, es necesario realizar las simulaciones numéricas para contrastar la eficiencia de cada protocolo.

Finalmente, los resultados obtenidos que muestran que es posible inducir fenómenos críticos mediante la aplicación de campos no uniformes abren la puerta a todo un campo completamente desconocido. ¿Qué otros resultados se pueden obtener controlando algunos campos o interacciones? ¿En qué es igual y en qué difiere la frustración inducida por campos de los otros tipos de frustración?

# Apéndice A

## Realización experimental

Gracias a los notables avances en tecnologías de control cuántico, hoy en día es posible simular sistemas de espines interactuantes con control de interacciones y campos. A continuación se describen varios sistemas experimentales que permiten en principio controlar y ajustar las interacciones entre espines y los campos locales aplicados en cada sitio.

### Dispositivos superconductores

Uno de los escenarios más atractivos para realizar tareas de simulación cuántica son los qubits superconductores basados en circuitos electrónicos y junturas de Josephson en sistemas de estado sólido. Estos dispositivos han recibido un gran interés gracias a su robustez, sus largos tiempos de decoherencia y su poca disipación [128].

En particular, se ha demostrado que los circuitos con qubits de flujo superconductores pueden ser usados -dentro de ciertos regímenes- para simular sistemas de espines con interacción  $XX$  de primeros vecinos inmersos en campos no transversos (que pertenecen al plano principal  $xz$ ) [175]. En estos sistemas, las constantes de acoplamiento pueden ser ajustadas si se utilizan dispositivos superconductores de interferencia cuántica (SQUIDS, siglas inglesas para superconducting quantum interference device) para acoplar los qubits de flujo [176]. Por otro lado, la dirección y magnitud de los campos magnéticos locales puede ser controlado al modificar la fase

y la amplitud, respectivamente, del campo magnético de “driving”.

A su vez, recientemente se han reportado trabajos en los que se han simulado cadenas de espines con interacción ajustable de primeros vecinos de tipo  $XY$  -no necesariamente uniforme- en presencia de campos magnéticos no transversos y no necesariamente homogéneos. Estos últimos pueden ser realizados, por ejemplo, en sistemas de “planar transmon qubits” (un tipo de qubits superconductores) [129].

## Átomos fríos en potenciales ópticos

El Hamiltoniano efectivo de un par de átomos fuertemente interactuantes que han sido confinados en una trampa unidimensional puede ser mapeado a un modelo de espines  $1/2$  con interacción  $XXZ$ . Así pues, las componentes  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  de cada espín serán las componentes del gas de Bose atómico, mientras que los campos efectivos  $h^i$  dependerán del campo magnético inhomogéneo  $B$  que se aplica al sistema. Luego, la magnitud de la interacción de intercambio de primeros vecinos dependerá de la interacción de contacto entre los átomos (ver, por ejemplo, las Refs. [119, 120]). Finalmente, la anisotropía  $\Delta = J_z/J$  puede ser controlada mediante los parámetros del potencial que atrapa a los átomos.

A su vez, en la reciente propuesta de la Ref. [115] se propone simular sistemas de espines en un dispositivo basado en átomos de Rydberg en estados circulares - es decir, en estados de máximo momento angular- atrapados en trampas de láseres. Una de las principales ventajas de estos últimos es que presentan largos tiempos de decoherencia [115]. En particular, los estados “up” y “down” del espín se corresponden con estados circulares con distinto número cuántico principal. Luego, la interacción  $XXZ$  emerge del acoplamiento dipolo-dipolo, donde el valor de  $J$  depende de la distancia interatómica, y  $J_z$  es ajustable mediante la aplicación de un campo eléctrico estático. Al mismo tiempo, si se aplican otros campos clásicos con una polarización y frecuencia adecuada, se pueden ajustar los campos locales efectivos a lo largo de los ejes  $z$  y  $x$ . Estos campos serán usualmente uniformes (excepto por correcciones de borde), de modo que será necesario aplicar campos no uniformes para obtener



campos efectivos locales no uniformes. Así pues, algunos de los protocolos de baja complejidad discutidos en el Capítulo 6 son realizables en este sistema.

## **Iones atrapados y puntos cuánticos**

Bajo ciertas condiciones, se pueden simular sistemas de espines efectivos con interacción  $XYZ$  en campos no transversos usando iones atrapados en redes ópticas. Una de las ventajas de los métodos que utilizan iones atrapados es que éstos dispositivos son altamente controlables, muy versátiles, presentan largos tiempos de coherencia y es posible realizar mediciones de alta precisión. Concretamente, en estos sistemas, las constantes de acoplamiento y los campos locales se pueden ajustar al controlar los láseres que actúan en las transiciones internas de los iones [130–134].

En “*Controllable Anisotropic Exchange Coupling between Spin Qubits in Quantum Dots*” [136], los autores proponen un esquema de computación cuántica basado en dos o más espines electrónicos en una geometría lineal- los cuales proveen el “bus”- más espines adicionales que generan los qubits y conducen a un acoplamiento efectivo de tipo  $XXZ$  entre ellos. Esta interacción emerge al realizar una teoría de perturbaciones de segundo orden del acoplamiento anisotrópico tipo Heisenberg entre los espines electrónicos del bus y los qubits. Así, el Hamiltoniano resultante contiene un término de campos locales efectivos que actúan sobre los qubits (que dependen del campo magnético ajustable que se aplica a los espines/qubits); más una corrección perturbativa que conduce a un campo externo longitudinal (determinado por el acoplamiento bus-qubits). En principio, este acoplamiento efectivo afecta a cualquier par de espines. Sin embargo, también es posible alcanzar un régimen crítico en el que el campo magnético en el bus se ajusta para que el sistema esté cerca de un cruce de niveles en el GS. En este caso, surge un acoplamiento de primero orden de tipo  $XXZ$  entre cada qubit y el bus cuya magnitud es similar a la magnitud de la interacción de intercambio original. Luego, se puede demostrar que el bus puede ser considerado como un qubit efectivo basado en sus dos estados cercanos de energía más baja. Finalmente, el Hamiltoniano resultante se corresponde -a primer orden- a

una arquitectura tipo estrella de espines (un qubit/bus acoplado a  $N$  espines/qubits no interactuantes [137–139]), en la que el campo aplicado a los qubits puede ser ajustado localmente. Como se discutió en el Capítulo 6, una configuración de este tipo permite realizar ingeniería de estados separables en un sistema interactuante con una baja complejidad.

# Apéndice B

## Negatividad de pares en sistemas con interacción $XXZ$

En el presente Apéndice se examina la Negatividad de pares  $N_{ij}$  (1.39) en el GS exacto de: una cadena cíclica de espines en una configuración de campos “next-alternating” (fila superior de la Fig. B-1); una cadena cíclica con campos nulos en todos los sitios excepto en dos (fila central); y en un arreglo bidimensional abierto con campos en los bordes (fila inferior). Como se discutió en el Capítulo 5, las magnetizaciones del GS conducen a  $2Ns + 1$  escalones en  $N_{ij}$ ; y todos ellos colapsan exactamente en el punto de factorización. A su vez, también se muestran resultados de la Negatividad de los GS proyectados a buena magnetización en el punto de factorización.

### Entrelazamiento de pares

#### Cadena de espines con campos next-alternating

En el panel superior izquierdo de la Fig. B-1 se muestra la Negatividad del par  $2 - 3$  (un espín sin campo aplicado y un espín con campo  $h_2$ ). Como se puede ver, el entrelazamiento de primeros vecinos muestra un comportamiento asimétrico y es máximo para valores grandes positivos  $M < Ns$ . Es decir, cuando el campo  $h_1$  es

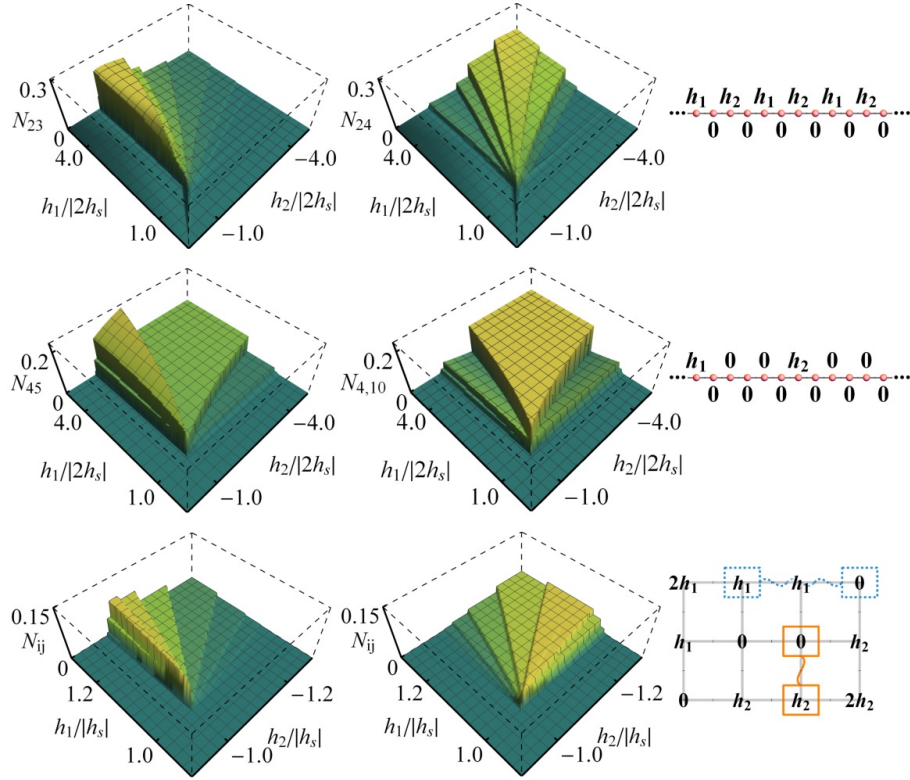


Figura B-1: Negatividad de pares  $N_{ij}$  en el GS exacto de una cadena cíclica de  $N = 12$  espines  $1/2$  con campos next-alternating (fila superior) y con campos nulos en el bulk (fila central); y en un sistema abierto de  $3 \times 4$  espines  $1/2$  con campos nulos en el bulk (fila inferior). La tercer columna muestra las configuraciones de campos. En la fila inferior se muestra la Negatividad de los pares unidos por líneas sólidas (punteadas) en el panel izquierdo (central). En todos los casos se la anisotropía es  $\Delta = 1,2$ .

fuerte y el campo  $h_2$  es débil. A su vez, este entrelazamiento decrece a medida que  $M$  disminuye por debajo de  $Ns/2$  —o, equivalentemente, a medida que  $h_2$  aumenta— ya que en este caso estos espines se alinean con el campo aplicado  $h_2$ .

En cuanto al entrelazamiento de segundos vecinos para espines en sitios pares -sin campo- (panel central superior), este es apreciable en el plateau  $M = 0$ ; e incluso se puede ver que la Negatividad aumenta cuando la magnitud de los campos de signo opuesto aumenta. Debido a la *frustración inducida por los campos*, cuando  $M = 0$  estos espines están entrelazados y su matriz densidad reducida cumple  $\langle S_z^2 \rangle = \langle S_z^4 \rangle = 0$ . Por el otro lado, a medida que  $|M|$  aumenta,  $N_{24}$  disminuye ya que estos espines se alinean con el campo más intenso.

## Cadena de espines con campo nulo en el bulk

Esta configuración de campos factorizantes se corresponde con la configuración de *menor complejidad* para una cadena de espines ya que requiere solamente la aplicación de dos campos de signo opuesto.

Como se puede ver en los paneles centrales de la Fig. B-1, la Negatividad  $N_{45}$  de dos espines contiguos en sitios sin campo (izquierda) es máxima en el plateau  $M = 1$  pero sigue siendo apreciable cuando  $M = 0$ . A su vez, esta última decrece si  $M$  disminuye ya que el espín en el sitio  $j = 5$  se alinea con el campo cercano  $h_2$  para contribuir a la magnetización negativa.

Por otro lado, los espines en los sitios  $i = 4$  y  $j = 10$  (panel central) -es decir, espines sin campo equidistantes a sitios con campo aplicado- presentan un entrelazamiento significativo en el plateau  $M = 0$  a pesar de la distancia que los separa. Esto último se debe una vez más a la frustración inducida por campos, y por lo tanto el comportamiento es similar al discutido previamente: el entrelazamiento aumenta a medida que los campos opuestos aumentan en magnitud.

## Sistema abierto de $3 \times 4$ espines con campos nulos en el bulk

La fila inferior de la Fig. B-1 muestra la Negatividad entre los espines indicados en el esquema del panel derecho. En particular, la Negatividad para primeros vecinos (panel izquierdo) -un espín en el borde con campo  $h_2$  y un espín en el bulk sin campo- presenta un comportamiento asimétrico similar al mostrado en el panel superior izquierdo. Es decir, la Negatividad disminuye a medida que  $M$  decrece.

Similarmente, la Negatividad de segundos vecinos para dos espines del borde con campo nulo y con  $h_1$  (panel central) presenta también un comportamiento asimétrico; pero en este caso la Negatividad es menor y decrece a medida que  $M$  aumenta. Es decir, disminuye a medida que los espines se alinean con el campo  $h_1$ . Cabe finalmente mencionar que el entrelazamiento de los dos espines del bulk tiene un comportamiento similar al mostrado en el panel central de la segunda fila.

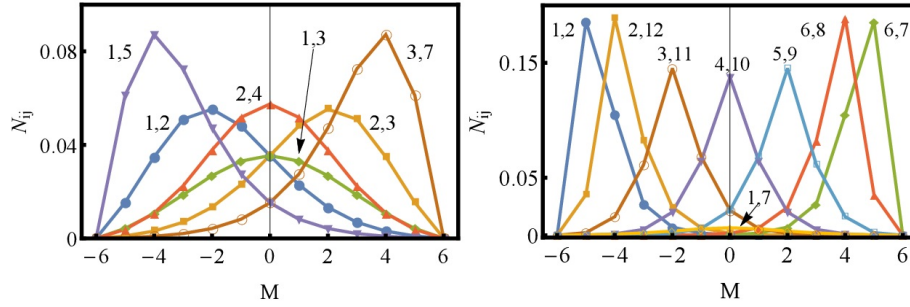


Figura B-2: Negatividad de pares  $N_{ij}$  en el punto de factorización ( $h_1 = -h_2 = 2h_s$ ) en los GS de magnetización definida  $M$ , para distintos pares  $i, j$  (indicados). Los resultados corresponden a una cadena cíclica de  $N = 12$  espines  $1/2$ , con una configuración de campos *next-alternating* (panel izquierdo) y con campos nulos en el *bulk* (panel derecho).

## Negatividad en el punto crítico

En la Fig. B-2 se muestra la Negatividad en el punto de factorización para los GS de magnetización definida, en una cadena cíclica inmersa en campos *next-alternating* (izquierda) y con campos nulos en el *bulk* (derecha). A diferencia del caso de campos alternantes (Fig. 5-3), para estas configuraciones la estructura de los distintos GS en el punto de factorización es más compleja y por lo tanto conduce a varios estados reducidos distintos, indicados en la figura. No obstante, la Negatividad sigue dependiendo solamente de la ubicación en la celda pero no de la separación entre espines. Puede verse que los distintos  $N_{ij}$  alcanzan su valor máximo para distintos valores de la magnetización  $M$ .

Cuando la configuración de campos es *next-alternating*, la máxima Negatividad de pares se alcanza para dos espines con el mismo campo (1-5, 1-9, etc. o 3-7, 3-11, etc.) para valores finitos de  $M$  de signo opuesto al campo correspondiente. Para el resto de pares el máximo de  $N_{ij}$  será siempre inferior al previamente mencionado, y se alcanza en  $M = 0$  para pares sin campo (2-4, 2-6, etc.) o para pares con campos opuestos (1-3, 1-7, etc.).

Por otro lado, para la cadena cíclica con configuración de campos nulos en el *bulk* se muestran solamente las cuatro Negatividades de pares más importantes. Estas últimas presentan máximos muy pronunciados en distintos valores de  $M$ . Los pares

como 6-8 o 6-7 alcanzan el valor más alto en magnetizaciones opuestas al campo aplicado en el sitio 7. A su vez, los pares distantes 4-10 con campo nulo simétricos con respecto a los sitios con campo también alcanzan un máximo significativo en  $M = 0$ . Así pues, estos resultados muestran que en este punto, una elección adecuada de la magnetización  $M$  permite entrelazar apreciablemente distintos pares de espines (por ej., espines 1,2 si  $M = -5$ , espines 3, 11 si  $M = -1$ , etc.).





# Apéndice C

## Fase completamente alineada en cadenas de espines en campos $n$ -alternantes

A continuación se derivan las Ecs. (7.3)-(7.3) que determinan el borde de la fase completamente alineada para cadenas cíclicas de espines en campos  $n$ -alternantes. El Hamiltoniano es

$$H = - \sum_{j=1}^N [h^j S_j^z + J(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y) + J_z S_j^z S_{j+1}^z], \quad (\text{C.1})$$

con  $N = 2nK$  y  $K$  el número de celdas.

*Proof:* Los estados completamente alineados  $|M = \pm Ns\rangle$  son autoestados triviales de  $H \forall n$ , con energías

$$E_{\pm Ns} = -Ks[\pm(h_1 + h_2) + nj_z], \quad (\text{C.2})$$

donde  $j_z = 2sJ_z$ . Evidentemente, estos autoestados son degenerados cuando  $h_1 + h_2 = 0$  y su energía es independiente de  $J$ . Por otro lado, el autoestado con  $M = Ns - 1$  de menor energía puede ser obtenido mediante la diagonalización de  $H$  en el subespacio

invariante generado por los  $2n$  estados tipo- $W$  [171]

$$|W_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2sK}} \sum_{l=0}^{K-1} S_{i+2nl}^- |Ns\rangle, \quad i = 1, \dots, 2n, \quad (\text{C.3})$$

y serán de la forma

$$|Ns - 1\rangle = \sum_{i=1}^{2n} w_i |W_i\rangle, \quad (\text{C.4})$$

con  $\sum_i |w_i|^2 = 1$ .

La diferencia de energía entre estos dos autoestados es

$$E_{Ns-1} - E_{Ns} = j_z + \lambda_n, \quad (\text{C.5})$$

con  $\lambda_n$  el menor autovalor de la matriz  $H_n$  de  $2n \times 2n$  obtenida al diagonalizar  $\Delta H = H - E_{Ns}$  en el subespacio generado por los estados (C.3). Esta matriz depende solo de  $h_1, h_2$  y  $j = 2sJ$ , y sus elementos son

$$(H_n)_{kl} = \delta_{kl}(h_1\delta_{k1} + h_2\delta_{k,n+1}) - j_n\delta_{k,l\pm 1}, \quad (\text{C.6})$$

donde  $\delta_{k,2n+1} \equiv \delta_{k1}$ ,  $\delta_{k0} \equiv \delta_{k,2n}$  y  $j_n = j/2$  para  $n \geq 2$ , con  $j_1 = j$ . Así, para  $h_1 + h_2 > 0$ , la existencia de un GS completamente alineado requiere  $j_z + \lambda_n > 0$ ; es decir,  $H_n + j_z I$  definido positivo. Esto implica

$$D_n = \text{Det} [H_n + j_z I] > 0. \quad (\text{C.7})$$

El borde de la fase completamente alineada queda entonces determinado por la ecuación  $D_n = 0$ .

De las Ecs. (C.6)–(C.7) se obtiene

$$D_n = a_n h_1 h_2 + b_n (h_1 + h_2) + c_n, \quad (\text{C.8})$$

con  $a_n, b_n$  y  $c_n$  coeficientes independientes del campo. Así pues, (C.7) conduce a la

Ec. (7.3), con

$$\alpha_n^2 = \frac{b_n^2 - a_n c_n}{a_n^2}, \quad \beta_n = \frac{b_n}{a_n}. \quad (\text{C.9})$$

Finalmente, la Ec. (7.4) se obtiene por simetría.

Para  $n = 1$ ,  $H_n$  es una matriz de  $2 \times 2$  y un cálculo trivial muestra que  $a_1 = 1$ ,  $b_1 = j_z$  y  $c_1 = j_z^2 - j^2$ ; esto conduce a  $\alpha_1 = j$  y  $\beta_1 = j_z$ . Es decir, a la Ec. (7.9) (en este caso  $\lambda_n = \frac{h_1+h_2}{2} - \sqrt{(\frac{h_1-h_2}{2})^2 + j^2}$ , y la Ec. (7.3) puede obtenerse directamente de la condición  $j_z + \lambda_1 > 0$ ).

Para valores generales  $n \geq 2$ , se obtiene

$$a_n = d_{n-1}^2, \quad b_n = d_{2n-1}, \quad (\text{C.10})$$

y  $c_n = d_{2n} - \frac{j^2}{4} d_{2n-2} - 2\frac{j^{2n}}{4^n}$ , donde  $d_n = \text{Det}(M_n)$  es el determinante de una matriz tridiagonal de Toeplitz [177] de  $n \times n$  cuyos elementos son  $(M_n)_{ij} = j_z \delta_{ij} - \frac{j}{2} \delta_{i,j\pm 1}$ .

En particular, este determinante satisface

$$d_{n+1} = j_z d_n - (j/2)^2 d_{n-1}, \quad (\text{C.11})$$

para  $n \geq 1$ , con  $d_1 = j_z$ ,  $d_0 \equiv 1$ ; es decir,  $(d_n) = A^n \begin{pmatrix} j_z \\ 1 \end{pmatrix}$ , con  $A = \begin{pmatrix} j_z & -j^2/4 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ . Por lo tanto, para cualquier  $n \geq 1$ , la diagonalización de  $A$  conduce a

$$d_n = \frac{(j_z + h_s)^{n+1} - (j_z - h_s)^{n+1}}{2^{n+1} h_s}, \quad (\text{C.12})$$

con  $h_s = \sqrt{j_z^2 - j^2}$ . Luego, las Ecs. (C.9)–(C.10) implican  $\alpha_n = 2(j/2)^n/d_{n-1}$  y por lo tanto conducen a la Ec. (7.7), con  $\beta_n = d_{2n-1}/d_{n-1}^2$  dado por la Ec. (7.6).  $\square$

Por otro lado, el autovalor más bajo de  $H_n$  cumple  $\lambda_n \leq -j \cos(\pi/n)$ ; alcanzando esta cota cuando  $h_1, h_2 \rightarrow \infty$ . Por lo tanto, la condición de estabilidad para el estado alineado  $j_z + \lambda_n > 0$  requiere que  $j_z > j \cos(\pi/n) = j_z^c(n)$ . Este valor umbral de  $j_z$  representa entonces el menor autovalor del bloque de  $(n-1) \times (n-1)$  de  $H_n$  asociado con los  $n-1$  espines sin campo. Este bloque es tridiagonal, y sus autovalores son  $-j \cos(\pi k/n)$ ,  $k = 1, \dots, n-1$ . Por lo tanto,  $-j \cos(\pi/n)$  representa el menor

autovalor de los  $n - 1$  espines atrapados entre dos espines completamente alineados en el límite  $h_1, h_2 \rightarrow \infty$ , para  $j_z = 0$  y para magnetización  $(n - 1)s - 1$ .

Si bien la Ec. (C.7) es en principio una condición necesaria para la estabilidad del GS completamente alineado con  $M = Ns$ , resulta ser también suficiente para  $j_z^c(n) < j_z < j$  y  $h_1 + h_2 > 0$ , ya que en este caso la magnetización del GS decrece en pasos de magnitud 1 a medida que los campos  $h_1, h_2$  decrecen desde  $+\infty$ . La excepción ocurre cuando  $j_z > j$  a lo largo del segmento  $h_1 = -h_2 = h$  entre los dos puntos de factorización (ver los paneles inferiores de la Fig. 7-3), donde los GS máximamente alineados  $M = \pm Ns$  están completamente degenerados si  $|h| \leq h_s$ ; Y los puntos de factorización  $h_1 = -h_2 = \pm h_s$  son los únicos en los que todas las magnetizaciones (es decir, todos los plateaus de magnetización) colapsan.

# Apéndice D

## Solución exacta de la cadena $XX$ en campos $n$ -alternantes

Cuando  $J_z = 0$ , el modelo  $XXZ$  se reduce al modelo  $XX$ . En particular, si  $s = 1/2$  el Hamiltoniano resultante puede ser exactamente mapeado a una forma bilineal en operadores de aniquilación  $c_j^\dagger$  y creación  $c_j$  fermiónicos a través de la transformación de Jordan-Wigner [152]:  $c_j^\dagger = S_j^+ \exp(-i\pi \sum_{k=1}^{j-1} S_k^+ S_k^-)$ .

En una cadena cíclica, para cada valor de la paridad

$$P \equiv \exp(i\pi \mathbf{N}) = \sigma = \pm 1, \quad (\text{D.1})$$

donde  $\mathbf{N} = \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j = S^z + N/2$  (y  $S^z$  el espín total), esta transformación conduce al Hamiltoniano

$$H^\sigma = - \sum_j [h_j (c_j^\dagger c_j - 1/2) - \eta_j^\sigma \frac{J}{2} (c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1})], \quad (\text{D.2})$$

donde  $\eta_j^- = 1 \forall j$  y  $\eta_j^+ = 1 (-1)$  para  $j \leq N-1$  ( $j = N$ ). Tras una transformada de Fourier discreta de los operadores fermiónicos,  $H^\sigma$  puede ser expresado como una

suma de  $K$  términos independientes determinados por matrices de  $2n \times 2n$   $\mathbf{H}_k$ :

$$H^\sigma = - \sum_{k=1-\delta_{\sigma 1}/2}^{K-\delta_{\sigma 1}/2} \mathbf{c}_k^\dagger \cdot \mathbf{H}_k \mathbf{c}'_k - \epsilon, \quad (\text{D.3})$$

$$\mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} h^+ + J \cos \omega_k & h^- & \dots \\ h^- & h^+ + J \cos(\omega_k + \frac{\pi}{n}) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (\text{D.4})$$

$$= \mathbf{D}_k + \mathbf{A}, \quad (\text{D.5})$$

donde  $\mathbf{c}_k^\dagger = (c_k^\dagger, c_{k+N/(2n)}^\dagger, \dots, c_{k+(2n-1)N/(2n)}^\dagger)$ ,  $\mathbf{D}_k$  es una matriz diagonal de elementos  $(\mathbf{D}_k)_{ii} = J \cos(\omega_k + \frac{\pi(i-1)}{n})$ ,  $\mathbf{A}$  es una matriz circulante especificada por el vector  $(h^+, h^-, h^+, h^-, \dots)$ , y

$$h^\pm = \frac{h_1 \pm h_2}{2n}, \quad \epsilon = \frac{Nh^+}{2}, \quad \omega_k = 2\pi k/N. \quad (\text{D.6})$$

La Ec. (D.3) muestra que la transformada de Fourier de la configuración de campo  $n$ -alternante conduce a términos de hopping fuera de la diagonal. Los valores de  $k$  son semienteros (enteros) para  $\sigma = 1$  ( $-1$ ). El estado fundamental se obtiene entonces diagonalizando los  $\mathbf{H}_k$  y ocupando todos los estados de un fermión con energía negativa, respetando la paridad correspondiente.

El número de transiciones en la magnetización del GS está asociado al número de veces que una energía de una partícula (“single fermion energy”) cambia de signo [178]. Por lo tanto, los valores en los que estas energías cambian de signo pueden ser determinados resolviendo

$$\text{Det}(\mathbf{H}_k) = 0, \quad (\text{D.7})$$

con  $k = 1/2, 1, \dots, K$ .

Para una configuración de campos alternante estándar  $n = 1$ , la Ec. (D.4) es

$$\mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} h^+ + J \cos \omega_k & h^- \\ h^- & h^+ - J \cos \omega_k \end{pmatrix}, \quad (\text{D.8})$$

de donde se obtienen las conocidas energías de una partícula [178–184]

$${}_1\lambda_k^\pm = h^+ \pm \sqrt{(h^-)^2 + J^2 \cos \omega_k}. \quad (\text{D.9})$$

En este caso

$$\text{Det}(\mathbf{H}_k) = h_1 h_2 - J^2 \cos^2 \omega_k, \quad (\text{D.10})$$

y la Ec. (D.7) determina  $N/2$  hipérbolas en el plano  $(h_1, h_2)$ . Este resultado implica que el GS presentará plateaus (sectores) de magnetización bien definida que tomarán valores de  $|M| = 0$  a  $|M| = N/2$ . En particular, para  $k = N/2$  el nivel más bajo en la paridad  $\sigma = -1$  cambia de signo y se vuelve negativo; y por lo tanto se recupera *exactamente* la hipérbola  $h_1 h_2 = j^2$  de la transición  $N/2 \rightarrow N/2 - 1$  (este resultado está en acuerdo con las Ecs. (7.3)–(7.6) para  $n = 1$  y  $j_z = 0$ ). Cuando  $n \geq 2$  las expresiones exactas son más complicadas.

En el caso  $n = 2$ , el determinante de  $\mathbf{H}_k$  es

$$\text{Det}(\mathbf{H}_k) = \frac{J^4}{4} \sin^2(2\omega_k), \quad (\text{D.11})$$

y se anula solamente cuando  $k = N/4$ ; en cuyo caso conduce a una energía de partícula idénticamente nula. Por ende, ahora no hay ninguna energía que cambie de signo a medida que los campos son variados, y esto indica que no hay transiciones en la magnetización del GS. Aún más, se puede demostrar el siguiente lema:

**Lema.** *El GS de un sistema de espines finito con interacción XX en una configuración de campos next-alternating ( $n = 2$ ) será un estado “medio lleno” con magnetización  $M = 0$ ,  $\forall h_1, h_2$ .*

*Proof:* Primero empezamos comparando el número de niveles con energía de una partícula negativa dentro de cada paridad  $\sigma$ ; ya que la suma de estos determina la energía  $E_\sigma$  del estado más bajo. Dado que  $\text{Det}[\mathbf{H}_k] = J^4 \sin^2(2\omega_k) \geq 0 \forall k$ , entonces cada matriz  $\mathbf{H}_k$  será semi definida positiva (o negativa); o tendrá dos autovalores positivos y dos negativos. Sin embargo, dado que el determinante de cualquier menor principal que conecta  $i$  con  $i + 2$  es  $-J^2 \cos^2(\omega_k)$ , entonces  $\mathbf{H}_k$  no puede ser semi

definida positiva o negativa.

En el subespacio de paridad  $\sigma = 1$ ,  $\text{Det}[\mathbf{H}_k] > 0 \forall k = \{1/2, \dots, K - 1/2\}$ , lo que implica que siempre habrán  $N/2$  energías de una partícula que serán negativas; mientras que para  $\sigma = -1$  hay  $N/2 - 1$ , ya que uno de los autovalores de  $\mathbf{H}_{N/4}$  es idénticamente nulo. Debido a esta pequeña -aunque importante- diferencia en el número de niveles con energía negativa,  $E_1 < E_{-1} \forall h_1, h_2$ .

Si bien este resultado puede ser verificado numéricamente, para  $h_2 = \pm h_1 = \pm h$  se puede realizar una expansión en serie de la diferencia de energía entre los niveles más bajos de cada paridad  $\Delta E = E_{-1} - E_1$ ; y así se puede mostrar que  $\Delta E > 0 \forall h$ . Asimismo, para campos grandes, un tratamiento perturbativo de segundo orden verifica que el autoestado con  $M = 0$  es en este caso el GS  $\forall J$ .  $\square$



# Apéndice E

## Contando configuraciones de espines y campos factorizantes

En este Apéndice -de tono matemático, anecdótico y sumamente informal- se realiza una breve discusión sobre el problema de determinar cuantas configuraciones de espines y campos factorizantes existen para un dado sistema de espines. Si bien la pregunta en si misma parece poco relevante en el contexto de la física, en mi caso particular -y como buen amante de los retos matemáticos- resultó ser una pregunta intrigante que casi me consume por completo.

Empecemos por el caso más simple: una cadena abierta de  $N$  espines con interacción de primeros vecinos. Como se discutió en la Sección 5.2.2, podemos arrancar con una semilla arbitraria  $\vartheta_0 \neq 0, \pi$  en el primer espín de la cadena. Luego, según la Ec. (5.8) -que se incluirá de nuevo en este apéndice para refrescar la memoria-

$$\eta_{ij} \equiv \frac{\tan(\theta_j/2)}{\tan(\theta_i/2)} = \Delta_{ij} \pm \sqrt{\Delta_{ij}^2 - 1}, \quad (\text{E.1})$$

hay dos direcciones de alineación posibles para cada uno de los espines siguientes ( $\theta_{i+1} = \vartheta_{k\pm 1}$  si  $\theta_i = \vartheta_k$ ). Así pues, en este caso hay  $2^{N-1}$  configuraciones distintas de estados y campos factorizantes.

Por ejemplo, para una cadena de  $N = 4$  espines  $s$  con anisotropía  $\Delta$  constante y donde la magnitud de la interacción  $XX$  es  $J$ , se obtienen los ocho campos factorizan-

tes  $\pm h_s(1, -2, 2, -1)$ ,  $\pm h_s(1, 0, -2, 1)$ ,  $\pm h_s(1, -2, 0, 1)$  y  $\pm h_s(1, 0, 0, -1)$ , que se corresponden respectivamente con los autoestados separables  $|\vartheta_0\vartheta_{\pm 1}\vartheta_0\vartheta_{\pm 1}\rangle$ ,  $|\vartheta_0\vartheta_{\pm 1}\vartheta_{\pm 2}\vartheta_{\pm 1}\rangle$ ,  $|\vartheta_0\vartheta_{\pm 1}\vartheta_0\vartheta_{\mp 1}\rangle$ , y  $|\vartheta_0\vartheta_{\pm 1}\vartheta_{\pm 2}, \vartheta_{\pm 3}\rangle$ .

Luego, si la cadena es cíclica, entonces hay solamente  $\binom{N}{N/2}$  configuraciones, ya que la interacción entre los espines  $1 - N$  implica que  $\theta_N = \vartheta_{\pm 1}$ . Por lo tanto, para  $N = 4$  solo los primeros seis de los autoestados previamente mencionados son realizables; y en este caso conducen a los campos factorizantes  $\pm 2h_s(1, -1, 1, -1)$ ,  $\pm 2h_s(1, 0, -1, 0)$ , y  $\pm 2h_s(0, -1, 0, 1)$ .

*So far so good.* Habiendo resuelto el caso más simple, nos empezamos a sentir confiados y un poco más atrevidos; así que decidimos considerar otros casos. Por ejemplo, para una geometría de estrella -donde un espín central está acoplado a  $N - 1$  espines no interactuantes [137–139]- hay una vez más  $2^{N-1}$  configuraciones de campos factorizantes; dadas por las elecciones de signos en (E.1). Cabe mencionar que entre estas configuraciones existe una en la que el campo en el espín central es nulo si el resto de los campos cumplen con la condición de suma ponderada nula (5.10).

Para configuraciones  $d$ -dimensionales podemos intentar extender los argumentos previos, pero dado que los ángulos  $\theta_j$  de los espines acoplados con el espín  $i$  deben satisfacer la Ec. (E.1), entonces pueden diferir de  $\theta_i$  en un solo paso:  $\theta_j = \vartheta_{k\pm 1}$  si  $\theta_i = \vartheta_k$  (Fig. 5-1).

Así pues, decidimos considerar sistemas bidimensionales abiertos de  $M \times N$  espines con interacción de primeros vecinos y anisotropía fija  $\Delta$  (tanto en el eje vertical como horizontal). Sin embargo, como muy rápidamente nos daríamos cuenta, la determinación del número de configuraciones posibles  $L(M, N)$  no es para nada trivial en el caso general.

Para un sistema de  $2 \times N$  aún se puede realizar una cuenta suficientemente simple para mostrar que dada una semilla  $\vartheta_0 \in (0, \pi)$  hay

$$L(2, N) = 2 \times 3^{N-1}, \quad (\text{E.2})$$

posibles configuraciones de campos factorizantes y estados separables; dado que para

cada par  $(\vartheta_k, \vartheta_{k+1})$  hay tres posibles continuaciones:  $(\vartheta_{k+1}, \vartheta_{k+2})$  y  $(\vartheta_{k\pm 1}, \vartheta_k)$ .

A estas alturas, la determinación general de  $L(M, N)$  había dejado de ser una curiosidad para convertirse -casi- en una obsesión. Mi escritorio estaba lleno de hojas repletas de configuraciones distintas que contaba a mano, había un premio monetario entre mis amigos para quien encontrara la solución; e incluso llegué a plantear el problema en varios foros de problemas matemáticos. Pero la fórmula general para  $L(M, N)$  nos seguía eludiendo.

Luego, en un acto de genialidad, mi director el Dr. Rossignoli y mi codirectora la Dra. Canosa lograron resolver el caso del sistema de  $3 \times N$  espines siguiendo un procedimiento similar al utilizado para  $2 \times N$ . Pero en este caso el problema conduce a un sistema recursivo de ecuaciones lineales de primer orden -un problema del tipo Fibonacci- en el que se determina que el número de configuraciones está dado por

$$L(3, N) = \alpha_+ \lambda_+^N + \alpha_- \lambda_-^N, \quad (\text{E.3})$$

con  $\lambda_{\pm} = \frac{5 \pm \sqrt{17}}{2}$ ,  $\alpha_{\pm} = \frac{1 \pm 3/\sqrt{17}}{2}$ . Créalo o no querido lector, un número  $N$  entero en (E.3) conduce a otro número entero para  $L(3, N)$ . Por ejemplo, con este resultado se puede obtener que hay  $L(3, 3) = 82$  configuraciones para sistemas de  $3 \times 3$  espines. Por fin habíamos podido avanzar, y este resultado nos mostró que los casos  $4 \times N$  y  $5 \times N$  pueden ser resueltos en forma similar. Sin embargo, estos casos no parecían permitir la determinación de una solución general.

Cabe mencionar, que tras varias semanas de dibujar configuraciones de espines de la forma  $(\dots, \vartheta_{k-1}, \vartheta_k, \vartheta_{k+1}, \dots)$ , me di cuenta que esta notación es -como mínimo- engorrosa y puede resultar en errores innecesarios. Así pues, logré mostrar que dada una configuración en un arreglo de  $M \times N$  con una semilla para los ángulos  $\vartheta_0$  en el sitio  $i = j = 1$ , entonces la función no decreciente definida como

$$(i + j - k)/2, \quad (\text{E.4})$$

donde  $i, j$  indica el sitio, y  $k$  es el número de pasos en (E.1) de  $\theta_{11} = \vartheta_0$  a  $\theta_{ij} = \vartheta_k$ , define un mapeo uno-a-uno entre cada configuración factorizada y un arreglo en

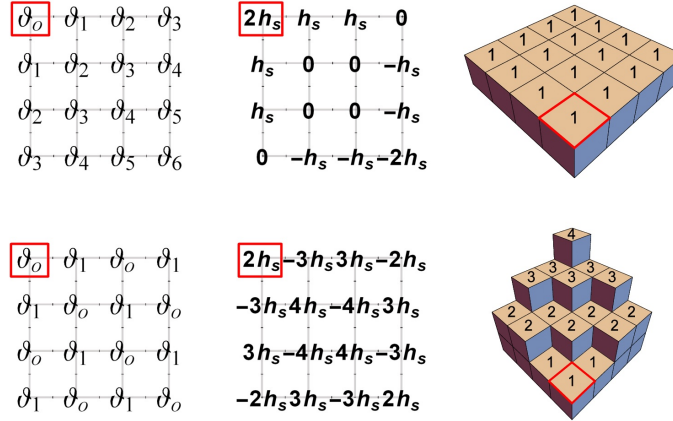


Figura E-1: Representación esquemática de las dos configuraciones extremales de la solución separable y de los campos factorizantes para un sistema de  $4 \times 4$  espines: la solución con campos nulos en el bulk (arriba) y el caso alternante (abajo). La tercer columna muestra la función no-decreciente  $(i + j - k)/2$ , donde  $i, j$  indican el sitio y  $k$  el número de pasos desde  $\vartheta_{ij} = \vartheta_k$  hasta la semilla inicial.

forma de terraza. Este último está compuesto de  $M \times N$  números enteros que son no decrecientes tanto de izquierda a derecha como de arriba a abajo, de tal forma que dos entradas contiguas solo pueden diferir a los sumo en 1. Este mapeo se muestra en la Fig. E-1.

Aun teniendo esta nueva forma de definir el problema, no logramos realizar más progreso. Finalmente, mientras tomaba un café viendo mi pizarra llena de terrazas no decrecientes, mi atención se centró sobre una esquina que tenía los resultados que ya habíamos logrado conseguir:

- Para  $1 \times N$     1,    2,    4,    8,    16
- Para  $2 \times N$     2,    6,    18,    54,    162
- Para  $3 \times N$     4,    18,    82,    374,    1706

En ese momento, decidí hacer lo que cualquier ser humano sano haría: tomar esos números, e introducirlos en el buscador de Google.

*Eureka!*

En la Fig. (E-2) se muestra la página que pondría fin a mis pesares: OEIS, la enciclopedia on-line de secuencias de números enteros.

This site is supported by donations to [The OEIS Foundation](#).

## THE ON-LINE ENCYCLOPEDIA OF INTEGER SEQUENCES®

founded in 1964 by N. J. A. Sloane

### [The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences® \(OEIS®\)](#)

Enter a sequence, word, or sequence number:

1,2,3,6,11,23,47,106,235

Figura E-2: OEIS, la enciclopedia on-line de secuencias de números enteros.

Para mi sorpresa, los números que busqué se corresponden con una secuencia conocida, ya que el problema de contar terrazas obtenidas mediante la Ec. (E.4) es completamente equivalente a contar dobleces de Miura-ori [185] -un problema relacionado con el *Origami*, el arte milenario japonés de doblar papel- y a contar las distintas formas de pintar con 3 colores los vértices de un grafo de  $M \times N$  con un vértice pre-coloreado [186]. Si bien no se conoce una expresión cerrada de la forma (E.3) para el caso general de  $M \times N$ , se puede obtener una matriz de transferencia recursiva  $A$  para determinar el número de configuraciones de estados separables y campos factorizantes. Si definimos las matrices  $A(1) = (1)$ ,

$$A(M+1) = \begin{pmatrix} A(M) & A(M)^T \\ 0 & A(M) \end{pmatrix}, \quad (\text{E.5})$$

y  $B(M) = A(M) + A(M)^T$ , entonces el número total de configuraciones para los estados separables -dada una semilla- es simplemente

$$L(M, N) = \sum_{i,j} (B^{N-1}(M))_{ij}, \quad (\text{E.6})$$

es decir, la suma de todos los elementos de  $B^{N-1}(M)$ . Para  $M = 2$  y  $3$  la Ec. (E.6) conduce a los resultados previos (E.2)–(E.3). De hecho, se puede demostrar que para valores grandes de  $M$  y  $N$ , el número total de configuraciones crece exponencialmente con la dimensión [185, 187].



# Bibliografía

- [1] M. Cerezo, R. Rossignoli, and N. Canosa, Phys. Rev. B **92**,224422 (2015).
- [2] M. Cerezo, R. Rossignoli, and N. Canosa, Phys. Rev. A **94**, 042335 (2016).
- [3] M. Cerezo, R. Rossignoli, N. Canosa, and E. Ríos, Phys. Rev. Lett. **119**, 220605 (2017).
- [4] *Quantum Discord and Entropic Measures of Quantum Correlations: Optimization and Behavior in Finite XY Spin Chains*, N. Canosa, M. Cerezo, N. Gigena, and R. Rossignoli. Capítulo del libro *Lectures on General Quantum Correlations and Their Applications*, Eds. F. F. Fanchini, D. Soares Pinto, and G. Adesso, Springer International Publishing AG. (2017).
- [5] M. Cerezo, R. Rossignoli, N. Canosa, and C. A. Lamas, [arXiv:1809.00743](https://arxiv.org/abs/1809.00743).
- [6] A. Boette, R. Rossignoli, N. Gigena, and M. Cerezo, Phys. Rev. A **93**, 062127 (2016).
- [7] *Inclusión de la computadora cuántica IBM 5Q Quantum Experience como recurso didáctico para la realización de experimentos y simulaciones con alumnos de la Licenciatura en Física*, M. Cerezo, en *1ras Jornadas Sobre Enseñanza Y Aprendizaje En El Nivel Superior En Ciencias Exactas Y Naturales* (2017).
- [8] G. E. Moore, Republicado en: Proceedings of the IEEE **86**, 82 (1998).
- [9] M. Plank, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft **2**, 237 (1900).

- [10] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, *Physical Review*, **47**, 777 (1935).
- [11] E. Schrödinger, *Proc. Camb. Philos. Soc.* **31**, 555 (1936); *ib idem*, 32, 446 (1936).
- [12] R. P. Feynman, *Int. J. Theor. Phys.* **21**, 467 (1982).
- [13] D. Deutsch, *Proc. R. Soc. Lond. A* **400**, 97, (1985).
- [14] A. Montanaro, *NPJ Quantum Information* **2**, 15023 (2016).
- [15] P. W. Shor, *Proc. Ann. Symp. Found. Comp. Science*, IEEE Press **35**, 124 (1994).
- [16] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, and W. K. Wootters *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1895 (1993).
- [17] N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel, and H. Zbinden, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 145 (2002).
- [18] M.A. Nielsen and I. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge Univ. Press, UK (2000).
- [19] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).
- [20] T. Roscilde, P. Verrucchi, A. Fubini, S. Haas, V. Tognetti, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 167203 (2004).
- [21] J. I. Latorre, and A. Riera, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504002 (2009).
- [22] N. A. Gershenfeld, and I. L. Chuang, *Science* **275**, 350 (1997).
- [23] V. Cerletti, W. A. Coish, O. Gywat, and D. Loss, *Nanotechnology* **16**, R27-R49, (2005).
- [24] W. A. Coish, and D. Loss, *Quantum Computing with Spins in Solids*. En *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*, New Jersey: Wiley (2007).



- [25] W. Heisenberg, *Z. f. Phys.* **38**, 411-426 (1926).
- [26] P. Dirac, *Proc. R. Soc. Lond. A* **112**, 661-677 (1926).
- [27] N. W. Ashcroft, and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Philadelphia: Saunders College (1976).
- [28] K. Yosida, *Theory of magnetism*, New York: Springer-Verlag (1996).
- [29] J. B. Parkinson, and J. J. Farnell, *An Introduction to Quantum Spin Systems*, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag (2010).
- [30] C. Timm, *Theory of magnetism*, Technische Universität Dresden, Institute for Theoretical Physics (2011).
- [31] M. Marder, *Condensed Matter Physics*, New York: Wiley (2011).
- [32] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, New York: Academic (1982).
- [33] M. Takahashi, *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*, Cambridge: Cambridge University Press (1999).
- [34] J. Kurmann, H. Thomas, and G. Müller, *Physica A* **112**, 235 (1982).
- [35] L.M.K. Vandersypen and I.L. Chuang, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 1037 (2005).
- [36] I.M. Georgescu, S. Ashhab, and F. Nori, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 153 (2014).
- [37] C. Senko, P. Richerme, J. Smith, A. Lee, I. Cohen, A. Retzker, and C. Monroe, *Phys. Rev. X* **5**, 021026 (2015).
- [38] D. DiVicenzo, *Fortschritte der Physik* **48**, 9 (2000).
- [39] B. Schumacher, *Phys. Rev. A* **51**, 2738 (1995).
- [40] R. P. Feynman, and F. L. Vernon Jr. *J. Appl. Phys.* **28**, 49 (1957).

- [41] Imágen por Glosser.ca (Own work) [CC BY-SA 3.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0>)], via Wikimedia Commons, [https://commons.wikimedia.org/wiki/File%3ABloch\\_Sphere.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File%3ABloch_Sphere.svg).
- [42] N. Bohr, Phys. Rev. **48**, 696 (1935).
- [43] J. S. Bell, Physics **1**, 195 (1964).
- [44] E. Chitambar, D. Leung, L. Mancinska, M. Ozols, and A. Winter, Comm. Math. Phys. **328**, 303 (2014).
- [45] R. F. Werner, Phys. Rev. A **40**, 4277 (1989).
- [46] C. H. Bennett, H. Bernstein, S. Popescu and B. Schumacher, Phys. Rev. A **53**, 2046 (1996).
- [47] S. M. Giampaolo, S. Montangero, F. Dell' Anno, S. De Siena, and F. Illuminati, Phys. Rev. B **88**, 125142 (2013).
- [48] H. Li and F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **101**, 010504 (2008).
- [49] L. Gurvits, En Proceedings of the thirty-fth annual ACM symposium on Theory of computing pp. 1019 (ACM, 2003).
- [50] A. Peres, Phys. Rev. Lett. **77**, 1413 (1996).
- [51] M. Horodecki, P. Horodecki, and R. Horodecki, Phys. Lett. A **223**, 1 (1996).
- [52] M. B. Plenio, S. Virmani, Quantum Inf. Comput. **7**, 1 (2007).
- [53] S. Hill and W.K. Wootters, Phys. Rev. Lett. **78**, 5022 (1997).
- [54] W.K. Wootters, Phys. Rev. Lett. **80**, 2245 (1998).
- [55] G. Vidal and R. F. Werner, Phys. Rev. A **65**, 032314 (2002).
- [56] K. Zyczkowski, P. Horodecki, A. Sanpera, M. Lewenstein, Phys. Rev. A **58**, 883 (1998).

- [57] K. Zyczkowski, Phys. Rev. A **60**, 3496 (1999).
- [58] V. Coffman, J. Kundu, W.K. Wootters, Phys. Rev. A **61**, 052306 (2000).
- [59] T.J. Osborne, F. Verstraete, Phys. Rev. Lett. **96** 220503 (2006).
- [60] B. Dakic *et al*, Nat. Phys. **8**, 666 (2012).
- [61] D. Cavalcanti, L. Aolita, S. Boixo, K. Modi, M. Piani, and A. Winter, Phys. Rev. A **83**, 032324 (2011).
- [62] N. Gigena, *Medidas entrópicas de correlaciones en sistemas cuánticos*, Tesis doctoral (2017).
- [63] H. Ollivier, W. H. Zurek, Phys. Rev. Lett. **88**, 017901 (2001).
- [64] L. Henderson, V. Vedral, J. Phys. A **34**, 6899 (2001).
- [65] H. Wehrl, Rev. Mod. Phys. **50**, 221 (1978).
- [66] N. Gigena, R. Rossignoli, Phys. Rev. A **90**, 042318 (2014).
- [67] N. Gigena, R. Rossignoli, J. Phys. A **47**, 015302 (2014).
- [68] I. Wang, New. J. Phys. **16**, 033027 (2014).
- [69] N. Canosa, R. Rossignoli, Phys. Rev. Lett. **88**, 170401 (2002).
- [70] C. Tsallis, J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988).
- [71] C. Tsallis, *Introduction to Non-Extensive Statistical Mechanics* (Springer, New York, 2009).
- [72] R. Rossignoli, N. Canosa, L. Ciliberti, Phys. Rev. A **82**, 052342 (2010).
- [73] R. Rossignoli, N. Canosa, L. Ciliberti, Phys. Rev. A **84**, 052329 (2011).
- [74] I. Dzyaloshinskii, J. Phys. Chem. Solids **4**, 241 (1958).
- [75] T. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).

- [76] G. Misguich, and C. Lhuillier, *Two-Dimensional Quantum Antiferromagnets*. In: *Frustrated Spin Systems*, edited by por H. T. Diep, and H. Giacomini, University of Cergy-Pontoise, France (2013).
- [77] S. Sachdev, Lecture notes: *Quantum antiferromagnets in two dimensions*, [arXiv:cond-mat/9303014v1](https://arxiv.org/abs/cond-mat/9303014v1) (1993).
- [78] G. Müller, and R.E. Shrock, Phys. Rev. B **32**, 5845 (1985).
- [79] T. Roscilde, P. Verrucchi, A. Fubini, S. Haas, and V. Tognetti, Phys. Rev. Lett. **94**, 147208 (2005).
- [80] L. Amico, F. Baroni, A. Fubini, D. Patanè, V. Tognetti, and P. Verrucchi,, Phys. Rev. A **74**, 022322 (2006).
- [81] F. Baroni, A. Fubini, V. Tognetti, and P. Verrucchi, J. Phys. A **40**, 9845 (2007).
- [82] S.M. Giampaolo, F. Illuminati, P. Verrucchi, and S. De Siena, Phys. Rev. A **77**, 012319 (2008).
- [83] S.M. Giampaolo, G. Adesso, and F. Illuminati, Phys. Rev. Lett. **100**, 197201 (2008).
- [84] S.M. Giampaolo, G. Adesso, and F. Illuminati, Phys. Rev. B **79**, 224434 (2009).
- [85] S.M. Giampaolo, G. Adesso, and F. Illuminati, Phys. Rev. Lett. **104**, 207202 (2010).
- [86] M. Rezai, A. Langari, J. Abouie, Phys. Rev. B **81**, 060401R (2010).
- [87] B. Tomasello, D. Rossini, A. Hamma, and L. Amico, Europhys. Lett. **96**, 27002 (2011).
- [88] G. Karpat, B. Cakmak, and F. F. Fanchini, Phys. Rev. B **90**, 104431 (2014).
- [89] R. Rossignoli, N. Canosa, and J.M. Matera, Phys. Rev. A **77**, 052322 (2008).
- [90] N. Canosa, R. Rossignoli, and J.M. Matera, Phys. Rev. B **81**, 054415 (2010).

- [91] R. Rossignoli, N. Canosa, and J.M. Matera, Phys. Rev. A **80**, 062325 (2009).
- [92] G.L.Giorgi, Phys. Rev. B **79**, 060405(R) (2009).
- [93] A. Boette, R. Rossignoli, N. Canosa, and J. M. Matera, Phys. Rev. B **94**, 214403 (2016).
- [94] L. Ciliberti, R. Rossignoli, and N. Canosa, Phys. Rev. A **82**, 042316 (2010).
- [95] J. Abouie, M. Rezai, A. Langari, Prog. Theor. Phys. **127** 315 (2012).
- [96] S. Campbell, J. Richens, N. L. Gullo, and T. Busch, Phys. Rev. A **88**, 062305 (2013).
- [97] F. Franchini, A. R. Its, B.-Q. Jin, and V. E. Korepin, J. Phys. A **40**, 8467 (2007).
- [98] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, Ann. Phys. (NY) **16**, 407 (1961).
- [99] F. Franchini, A. R. Its, B.-Q. Jin, and V. E. Korepin, J. Phys. A **40**, 8467 (2007).
- [100] F. Franchini, A. R. Its, and V. E. Korepin, J. Phys. A **41**, 025302 (2008).
- [101] E. Ercolessi, S. Evangelisti, F. Franchini, and F. Ravanini, Phys. Rev. B **83**, 012402 (2011).
- [102] L. Ciliberti, N. Canosa, R. Rossignoli, Phys. Rev. A **88**, 012119 (2013).
- [103] C. N. Yang, C. P. Yang, Phys. Rev. **150**, 321 (1966).
- [104] J. D. Johnson, M. McCoy, Phys. Rev. **A** 6, 1613 (1972).
- [105] F.C. Alcaraz, A.L. Malvezzi, J. Phys. A: Math. Gen. **28**, 1521 (1995).
- [106] D.V. Dmitriev, V.Ya. Krivnov, Phys. Rev. B **70**, 144414 (2004).
- [107] N. Canosa, R. Rossignoli, Phys. Rev. A **73**, 022347 (2006).

- [108] E. Ríos, R. Rossignoli, N. Canosa, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **50**, 095501 (2017).
- [109] O. Breunig, M. Garst, E. Sela, B. Buldmann, P. Becker, L. Bohatý, R. Müller, T. Lorenz, Phys. Rev. Lett. **111**, 187202 (2013).
- [110] J. Wouters, H. Katsura, and D. Schuricht Phys. Rev. B **98**, 155119 (2018).
- [111] D. Giuliano, D. Rossini, P. Sodano, A. Trombettoni, Phys. Rev. B **87**, 035104 (2013).
- [112] M.T. Thomaz, E.V. Correa Silva, O. Rojas, Cond. Matt. Phys. **17**, 23002 (2014).
- [113] R.G. Melko, J. Phys. Cond. Matt. **19**, 145203 (2007).
- [114] M. Lewenstein, A. Sanpera, and V. Ahufinger, *Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating Quantum Many-Body Systems* (Oxford University Press, 2012).
- [115] T.L. Nguyen, J.M. Raimond, C. Sayrin, R. Cortiñas, T. Cantat-Moltrecht, F. Assemat, I. Dotsenko, S. Gleyzes, S. Haroche, G. Roux, Th. Jolicoeur, M. Brun, Phys. Rev. X **8**, 011032 (2018).
- [116] L.M. Duan, E. Demler, M.D. Lukin, Phys. Rev. Lett. **91** 090402 (2003).
- [117] K. Kim, M.S. Chang, R. Islam, S. Korenblit, L.M. Duan, C. Monroe, Phys. Rev. Lett. **103**, 120502 (2009).
- [118] T. Fukuhara et al, Nature, **502**, 76 (2013).
- [119] O.V. Marchukov, A.G. Volosniev, M. Valiente, D. Petrosyan, N.T. Zinner, Nat. Comms. 13070 (2016).
- [120] A.G. Volosniev, D. Petrosyan, M. Valiente, D.V. Fedorov, A.S. Jensen, N.T. Zinner, Phys. Rev. A **91**, 023620 (2015).
- [121] Y. Yamamoto, K. Semba (eds.), *Principles and Methods of Quantum Information Technologies*, Springer (2016).

- [122] C. Noh, D.G. Angelakis, Rep. Prog. Phys. **80**, 016401 (2017).
- [123] Z.X. Chen, Z.W. Zhou, X. Zhou, X.F. Zhou, G.C. Guo, Phys. Rev. A **81** 022303 (2010).
- [124] M.J. Hartmann, F.G.S.L. Brandao, M.B. Plenio, Phys. Rev. Lett. **99** 160501 (2007).
- [125] Y. Salathé et al, Phys. Rev. X **5**, 021027 (2015).
- [126] G. Wendin, Rep. Prog. Phys. **80**, 106001 (2017).
- [127] G. Xu, G. Long, Sci. Rep. **4**, 6814 (2014).
- [128] M. H. Devoret, and R. J. Schoelkopf, Science **339**, 1169 (2013).
- [129] R. Barends, *et al*, Nature **534** 222 (2016); R. Barends *et al*, Phys. Rev. Lett. **111**, 080502 (2013).
- [130] D. Porras, and J.I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **92**, 207901 (2004).
- [131] K. Kim, *et al*, Phys. Rev. Lett. **103**, 120502 (2009).
- [132] R. Blatt, and C.F. Roos, Nat. Phys. **8**, 277 (2012).
- [133] S. Korenblit, *et al*, New J. Phys. **14**, 095024 (2012).
- [134] J.W. Britton, *et al*, Nature **484**, 489 (2012).
- [135] R. Toskovic et al, Nat. Phys. **12**, 656 (2016).
- [136] Y.P. Shim, S. Oh, X. Hu, M. Friesen, Phys. Rev. Lett. **106**, 180503 (2011).
- [137] Q. Chen, J. Cheng, K.L. Wang, J. Du, Phys. Rev. A **74**, 034303 (2005).
- [138] Y. Wan-Li, W. Hua, F. Mang, A. Jun-Hong, Chin. Phys. B **18**, 3678 (2009).
- [139] D. Türkpence, F. Altintas, M. Paternostro, and O. Müstecaplıoğlu, Europhys. Lett. **117**, 50002 (2017).

- [140] V. Cerletti, W.A. Coish, O. Gywat, and D. Loss, *Nanotechnology* **16**, R27 (2005).
- [141] C. D. Batista, *Phys. Rev. B* **80**, 180406(R) (2009).
- [142] V. Srinivasa, H. Xu, and J.M. Taylor, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 226803 (2015).
- [143] B. Bertrand et al, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 096801 (2015).
- [144] T. Kontos et al, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 137007 (2002).
- [145] C.J. Wellard et al, *J. Phys. Condensed Matter*, **16**, 5697 (2004).
- [146] F. Meier, J. Levy, D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 047901 (2003).
- [147] T. Kadowaki, H. Nishimori, *Phys. Rev. E* **58**, 5355 (1998).
- [148] A. Das and B. K. Chakrabarti, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1061 (2008).
- [149] M. W. Johnson, et al, *Nature* **473**, 194 (2011).
- [150] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, England: Cambridge University Press (1999).
- [151] S. Sachdev, *Nature Physics* **4**, 173 (2008).
- [152] E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis, *Ann. Phys.* **16** 407 (1961).
- [153] M. Vojta, *Rep. Prog. Phys.* **66**, 2069 (2003).
- [154] N. Laflorencie, I. Affleck, and M. Berciu, *J. Stat. Mech.* P12001 (2005).
- [155] Z. Wang, T. Lorenz, D. I. Gorbunov, P. T. Cong, Y. Kohama, S. Niesen, O. Breunig, J. Engelmayer, A. Herman, J. Wu, K. Kindo, J. Wosnitza, S. Zherlitsyn, and A. Loidl, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 207205 (2018).
- [156] C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, *Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory* (Springer, Berlin, 2013).



- [157] F. Michaud, T. Coletta, S. R. Manmana, J. D. Picon, and F. Mila, *Phys. Rev. B* **81**, 014407 (2010).
- [158] A. Honecker, J. Schulenburg, and J. Richter, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, S749 (2004).
- [159] A. Tanaka, K. Totsuka, and X. Hu, *Phys. Rev. B* **79**, 064412 (2009).
- [160] M. Takigawa, and F. Mila, *Magnetization plateaus*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 164 (Springer, 2011), Chap. 10, pp. 241–267.
- [161] C. A. Lamas, S. Capponi, and P. Pujol, *Phys. Rev. B* **84**, 115125 (2011); F. Elias, M. Arlego, and C. A. Lamas, *Phys. Rev. B* **95**, 214426 (2017).
- [162] H. Hu, C. Cheng, Z. Xu, H.-G. Luo, and S. Chen, *Phys. Rev. B* **90**, 035150 (2014).
- [163] M. Oshikawa, M. Yamanaka, I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997).
- [164] H. Zhang, C. A. Lamas, M. Arlego, W. Brenig, *Phys. Rev. B* **93**, 235150 (2016).
- [165] C. K. Majumdar, and D. K. Ghosh, *J. Math. Phys.* **10**, 1399 (1969).
- [166] S. Nishimoto, N. Shibata, and C. Hotta, *Nat. Commun.* **4**, 2287 (2013).
- [167] F.C. Alcaraz, A.L. Malvezzi, *J. Phys. A* **28**, 1521 (1995).
- [168] M.Asoudeh, V.Karimipour, *Phys.Rev. A* **71** 022308 (2005).
- [169] G.-F. Zhang, S.-S. Li, *Phys. Rev. A* **72**, 034302 (2005).
- [170] T. Chanda, T. Das, D. Sadhukhan, A. K. Pal, A. Sen De, and U. Sen, *Phys. Rev. A* **94**, 042310 (2016).
- [171] W. Dür, G. Vidal, J.I. Cirac, *Phys. Rev. A* **62**, 062314 (2000).
- [172] S. R. White, *Phys. Rev. B* **48**, 10 345 (1993).

- [173] A. Kolezhuk, R. Roth, and U. Schollwöck, Phys. Rev. Lett. **77**, 5142 (1996); Phys. Rev. B **55**, 8928 (1997).
- [174] U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2003); Ann. Phys. **326**, 96 (2011).
- [175] S. Zippilli, M. Grajcar, E. Il'ichev, and F. Illuminati, Phys. Rev. A **91**, 022315 (2015).
- [176] S. H. W. van der Ploeg, *et al*, Phys. Rev. Lett. **98**, 057004 (2007).
- [177] A. Böttcher, S.M. Grudsky, Spectral Properties of Banded Toeplitz Matrices, SIAM (2005).
- [178] N. Canosa, R. Rossignoli, Phys. Rev. A **75** 032350 (2007).
- [179] J.H. H. Perk, H.W. Capel, M.J. Zuilhof, Th.J. Siskens, Phys. A **81**, 319 (1975).
- [180] K. Okamoto, K.Yasumura, J. Phys. Soc. J. **59**, 993 (1990).
- [181] S. Deng, G. Ortiz, L. Viola, EPL **84**, 67008 (2008).
- [182] U. Divakaran, A. Dutta, D. Sen, Phys. Rev. B **78**, 144301 (2008).
- [183] A. De Pasquale, P.Facchi, Phys. Rev. A **80** 032102 (2009).
- [184] A. Dutta, G. Aeppli, B.K. Chakrabarti, U. Divakaran, T.F.Rosenbaum, D. Sen, *Quantum phase transitions in transverse field spin models: From statistical physics to quantum information* Cambridge Univ. Press, UK (2015).
- [185] J. Ginépro and T. C. Hull, J. Integer Seq. **17**, Art. 14.10.8 (2014).
- [186] R. J. Mathar, vixra:1511.0225 (2015).
- [187] E. H. Lieb, Phys. Rev. **162**, 162 (1967).