

---

# TRANSICIONES DE FASE CUÁNTICAS Y LA DISTINGUIBILIDAD DE ESTADOS CUÁNTICOS

---

Gabriel A. Della Bella

Director: Pedro W. Lamberti

TRABAJO ESPECIAL DE LICENCIATURA EN FÍSICA

FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA Y FÍSICA

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA, ARGENTINA

MAYO DE 2019



Transiciones de fase cuánticas y la distinguibilidad de estados cuánticos por Gabriel A. Della Bella se distribuye bajo una Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional.



# Resumen

Recientemente se ha demostrado la utilidad de la entropía de von Neumann como cuantificador de las correlaciones presentes en sistemas cuánticos multipartitos, por ejemplo, del grado de entrelazamiento entre estados bipartitos. A su vez la noción de entropía, tanto clásica como cuántica ha mostrado ser adecuada para caracterizar a las transiciones de fase inclusive a las conocidas como Transiciones de Fase Cuánticas (TFC). Usando estos antecedentes, nos proponemos en el presente trabajo describir a las transiciones de fase cuánticas por medio de distancias entre estados cuánticos, las cuales desde un punto de vista físico pueden tomarse como cuantificadores de la distinguibilidad de estados cuánticos. Una vez estudiada la relación entre ambos aspectos físicos (criticalidad y distinguibilidad), se aplicarán estos conceptos al análisis de algunos sistemas particulares.



# Abstract

Recently, the usefulness of von Neumann entropy as a quantifier of the correlations present in multipartite quantum systems has been demonstrated. For example the degree of entanglement between bipartite states has been evaluated by using that information quantifier. Also the notion of entropy, both classical and quantum, has shown its usefulness to characterize phase transitions including those known as Quantum Phase Transitions (QPT). Using this background, we propose in the present work to describe the quantum phase transitions by means of distances between quantum states, which from a physical point of view can be taken as quantifiers of the distinguishability of quantum states. Once the relationship between both physical aspects (criticality and distinguishability) has been studied, these concepts will be applied to the analysis of some particular systems.



# Índice general

<b>Resumen</b>	III
<b>Abstract</b>	V
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Transiciones de fase . . . . .	1
1.2. Transiciones de fase cuánticas . . . . .	2
<b>2. Medidas de distinguibilidad</b>	<b>7</b>
2.1. Introducción a noción de distinguibilidad . . . . .	7
2.2. Distancias cuánticas . . . . .	8
2.3. Fidelidad . . . . .	9
2.4. Distancia traza . . . . .	10
2.5. Divergencia de Jensen-Shannon . . . . .	10
<b>3. Sistema de estudio</b>	<b>14</b>
3.1. Cadena de spin . . . . .	14
3.2. Definición de los operadores . . . . .	15
3.3. Energía fundamental y estado fundamental . . . . .	17
<b>4. Resultados</b>	<b>21</b>
4.1. Fidelidad entre estados fundamentales . . . . .	21
4.2. Parámetro de escala de Jensen-Shannon . . . . .	26
<b>5. Conclusiones</b>	<b>29</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>31</b>



# 1

## Introducción

### 1.1. Transiciones de fase

En la naturaleza abundan las transiciones de fase (TF). Típicos ejemplos de estas son la solidificación y ebullición del agua, la transición entre paramagnetismo y ferromagnetismo o incluso entre conductividad y superconductividad. En 1933, Paul Ehrenfest, inspirado por el experimento sobre las TF del helio líquido realizado por W. H. Keesom, propone una clasificación basada en la discontinuidad de las derivadas de la energía libre [1]. Así, una TF de primer orden poseía una discontinuidad en la primera derivada de la energía libre y así sucesivamente. Sin embargo, en 1944 Onsager resolvió el modelo de Ising en dos dimensiones demostrando que la derivada de la energía libre tenía una divergencia logarítmica, algo que la clasificación de Ehrenfest no contemplaba. De esta forma, surgen dos clasificaciones simples pero suficientes para el desarrollo del modelo estudiado en este trabajo [2]:

- Transiciones de fase de primer orden: Están caracterizadas por una discontinuidad en la primera derivada de un potencial termodinámico (energía de Helmholtz o energía de Gibbs). En el ejemplo del agua, aparece una discontinuidad en el

volumen molar y la entropía. En estas TF es posible la coexistencia de fases.

- Transiciones de fase de segundo orden: También son llamadas “continuas” pues no sufren discontinuidades en la primera derivada de los potenciales termodinámicos. En cambio, es posible definir un “parámetro de orden”. Este parámetro es una cantidad que se anula en una fase pero no en la otra. El parámetro de orden varía continuamente de una fase a otra. A diferencia de las TF de primer orden, no es posible la coexistencia de las fases.

Las TF como las que ocurren entre fases sólidas, líquidas y gaseosas de las sustancias son ejemplos de Transiciones de Fase Clásicas, es decir, están dominadas por fluctuaciones térmicas: estas son desviaciones estadísticas (aleatorias) del estado “promedio” de un sistema en equilibrio. Estas fluctuaciones son proporcionales a la temperatura. Esto conlleva a que no hay fluctuaciones térmicas en el cero absoluto. Esto no significa que no puedan existir TF a  $T = 0K$ . En el cero absoluto el sistema está en su estado fundamental y la contribución de fenómenos cuánticos no es despreciable. Las fluctuaciones térmicas son reemplazadas por fluctuaciones cuánticas que tienen origen en el principio de incertidumbre de Heisenberg y en el efecto túnel [3].

## 1.2. Transiciones de fase cuánticas

Consideremos un hamiltoniano  $H(\mathbf{g})$  que depende de un número de parámetros adimensionales  $\mathbf{g}$  (estos parámetros podrían estar asociados con la presión sobre un sistema, con un campo magnético y/o eléctrico, etc) y cuyos únicos grados de libertad están en los sitios de una red. Para una red finita, la energía fundamental en función de  $\mathbf{g}$  será, en general, una función analítica. Un ejemplo sencillo es el hamiltoniano  $H(g) = \sigma_z + g\sigma_x$ , donde  $\sigma_i$  son las matrices de Pauli. La energía fundamental es  $\epsilon_0 = -\sqrt{g^2 + 1}$ . Sin embargo, pueden haber excepciones donde no será analítica. Si el hamiltoniano es de la forma  $H(g) = H_0 + gH_1$  y  $[H_0, H_1] = 0$  entonces aparece el denominado “cruce de niveles” o por su nombre en inglés: “level-crossing” (Figura 1.1(a)) donde un estado excitado se transforma en el estado fundamental para un valor  $g = g_c$  y la energía fundamental deja de ser analítica en ese punto. En el caso de una red con un número macroscópico de sitios, se produce un “cruce de niveles evitado” o “avoided level-crossing” (Figura 1.1(b)) que se transforma en un cruce de niveles cuando el número de sitios tiende a infinito, provocando nuevamente un punto de no analiticidad de

la energía fundamental en  $g = g_c$ .

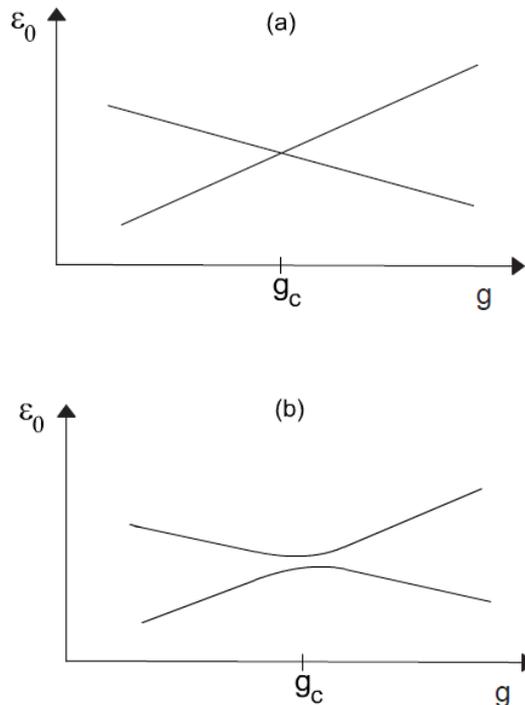


FIGURA 1.1: Gráfico de las energías fundamentales como función del parámetro  $g$ . En (a) se produce un “level-crossing”, es decir, la energía fundamental para  $g < g_c$  y  $g > g_c$  se cruzan produciendo un punto de no analiticidad de la energía fundamental. En (b) se produce un “avoided level-crossing” el cual se transforma en un “level-crossing” cuando el número de sitios tiende a infinito.

Las **Transiciones de Fase Cuánticas** (TFC) están caracterizadas por ocurrir a  $T = 0K$  en sistemas con infinitos grados de libertad y por tener un punto de no analiticidad de la energía fundamental como función de un cierto número de parámetros del hamiltoniano que describe al sistema. A  $T = 0K$  la entropía del sistema se anula y por lo tanto no puede existir un salto de la entropía en la transición. Es decir, no hay calor latente involucrado en el sistema para realizar la transición. Esto significa que bajo la definición de transiciones de fase que hemos dado, las TFC son transiciones de fase de segundo orden. A pesar de esto, realizar una TFC puede requerir energía. Por ejemplo, en un sistema que atraviese una TFC para un valor crítico de presión  $P_c$ , el estado fundamental de una fase puede ser mas denso que en la otra, provocando que se deba realizar trabajo sobre el material para comprimirlo (o deba el material realizar trabajo hacia el entorno cuando se expande). Un diagrama de fases característico de las

TFC puede verse en la Figura 1.2. Allí existe un punto crítico  $g_c$  para el cual se produce una TFC a  $T = 0K$ . A partir de ese punto se extiende una línea de transición (la línea punteada en la figura) alrededor de la cual es posible utilizar la teoría clásica de TF puesto que allí solo hay fluctuaciones térmicas. En la vecindad del punto crítico  $g = g_c$  para  $T > 0K$  existe una competencia entre fluctuaciones térmicas y cuánticas lo que da origen a la región cuántica crítica. Las fases I y II representan dos estados del sistema para  $g < g_c$  y  $g > g_c$ .

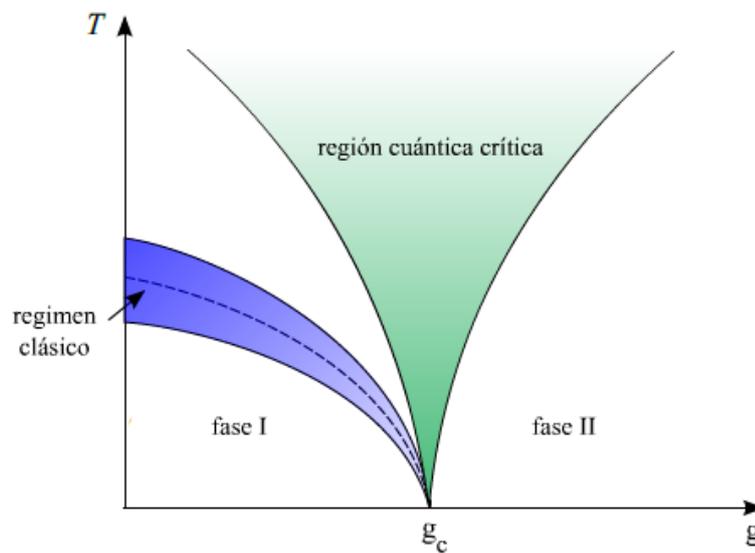


FIGURA 1.2: Diagrama de fases característico de las TFC. Se destacan cuatro regiones. El regimen clásico donde es posible utilizar la teoría clásica de TF, la región cuántica crítica donde hay competencia entre fluctuaciones térmicas y cuánticas y las fases I y II del sistema también llamadas fase ordenada y desordenada respectivamente.

Un ejemplo físico de TFC es la transición entre paramagnetismo y ferromagnetismo del  $\text{LiHoF}_4$  (fluoruro de litio-holmio) [4]. En 1996, Bitko. et. al. estudiaron las propiedades magnéticas de este material. En la molécula, los átomos de Holmio poseen un espín que puede orientarse en dos direcciones, lo cual permite estudiar al sistema mediante un hamiltoniano de Ising. A  $T = 0K$ , todos los espines se encuentran alineados y el material se comporta como un ferromagneto. Aplicándose un campo magnético transversal a la dirección de los espines, se midieron las propiedades magnéticas. Este campo magnético transversal produce tunelamiento entre los dos estados del átomo de Ho y sería el parámetro  $g$  de la teoría (salvo constantes). En el experimento, se descubrió que para intensidades de campo magnético mayores a un cierto valor crítico  $H_t$ ,

el ferromagnetismo desaparece y el  $\text{LiHoF}_4$  se comporta como un paramagneto (Figura 1.3).

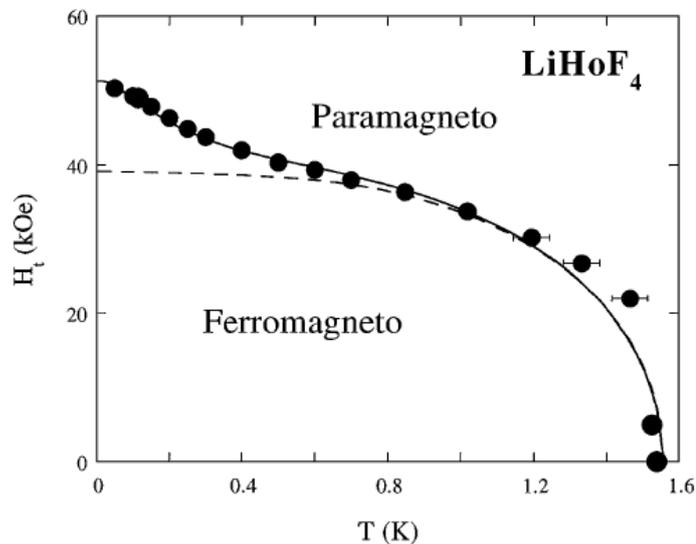


FIGURA 1.3: Diagrama de fases del  $\text{LiHoF}_4$ . Los puntos representan valores medidos. Para  $T = 0K$  existe un valor de campo magnético para el cual el orden ferromagnético se rompe y el material se comporta como un paramagneto.

La descripción de este tipo de fenómenos no puede realizarse con la teoría clásica de TF puesto que ocurren a  $T = 0K$ .

La teoría más utilizada para describir TFC es el llamado paradigma de Landau-Ginzburg-Wilson (LGW) cuya idea central puede resumirse en dos conceptos[13]:

- (a) El comportamiento de las TF de segundo orden pueden ser descritas utilizando teoría clásica y los efectos cuánticos pueden despreciarse.
- (b) Se introduce una cantidad llamada parámetro de orden que debe ser puesto en pie de igualdad con las demás cantidades termodinámicas y que asume valores distintos en cada fase de forma continua.

Para analizar a los sistemas finitos (típicamente cadenas de espines) a  $T = 0K$ , el paradigma LGW no resulta adecuado [5] [6]. Por ello, se recurre a métodos y nociones de la Teoría de Información Cuántica (TIC).

La distinguibilidad entre estados pertenecientes a distintas fases sugiere una conexión entre las medidas de distinguibilidad de la TIC y la teoría de TFC en cadenas de espines. Recientemente, la aplicación de TIC, principalmente conceptos como la fidelidad y

distancias cuánticas a sistemas sencillos que experimentan TFC ha resultado fructífera [5] [7] [8].

Si bien la fidelidad se anula en el límite termodinámico, es posible estudiar su comportamiento a medida que el número de grados de libertad tiende a infinito y a partir de allí deducir si existe una TFC. En los siguientes capítulos estableceremos el marco teórico de la TIC necesario y lo aplicaremos a un ejemplo específico de un sistema que pasa por una TFC.

# 2

## Medidas de distinguibilidad

### 2.1. Introducción a noción de distinguibilidad

El formalismo matemático de la Mecánica Cuántica (MC) tiene como objeto fundamental al vector de estado  $|\psi\rangle$ , el cual es un elemento de un espacio de Hilbert de dimensión finita o infinita. A pesar de su rol central, el vector de estado no es un observable físico (en el sentido de que no se puede medir) sino que solo puede inferirse a través de mediciones de cantidades físicas (observables) que sí pueden medirse. El hecho de que el vector de estado no sea observable sumado a la naturaleza estadística del formalismo, conduce al problema de distinguibilidad de dos estados cuánticos arbitrarios, digamos  $|\phi\rangle$  y  $|\psi\rangle$ . Solo podremos decir que los estados  $|\phi\rangle$  y  $|\psi\rangle$  son perfectamente distinguibles si ellos son ortogonales:  $\langle\phi|\psi\rangle = 0$  [9].

Una manera formal de encarar el problema de la distinguibilidad de estados cuánticos es por medio de la noción de distancias entre estados cuánticos. Dada la naturaleza estadística de la MC, la definición de distancias entre estados cuánticos esta íntimamente relacionada con la definición de distancias entre distribuciones de probabilidad. Antes de avanzar en la definición de distancias entre estados cuánticos, es importante

recordar que la descripción mas general de un estado cuántico es a través del operador densidad:

Si el sistema cuántico tiene asociado el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ , un operador densidad  $\rho$  es un operador que cumple:

1.  $\rho = \rho^\dagger$  (autoadjunto)
2. Si  $\{\lambda_i\}$  son autovalores de  $\rho \implies \lambda_i \geq 0 \forall i$  (definido semi positivo)
3.  $Tr(\rho) = 1$  donde Tr es la traza de un operador

La conexión entre la descripción que usa vectores de estado  $|\psi\rangle$  y la descripción vía matrices densidad es que esta última se expresa  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ . En estos casos diremos que  $\rho$  representa un estado puro; en caso contrario diremos que es un estado mezcla.

Hay una relación clara entre la noción de distinguibilidad de dos estados cuánticos y el concepto de información. Es claro que mas facilmente podremos distinguir dos objetos (por ejemplo dos animales) si mas información poseemos sobre ellos. En el contexto cuántico una medida de información la provee la entropía de von Neumann. Para un estado descrito por el operador densidad  $\rho$ , la entropía de von Neumann esta dada por

$$H_{vN}(\rho) = -Tr(\rho \log(\rho)) \equiv -\sum_i \lambda_i \log(\lambda_i) \quad (2.1)$$

Todos los logaritmos se tomarán en base 2 para que su unidad sea en bits y  $\lambda_i$  son los autovalores de  $\rho$ . Es importante notar que  $H_{vN}(\rho) = 0$  si y sólo si  $\rho$  representa a un estado puro. Si  $\rho$  evoluciona unitariamente,  $\rho \rightarrow \rho' = U\rho U^\dagger$ , entonces  $H_{vN}(\rho) = H_{vN}(\rho')$ . A continuación definiremos formalmente medidas de distancia entre estados cuánticos.

## 2.2. Distancias cuánticas

Cuando uno desea comparar estados cuánticos (por ejemplo, para saber si son distinguibles) es necesario recurrir a una medida de distancia. Consideremos dos estados cuánticos pertenecientes a un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ . Definir una distancia en este espacio significa crear una función  $d: \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$  que satisfaga las siguientes condiciones:

1.  $d(\psi, \phi) \geq 0$  con la igualdad si y sólo si  $\psi = \phi$

2.  $d(\psi, \phi) = d(\phi, \psi)$  (simetría)
3.  $d(\psi, \phi) + d(\phi, \gamma) \geq d(\psi, \gamma)$  (desigualdad triangular)

En el caso de que la distancia  $d$  verifique la condición (3) diremos que  $d$  es una métrica. Aunque estas son las condiciones básicas que se le pide a cualquier función distancia, en el contexto de la mecánica cuántica se pide al menos una condición adicional:

$$d(\psi, \phi) = d(U\psi, U\phi)$$

con  $U$  una matriz unitaria [10]. Esta propiedad es llamada “invariancia ante transformaciones unitarias” y refleja el hecho de que una distancia entre dos puntos no puede cambiar frente a una rotación global.

Estas distancias cuánticas intuitivamente nos permiten saber qué tanto se parecen dos estados o que tan distinguibles son (por eso es que a veces es las llaman medidas de distinguibilidad).

A pesar de que hemos dado la definición utilizando estados puros, es posible hacer una definición análoga utilizando estados mezcla (operadores densidad).

A continuación ilustraremos las medidas de distinguibilidad mas usadas.

## 2.3. Fidelidad

A pesar de que la Fidelidad no es una medida de distancia (no satisface la propiedad (3)) es una cantidad sumamente útil en la construcción de medidas que sí lo son. Dadas dos matrices densidad,  $\rho$  y  $\sigma$ , la fidelidad entre ellas se define como:

$$F(\rho, \sigma) = \text{Tr}(\sqrt{\sqrt{\rho}\sigma\sqrt{\rho}})$$

donde  $\sqrt{\rho}$  es un operador tal que  $(\sqrt{\rho})^2 = \rho$

Para estados puros, la fidelidad se reduce al “overlap” entre los estados:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

$$\sigma = |\phi\rangle\langle\phi|$$

$$F(\rho, \sigma) = |\langle\psi|\phi\rangle|$$

Como se dijo, a partir de la Fidelidad se pueden definir distancias entre operadores densidad. Por ejemplo, la distancia Bures entre  $\rho$  y  $\sigma$  esta dada por

$$D_B^2(\rho, \sigma) = 2(1 - F(\rho, \sigma))$$

Otra distancia asociada es el “ángulo cuántico”:

$$D_A(\rho, \sigma) = \arccos(F(\rho, \sigma))$$

Cuando  $\rho$  y  $\sigma$  son estados puros, la distancia ángulo es conocida como la distancia Wootters. Es fácil ver que en este caso se verifica la condición (3) (es decir, que es una métrica).

## 2.4. Distancia traza

La distancia traza entre dos operadores densidad  $\rho$  y  $\sigma$  es:

$$\delta(\rho, \sigma) = \frac{1}{2} \text{Tr}(|\rho - \sigma|)$$

donde  $|\rho - \sigma| = \sqrt{(\rho - \sigma)^\dagger(\rho - \sigma)}$ . Para estados puros  $|\psi\rangle$  y  $|\phi\rangle$  esta distancia se reduce a:

$$\delta(\psi, \phi) = \sqrt{1 - |\langle \psi | \phi \rangle|^2} = \sqrt{1 - F^2}$$

## 2.5. Divergencia de Jensen-Shannon

Una medida de operadores positivos (positive operator valued-measure o POVM) es un conjunto de operadores  $\{E_i\}_{i=1}^M$  hermitianos definidos positivos que satisfacen una relación de completitud:

$$\sum_{i=1}^M E_i = I \quad (2.2)$$

Estas medidas representan observables y son una generalización de las medidas proyectivas. Si se tiene una medida proyectiva  $\{M_i\}$  es posible construir una POVM definiendo  $E_i = M_i M_i^\dagger$ . La distribución de probabilidades asociada a medir una POVM sobre un estado mezcla  $\rho$  se calcula mediante la traza:

$$p_i = \text{Tr}(E_i \rho), i = 1, \dots, M$$

La relación de completitud (2.2) garantiza que la suma de las probabilidades  $p_i$  dé igual a la unidad.

Notar que si  $\rho$  es un estado puro ( $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ ) y la POVM se construye a partir de una medida proyectiva ( $E_i = M_i M_i^\dagger = |i\rangle\langle i|$ ) entonces la distribución de probabilidad se reduce a la forma conocida:

$$p_i = |\langle i|\psi\rangle|^2$$

La construcción de distribuciones de probabilidad a partir de mediciones POVM sobre estados mezcla sugiere recurrir a medidas de distancia entre distribuciones de probabilidad clásicas para luego extenderlas a medidas de distinguibilidad entre estados cuánticos.

La Divergencia de Jensen-Shannon (JSD) entre dos distribuciones de probabilidades discretas  $P = (p_1, \dots, p_N)$  y  $Q = (q_1, \dots, q_N)$  se define como:

$$D_{JS}(P, Q) = \frac{1}{2} \left[ S\left(P, \frac{P+Q}{2}\right) + S\left(Q, \frac{P+Q}{2}\right) \right] \quad (2.3)$$

donde  $S(P, Q)$  es la divergencia de Kullback-Leibler (también llamada entropía relativa):

$$S(P, Q) = \sum_{i=1}^N p_i \log\left(\frac{p_i}{q_i}\right)$$

La JSD puede ser escrita también en términos de la entropía de Shannon:

$$H(P) = - \sum_{i=1}^N p_i \log(p_i)$$

$$D_{JS}(P, Q) = H\left(\frac{P+Q}{2}\right) - \frac{1}{2}H(P) - \frac{1}{2}H(Q)$$

La JSD posee algunas propiedades interesantes:

- $D_{JS}(P, Q)$  es simétrica y bien definida
- Esta acotada:  $0 \leq D_{JS}(P, Q) \leq 1$
- $(D_{JS}(P, Q))^\alpha$ ,  $\alpha \in (0, 1/2]$  satisface la desigualdad triangular. En particular,  $d_{JS} := \sqrt{D_{JS}}$  ( $D_{JS}$  no la satisface).

Como mencionamos anteriormente, es posible definir una distancia entre estados cuánticos vía la distancia entre sus distribuciones de probabilidad asociadas ante una medición POVM. De esta forma, si consideramos estados mezcla  $\rho$  y  $\sigma$  y  $\{E_i\}$  una POVM:

$$p_i = \text{Tr}(E_i \rho)$$

$$q_i = \text{Tr}(E_i \sigma)$$

son las distribuciones de probabilidad  $P$  y  $Q$  respectivamente. Ahora podemos utilizar la JSD clásica para distinguir entre los estados. Una pregunta que surge es qué medida POVM utilizamos para calcular JSD. Puesto que la distancia entre los estados cuánticos no puede depender de la POVM que elijamos, definimos una nueva divergencia de Jensen-Shannon (la llamamos  $J_{SD1}$ ) tomando el supremo sobre todos los posibles POVM:

$$J_{SD1}(\rho, \sigma) = \sup_{E_i} D_{JS}(P, Q) \quad (2.4)$$

Físicamente,  $J_{SD1}$  da la mejor distinguibilidad posible entre  $\rho$  y  $\sigma$  usando POVM.

La divergencia de Jensen-Shannon cuántica  $D_{JS}(\rho, \sigma)$  se define análogamente a su versión clásica:

$$D_{JS}(\rho, \sigma) = \frac{1}{2} (S(\rho \parallel \frac{\rho + \sigma}{2}) + S(\sigma \parallel \frac{\rho + \sigma}{2}))$$

donde  $S$  es la divergencia de Kullback-Leibler cuántica, también conocida como entropía relativa:

$$S(\rho \parallel \sigma) = - \sum_i \lambda_i \log\left(\frac{\omega_i}{\lambda_i}\right)$$

con

$$\rho = \sum_{i=1}^n \lambda_i |i\rangle\langle i|$$

$$\sigma = \sum_{i=1}^n \omega_i |i\rangle\langle i|$$

Es importante aclarar que la entropía relativa  $S(\rho \parallel \sigma)$  no siempre esta bien definida. Por ejemplo no lo está si  $\sigma = |\phi\rangle\langle\phi|$  es un estado puro pues se anula el argumento del logaritmo.

En el caso de estados puros  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  y  $\sigma = |\phi\rangle\langle\phi|$  la Jensen-Shannon se transforma en:

$$D_{JS}(\rho, \sigma) = -\left(\frac{1-F}{2}\right) \log\left(\frac{1-F}{2}\right) - \left(\frac{1+F}{2}\right) \log\left(\frac{1+F}{2}\right) \quad (2.5)$$

con  $F$  la fidelidad entre los estados  $|\psi\rangle$  y  $|\phi\rangle$

La JSD cuántica y la definida a través de distribuciones de probabilidad no son equivalentes; sin embargo, se satisface la siguiente relación entre ellas:

$$D_{JS}(\rho, \sigma) \geq D_{JS1}(\rho, \sigma)$$

# 3

## Sistema de estudio

### 3.1. Cadena de spin

Como hemos expresado anteriormente el propósito de este trabajo es describir las TFC por medio de conceptos y métodos de la TI. Nuestro método de análisis será aplicado a un sistema en particular el cual es descrito a continuación.

Los sistemas mas estudiados en los que ocurre una TFC son las cadenas de spin[5]. Estas consisten en arreglos o redes donde en cada sitio se encuentra una partícula de spin  $S$ . Estos spines pueden interactuar entre sí y además con un campo magnético externo. Si bien las cadenas de spin pueden existir en tres dimensiones, debido a su dificultad de resolución nos limitaremos a tratar con cadenas unidimensionales. En una dimensión, la cadena de spin mas estudiada es la representada por el hamiltoniano de Heisenberg XY con partículas de spin  $\frac{1}{2}$  e interacción de primeros vecinos (Figura 3.1).

Denotemos por  $\sigma_i^k$  a la matriz de Pauli  $k$  de la partícula en la posición  $i$  de la cadena. El hamiltoniano de Heisenberg XY de  $N$  partículas adopta la forma:

$$H = J \sum_{i=1}^N (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \quad (3.1)$$

con:

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}, \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

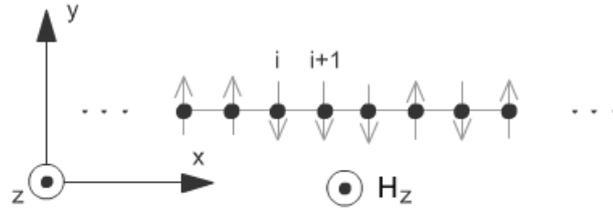


FIGURA 3.1: Esquema de la cadena de spines con interacción a primeros vecinos en  $x$  e  $y$  y en presencia de un campo magnético externo  $H_z$  luego asociado al parámetro  $h$ .

aquí  $J$  es una constante de acoplamiento que determina si hay interacción antiferromagnética ( $J > 0$ ) o ferromagnética ( $J < 0$ ) y  $h$  es un parámetro asociado a la intensidad de campo magnético. Hemos orientado por simplicidad el campo magnético en la dirección  $z$ .

Tomaremos un número macroscópico  $N$  de partículas y por lo tanto las condiciones de contorno del sistema no son de importancia física y pueden ser elegidas a conveniencia matemática. Por eso, consideraremos condiciones de borde periódicas ( $\sigma_{i+N} = \sigma_i \forall i$ ).

Para poder resolver el espectro del hamiltoniano (3.1), P. Jordan y E. Wigner en 1928 [11] desarrollaron un método. El mismo consiste en reescribir el hamiltoniano en términos de operadores fermiónicos, es decir, operadores de creación y aniquilación similares a los del oscilador armónico cuántico pero que satisfacen relaciones de anti-conmutación.

## 3.2. Definición de los operadores

Las matrices de Pauli satisfacen relaciones de conmutación ( $[A, B] = AB - BA$ ):

$$[\sigma_i^a, \sigma_j^b] = i\delta_{ij}\sigma_i^c$$

con  $a, b, c$  permutaciones cíclicas de  $x, y, z$ .

Definimos operadores de creación y aniquilación:

$$a_i^\dagger = \sigma_i^x + i\sigma_i^y$$

$$a_i = \sigma_i^x - i\sigma_i^y$$

De esta forma las matrices de Pauli quedan reescritas en términos de estos operadores:

$$\begin{aligned}\sigma_i^x &= \frac{1}{2}(a_i^\dagger + a_i) \\ \sigma_i^y &= -\frac{1}{2}i(a_i^\dagger - a_i) \\ \sigma_i^z &= -i(\sigma_i^x \sigma_i^y - \sigma_i^y \sigma_i^x)\end{aligned}$$

Y el hamiltoniano (3.1) resulta:

$$H = \frac{J}{2} \sum_i^N (a_i a_{i+1}^\dagger + a_{i+1} a_i^\dagger) - h \sum_i^N (a_i^\dagger a_i + a_i a_i^\dagger) \quad (3.2)$$

Estos operadores satisfacen relaciones de anticonmutación ( $\{A, B\} = AB + BA$ ) correspondientes al mismo sitio de la cadena:

$$\begin{aligned}\{a_i, a_i^\dagger\} &= I \\ \{a_i, a_i\} &= \{a_i^\dagger, a_i^\dagger\} = 0\end{aligned}$$

pero no las satisfacen entre distintos sitios.

Jordan y Wigner introdujeron operadores  $c_i$  y  $c_i^\dagger$  dados por:

$$c_i := e^{i\pi \sum_{j=1}^{i-1} a_j^\dagger a_j} a_i \quad (\text{a})$$

y consecuentemente:

$$c_i^\dagger = a_i^\dagger e^{-i\pi \sum_{j=1}^{i-1} a_j^\dagger a_j} \quad (\text{b})$$

Estos operadores satisfacen una relación de anticonmutación y las relaciones (a) y (b) se conocen como la “Transformada de Wigner-Jordan”. Es posible invertir estos operadores:

$$\begin{aligned}a_i &= e^{-i\pi \sum_{j=1}^{i-1} c_j^\dagger c_j} c_i \\ a_i^\dagger &= c_i^\dagger e^{i\pi \sum_{j=1}^{i-1} c_j^\dagger c_j}\end{aligned}$$

y con un poco de álgebra llegar a las identidades:

$$\begin{aligned} a_j^\dagger a_j &= c_j^\dagger c_j \\ a_i a_{i+1}^\dagger &= c_i e^{i\pi c_i^\dagger c_i} c_{i+1}^\dagger = c_i (1 - 2c_i^\dagger c_i) c_{i+1}^\dagger = c_{i+1}^\dagger c_i \end{aligned}$$

Por lo tanto, el hamiltoniano (3.2) puede ser reescrito en términos de estos operadores fermiónicos

$$H = \frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (c_{i+1}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+1}) - h \sum_{i=1}^N (c_i^\dagger c_i + c_i c_i^\dagger) + \frac{J}{2} (c_1^\dagger c_N + c_N^\dagger c_1) (e^{i\pi \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j}) \quad (3.3)$$

en donde hemos usado las condiciones de borde periódicas.

El último término está asociado a la condición de borde y contribuye en orden  $\mathcal{O}(\frac{1}{N})$  [12] y por lo tanto no es importante en el límite termodinámico.

El hamiltoniano original (3.1) tiene como cantidad conservada al spin total en la dirección  $z$ . Es decir,  $[H, \sigma^z] = 0$ . Esta conservación también se manifiesta en el nuevo hamiltoniano fermiónico a través de la conservación del número total de fermiones  $\mathcal{N} = \sum_{i=1}^N c_i^\dagger c_i$ .

Llamemos  $H_c$  a los términos del hamiltoniano que no están asociados a las condiciones de borde. Es posible reescribir  $H_c$  mediante una matriz  $A$  definida de la siguiente forma:

$$A_{ij} := \frac{J}{2} (\delta_{i,j+1} + \delta_{j,i+1}) - h \delta_{ij}$$

Entonces,

$$H = \sum_{i,j} c_i^\dagger A_{ij} c_j \quad (3.4)$$

### 3.3. Energía fundamental y estado fundamental

La matriz  $A$  resulta ser tridiagonal (Figura 3.2). Sea  $\{\phi_k\}$  y  $\{\Lambda_k\}$  los autovectores y autovalores de  $A$  respectivamente. De esta forma hemos reducido el problema del hamiltoniano de Heisenberg XY a encontrar la relación de dispersión de una cadena lineal homogénea con interacción a primeros vecinos  $J/2$  y energías de sitio  $-h$  y condiciones de borde periódicas. Utilizando el método de “tight-binding”, es posible obtener las autoenergías y autoestados de  $A$ :

$$\phi_{m,n} = \phi_{m,0} e^{ik_m n}, n = 1, 2, \dots, N \quad (3.5)$$

$$\phi_{m,N} = \phi_{m,0} \quad (3.6)$$

La condición de borde periódica (3.6) impone condiciones sobre  $k$ :

$$ikN = 2\pi m, m \in \mathbb{Z}$$

$$k_m = 2\pi \frac{m}{N}, -N/2 \leq m < N/2$$

y luego de normalizar los autovectores, estos resultan:

$$\phi_{m,n} = \frac{e^{ik_m n}}{\sqrt{N}} \quad (3.7)$$

Para el cálculo de los autovalores, planteamos la ecuación de autovalores:

$$A\vec{\phi} = \Lambda\vec{\phi}$$

y luego haciendo uso de la ecuación (3.7) se obtiene:

$$\left(\frac{J}{2}e^{ik_m} + (-h - \Lambda) + \frac{J}{2}e^{-ik_m}\right)\frac{1}{\sqrt{N}} = 0$$

$$\Lambda_m = J\cos(k_m) - h \quad (3.8)$$

$$A = \begin{bmatrix} \dots & 0 & \frac{J}{2} & -h & \frac{J}{2} & 0 & \dots \\ & \dots & 0 & \frac{J}{2} & -h & \frac{J}{2} & 0 & \dots \\ & & \dots & 0 & \frac{J}{2} & -h & \frac{J}{2} & 0 & \dots \end{bmatrix}$$

FIGURA 3.2: Representación de la matriz  $A$ . Es una matriz tridiagonal  $N \times N$ , en la diagonal tiene  $-h$  y en las diagonales superior e inferior tiene  $\frac{J}{2}$ . El resto de los elementos de la matriz vale 0.

Ahora, definiendo nuevos operadores:

$$\eta_m = \sum_n \phi_{m,n} c_n$$

$$\eta_m^\dagger = \sum_n \phi_{m,n}^* c_n^\dagger$$

es posible reexpresar el hamiltoniano  $H_c$  en la forma:

$$H_c = \sum_m \Lambda_m \eta_m^\dagger \eta_m \quad (3.9)$$

La ecuación (3.8) nos dice que  $\Lambda_m$  puede ser negativo. Para simplificar aún mas el hamiltoniano (3.9), se definen los operadores:

$$\xi_m = \eta_m, \Lambda_m \geq 0$$

$$\xi_m = \eta_m^\dagger, \Lambda_m < 0$$

y el hamiltoniano (3.9) adopta la forma final:

$$H_c = \sum_m |\Lambda_m| (\xi_m^\dagger \xi_m - \frac{1}{2}) \quad (3.10)$$

Los  $\xi_m$  y  $\xi_m^\dagger$  representan operadores fermiónicos que actúan destruyendo y creando excitaciones respectivamente [14]. Llamemos  $|0\rangle_m$  al estado de vacío del modo  $m$ , es decir que satisface  $\xi_m |0\rangle_m = 0$ .

El estado fundamental  $|\psi_0\rangle$  satisface una igualdad análoga pero para todo modo  $m$ :

$$\xi_m |\psi_0\rangle = 0, \forall m$$

Es posible ver que el estado fundamental  $|\psi_0\rangle$  puede ser escrito en términos de los estados de vacío:

$$|\psi_0\rangle = \prod_m (\cos(\frac{\theta_m}{2}) - i \sin(\frac{\theta_m}{2}) \xi_m^\dagger \xi_{-m}^\dagger) |0\rangle_m |0\rangle_{-m} \quad (3.11)$$

donde  $|0\rangle_m |0\rangle_{-m} = |0\rangle_m \otimes |0\rangle_{-m}$  y  $\theta_m$  esta definido a través de su coseno:

$$\cos(\theta_m) = \frac{\cos(2\pi \frac{m}{N}) - h}{\Lambda_m} \quad (3.12)$$

Cabe destacar que el estado fundamental es un estado puro puesto que estamos a temperatura  $T = 0K$ . Para temperaturas no nulas, es necesario recurrir a la matriz densidad estadística:  $\rho = e^{-\beta H} / \mathcal{Z}$

En resumen, hemos resuelto el hamiltoniano (3.1) (es decir, hemos encontrado las autoenergías y autoestados) transformando el problema de spines  $\frac{1}{2}$  interactuando en  $x$  e  $y$  bajo un campo magnético externo orientado en  $z$  en un problema de fermiones

interactuantes mas fácil de resolver. Ahora que conocemos el estado fundamental del sistema, podemos aplicar la TIC para estudiar el comportamiento de estos estados como función de los parámetros del hamiltoniano (3.1).

Es de notar que las cadenas de spines como la analizada en este capítulo es de los sistemas mas simples que atraviesan una TFC [3]. La aplicación de la transformada de Wigner-Jordan a cadenas de spines en dos y tres dimensiones es posible pero considerablemente mas ardua que la presentada aquí [16] [15].

# 4

## Resultados

### 4.1. Fidelidad entre estados fundamentales

La ecuación (3.12) vale también cuando en el hamiltoniano (3.1) se introduce un factor de anisotropía  $\gamma$ , es decir:

$$H_{an} = J \sum_{i=1}^N \left( \left( \frac{1+\gamma}{2} \right) \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \left( \frac{1-\gamma}{2} \right) \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \right) + h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z$$

En el caso analizado, el factor de anisotropía es nulo.

Consideremos dos estados fundamentales del hamiltoniano (3.10) pertenecientes a distintos valores del parámetro  $h$  (que se encuentra en los autovalores  $\Lambda_m$ ), digamos,  $|\psi_0(h)\rangle$  y  $|\psi_0(h')\rangle$ . Llamaremos  $\theta_m$  y  $\theta'_m$  a los ángulos definidos con  $h$  y  $h'$  respectivamente.

La fidelidad entre estos dos estados es función del producto interno entre esos estados (pues son estados puros). Desarrollemos este producto interno:

$$\langle \psi_0(h) | \psi_0(h') \rangle = \prod_k \langle 0 |_k \langle 0 |_{-k} \left( \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \xi_{-k} \xi_k \right) \prod_m \left( \cos\left(\frac{\theta'_m}{2}\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{\theta'_m}{2}\right) \xi_m^\dagger \xi_{-m}^\dagger \right) |0\rangle_m |0\rangle_{-m}$$

$$\langle \psi_0(h) | \psi_0(h') \rangle = \prod_{k,m} (A_{k,m} + B_{k,m} + C_{k,m} + D_{k,m}) \quad (4.1)$$

donde hemos definido:

$$A_{k,m} = \cos\left(\frac{\theta'_m}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \langle 0|_k \langle 0|_{-k} |0\rangle_m |0\rangle_{-m}$$

$$B_{k,m} = -i \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \text{sen}\left(\frac{\theta'_m}{2}\right) \langle 0|_k \langle 0|_{-k} |1\rangle_m |1\rangle_{-m}$$

$$C_{k,m} = i \text{sen}\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta'_m}{2}\right) \langle 0|_k \langle 0|_{-k} \xi_k \xi_{-k} |0\rangle_m |0\rangle_{-m}$$

$$D_{k,m} = \text{sen}\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \text{sen}\left(\frac{\theta'_m}{2}\right) \langle 0|_k \langle 0|_{-k} \xi_k \xi_{-k} |1\rangle_m |1\rangle_{-m}$$

y utilizado que  $\xi_k^\dagger |0\rangle_k = |1\rangle_k$

Sabiendo que  $\xi_k |0\rangle_m = 0$  y  $\xi_k |1\rangle_m = \delta_{k,m} |0\rangle_m$  concluimos que

$$B_{k,m} = C_{k,m} = 0$$

$$A_{k,m} = \cos\left(\frac{\theta'_m}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \delta_{k,m} \delta_{-k,-m}$$

$$D_{k,m} = \text{sen}\left(\frac{\theta'_m}{2}\right) \text{sen}\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \delta_{k,m} \delta_{-k,-m}$$

Con esto la ecuación (4.1) se reduce a:

$$\prod_k \left( \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta'_k}{2}\right) + \text{sen}\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \text{sen}\left(\frac{\theta'_k}{2}\right) \right)$$

por lo tanto, el producto interno resulta:

$$\langle \psi_0(h) | \psi_0(h') \rangle = \prod_k \cos\left(\frac{\theta_k - \theta'_k}{2}\right)$$

Recurriendo a la definición de fidelidad dada en el capítulo 2 en términos del producto interno u overlap:

$$F(h, h') = \left| \prod_{k=1}^{N/2} \cos\left(\frac{\theta_k - \theta'_k}{2}\right) \right| \quad (4.2)$$

En el caso en que el factor de anisotropía  $\gamma = 0$ ,  $\cos(\theta_k) = \text{sgn}(\cos(\frac{2\pi k}{N}) - h)$  donde  $\text{sgn}(x)$  es la función signo.

Podemos entonces distinguir dos casos:

$$h < \cos(\frac{2\pi k}{N}) \implies \cos(\theta_k) = 1 \implies \theta_k = 2\pi l, l \in \mathbb{Z}$$

$$h > \cos(\frac{2\pi k}{N}) \implies \cos(\theta_k) = -1 \implies \theta_k = (2l + 1)\pi, l \in \mathbb{Z}$$

La fidelidad (4.2) puede reescribirse:

$$F(h, h') = \left| \prod_{k=1}^{N/2} (\cos(\frac{\theta_k}{2})\cos(\frac{\theta'_k}{2}) + \text{sen}(\frac{\theta_k}{2})\text{sen}(\frac{\theta'_k}{2})) \right|$$

Analizamos caso por caso:

- $h, h' > 1$ : entonces  $\cos(\frac{\theta_k}{2}) = 0$  y  $\text{sen}(\frac{\theta_k}{2})\text{sen}(\frac{\theta'_k}{2}) = 1 \implies F(h, h') = 1$
- $h' > 1, h < 1$ : entonces  $\text{sen}(\frac{\theta_k}{2}) = 0$  y  $\cos(\frac{\theta'_k}{2}) = 0 \implies F(h, h') = 0$
- $h > 1, h' < 1$ : es análogo al caso anterior y resulta  $F(h, h') = 0$
- $h, h' < 1$ : entonces  $\cos(\frac{\theta_k}{2}) = 0$  y  $\cos(\frac{\theta_k}{2})\cos(\frac{\theta'_k}{2}) = 1 \implies F(h, h') = 0$  a menos que  $h = h'$  o  $h < \cos(\frac{2\pi k}{N}) < h'$  en cuyo caso  $F(h, h') = 1$ .

Notemos también que como  $\cos(\frac{\theta_k - \theta'_k}{2}) < 1$  (para  $\theta_k \neq \theta'_k$ ), la fidelidad decae rápidamente como función del número de sitios  $N$ .

Como mencionamos en la introducción, la fidelidad se anula en el límite termodinámico pero es posible definir un “parámetro de escala”  $\epsilon$  que nos da información sobre como cambia la fidelidad con el número de sitios de la cadena [18]:

$$\log(\epsilon(h, h')) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log(F(h, h'))}{N}$$

Es decir que la fidelidad se comporta como una potencia del parámetro de escala:

$$F(h, h') \sim \epsilon^N \tag{4.3}$$

Hemos visto que la fidelidad como función de  $h$  y  $h'$  para la cadena estudiada en el capítulo 3 vale 0 ó 1 dependiendo la región en la que uno se encuentre. Esto significa que  $\epsilon$  también valdrá 0 ó 1 en las mismas regiones. En la Figura (4.1) se encuentra un

gráfico del parámetro de escala como función de  $h$  y  $h'$ . Es de notar que a medida que el número de sitios tiende a infinito, las regiones donde  $\epsilon = 1$  van transformándose en una línea crítica para  $h = h'$ . Esta línea se identifica con un estado de la cadena llamada “líquido de Luttinger”[5]. Los líquidos de Luttinger son líquidos de Fermi unidimensionales, es decir, es un conjunto de fermiones interactuantes [17] (llamado líquido en contraposición con el gas de Fermi el cual esta constituido por fermiones libres).

En  $h = h' = 1$  ocurre un punto de no analiticidad o “punto de cruce” (“pinch point” por su nombre en inglés).

Este punto de no analiticidad en la fidelidad se corresponde con un punto de no analiticidad de la energía pues:

$$H |\psi_0(h)\rangle = E(h) |\psi_0(h)\rangle$$

$$\langle \psi_0(h') | H |\psi_0(h)\rangle = E(h) \langle \psi_0(h) | \psi_0(h') \rangle$$

$$E(h) = \frac{H_{h,h'}}{F(h, h')}$$

donde hemos llamado  $H_{h,h'} = \langle \psi_0(h') | H |\psi_0(h)\rangle$ . Derivando esta expresión se obtiene:

$$\frac{\partial E(h)}{\partial h} = \frac{\frac{\partial H_{h,h'}}{\partial h} F - \frac{\partial F}{\partial h} H_{h,h'}}{F(h, h')^2}$$

Por lo tanto podemos afirmar que un punto de no analiticidad de la derivada de la fidelidad implica un punto de no analiticidad de la derivada de la energía en  $h = h' = 1$ . Esto nos dice que  $h = h' = 1$  es un punto crítico de la TFC.

Un caso interesante es el de la cadena con parámetro de anisotropía  $\gamma = 1$ . Las autoenergías de esa cadena tienen la forma:

$$\Lambda_k = \sqrt{(\cos(\frac{2\pi k}{N}) - h)^2 + \gamma^2 \text{sen}(\frac{2\pi k}{N})}$$

En este caso, la fidelidad toma valores en el rango  $[0, 1]$ . El parámetro de escala se comporta en función de la fidelidad como  $\epsilon \sim F^{(1/N)}$ . En la figura 4.2 se encuentra un gráfico de  $\epsilon$  como función de  $h$  y  $h'$ . Además en la figura 4.3 se incluye corte de la superficie sobre la línea  $h' = -h + 2$  donde se observa mejor la singularidad. Notemos que ahora la línea crítica desaparece y solo queda un punto singular en  $h = h' = 1$ . Este punto nuevamente indica una TFC para  $h = 1$ .

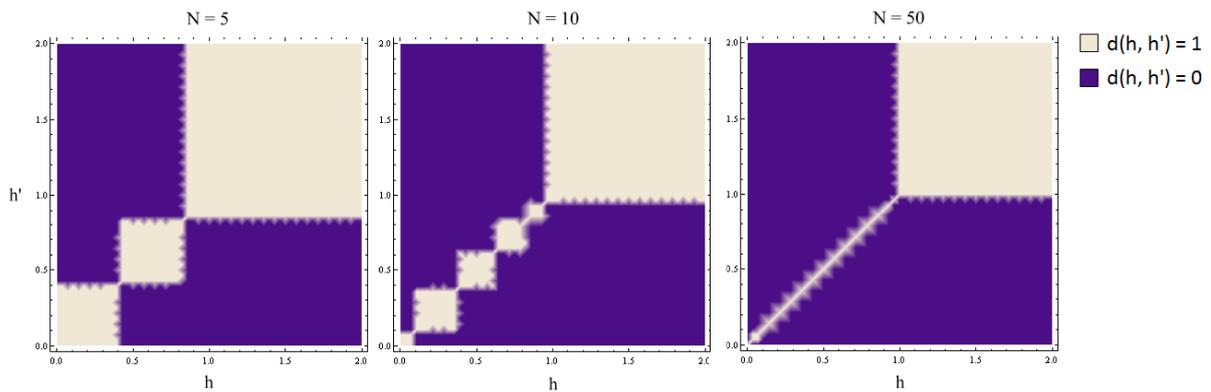


FIGURA 4.1:  $d(h, h')$  en función de  $h, h'$  para tres valores de  $N$ . A medida que crece  $N$ , aparece una línea crítica, una línea de no analiticidad de  $d$  que se conecta con la región donde  $d = 1$  en el punto  $h = h' = 1$ .

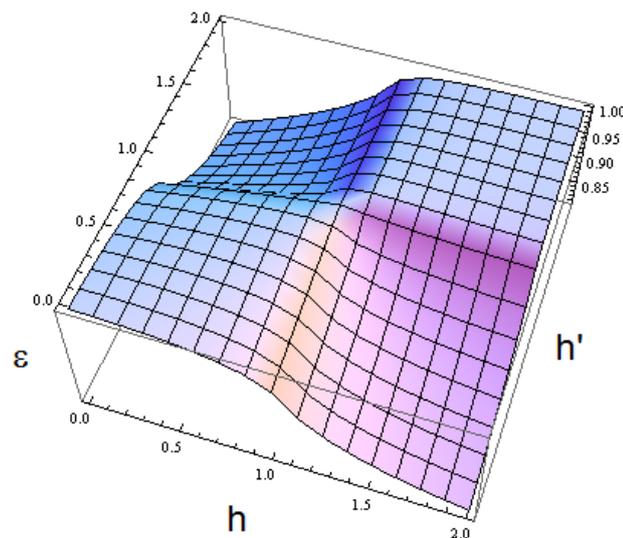


FIGURA 4.2: Gráfico de  $\epsilon(h, h')$  para  $N = 1000$ . Se observa que para el punto  $h = h' = 1$  aparece un punto singular que se asocia a una TFC para  $h = 1$ .

Como hemos visto, el parámetro de escala de la fidelidad  $\epsilon$  puede utilizarse para encontrar puntos en donde ocurren TFC, sin embargo es posible utilizar otras medidas de distinguibilidad siempre que el parámetro de escala sea cuidadosamente elegido. Es decir, el parámetro de escala de la fidelidad tiene la forma  $\epsilon \sim F^{(1/N)}$  puesto que la fidelidad se comporta según la ecuación (4.3).

Para construir un parámetro de escala asociado a otra medida de distinguibilidad es necesario estudiar cómo esa medida se comporta en función del número de sitios  $N$ . Si

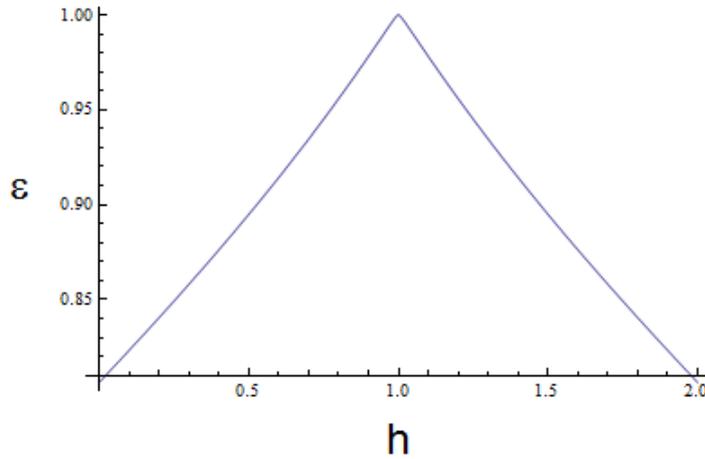


FIGURA 4.3: Gráfico de  $\epsilon(h, -h + 2)$  para  $N = 1000$ . Esta es corresponde a una línea que pasa por el punto  $h = h' = 1$  por lo que se observa mejor este punto singular.

esta nueva medida de distinguibilidad esta en función de la fidelidad, el problema se reduce a invertir la ecuación, es decir, expresar a la fidelidad como función de la medida de distinguibilidad.

A continuación construiremos un parámetro de escala asociado a la Jensen-Shannon.

## 4.2. Parámetro de escala de Jensen-Shannon

La ecuación (2.5) no puede ser invertida analíticamente, por lo tanto se debe hacer alguna aproximación. Como la fidelidad tiende a 0 en el límite termodinámico (excepto para  $F = 1$ ) haremos una expansión en serie de Taylor alrededor de  $F = 0$  hasta segundo orden. Esto resulta en la ecuación:

$$JS = 1 - \frac{F^2}{2\ln(2)}$$

invirtiendo:

$$F = \sqrt{2\ln(2)(1 - JS)}$$

y por lo tanto el parámetro de escala en función de Jensen-Shannon resulta:

$$\epsilon_{JS} = (\sqrt{2\ln(2)(1 - JS)})^{1/N}$$

Este parámetro  $\epsilon_{JS}$  presenta el mismo punto singular que el parámetro en función de la fidelidad (ver Figura 4.4 y 4.5). Las diferencias de escala y comportamiento lejos del punto crítico entre los gráficos de los parámetros  $\epsilon$  y  $\epsilon_{JS}$  es debido a la aproximación introducida. Si se pudiera invertir exactamente la Fidelidad como función de Jensen-Shannon, los gráficos deberían ser idénticos (puesto que se trata de una reexpresión de las variables).

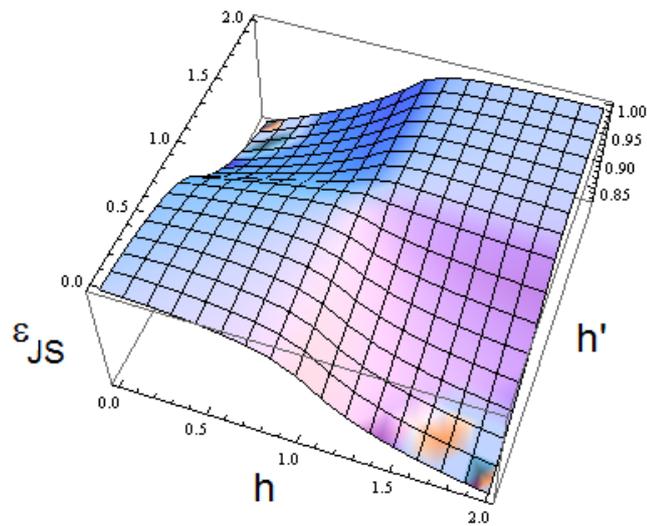


FIGURA 4.4: Gráfico de  $\epsilon_{JS}(h, h')$  para  $N = 200$ . Se observa que para el punto  $h = h' = 1$  aparece un punto singular de la misma forma que para el parámetro de escala de la fidelidad. Lejos del punto crítico pueden verse ciertos “artefactos” o errores que aparecen con una coloración distinta al resto. Esto es debido a que hemos hecho una aproximación de la fidelidad a orden cuadrático. Si se pudiera invertir analíticamente, se vería idéntico al gráfico 4.2

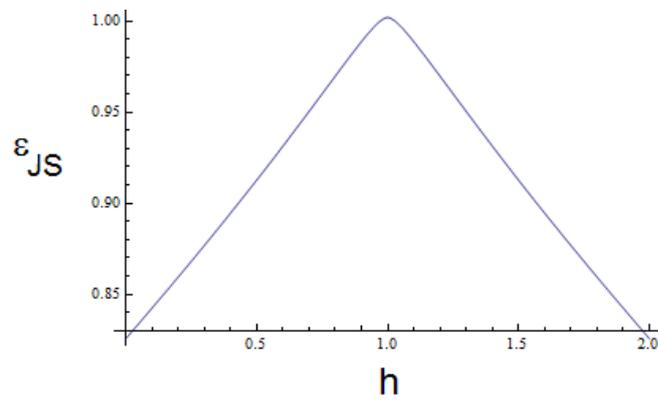


FIGURA 4.5: Gráfico de  $\epsilon_{JS}(h, -h + 2)$  para  $N = 200$ . Esta es corresponde a una línea que pasa por el punto  $h = h' = 1$  por lo que se observa mejor este punto singular.

# 5

## Conclusiones

Como hemos visto, la TIC demuestra ser útil en la caracterización de las TFC. En particular, aquellas que ocurren en cadenas de spin en una dimensión en presencia de un campo magnético externo e interacción primeros vecinos. La fidelidad juega un rol central en esta caracterización puesto que el parámetro de escala sobre el cual se analizan los puntos críticos se define en términos de la fidelidad por sitio. Este parámetro de escala presenta puntos singulares en los puntos críticos de la transición y se convierte por lo tanto en un método para probar la existencia de TFC en cadenas lineales de spin. El parámetro de escala puede ser definido no solamente via la fidelidad sino también en términos de otras medidas de distinguibilidad que puedan ser escritas en términos de la fidelidad. De esta forma, si en un problema específico la fidelidad resultara difícil de obtener directamente, se puede recurrir a la distancia de Bures, la divergencia de Jensen-Shannon, la distancia traza, etc. y construir nuevos parámetros de escala. En particular hemos visto que la expresión de la fidelidad en términos de la divergencia de Jensen-Shannon nos permitió obtener un parámetro de escala de Jensen-Shannon  $\epsilon_{JS}$  que presenta también un punto singular en el punto crítico. La divergencia de Jensen-Shannon posee una serie de ventajas sobre la fidelidad, algunas mencionadas en el Capítulo 2 e incluso sobre otras medidas de distinguibilidad como ser que ha sido estu-

diada exhaustivamente y sus propiedades son bien conocidas.

Los resultados presentados en este trabajo abren la posibilidad de estudiar el comportamiento de estos parámetros de escala (tanto de la fidelidad como de Jensen-Shannon) en sistemas mas complejos como cadenas de spines con interacción en tres componentes, o cadenas en dos dimensiones. La dificultad para resolver estos problemas analíticamente, sobre todo en dos dimensiones, aumenta la complejidad al problema de caracterizar las TFC, sin embargo, la visión de la información cuántica sugiere que los mismos razonamientos pueden ser aplicados.

# Bibliografía

- [1] G. Jaeger, *The Ehrenfest Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution*. Springer-Verlag (1998).
- [2] H. B. Callen, *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics (2<sup>o</sup> edición)*. Wiley (1985).
- [3] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press (1998).
- [4] D. Bitko, *Quantum Critical Behavior for a Model Magnet*. Physical Review Letters 77(5) 940-943 (1998).
- [5] H. Q. Zhou, *Fidelity and quantum phase transitions*. Journal of Physics A 41 412001 (2008).
- [6] D. Bitko, *Quantum Phase Transitions in Matrix Product Systems*. Phy. Rev. Let. 97, 110403 (2006).
- [7] P. Zanardi, *Ground state overlap and quantum phase transitions*. Phy. Rev. E 74, 031123 (2006).
- [8] Shi-Jian Gu, *Fidelity approach to quantum phase transitions*. arXiv:0811.3127v1 (2008).
- [9] M. Nielsen, *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press (2000).
- [10] P. W. Lamberti, A. Majtey, *Metric character of the quantum Jensen-Shannon divergence*. arXiv:0801.1586v2 (2008).
- [11] P. Jordan, E. Wigner, *Über das Paulische Äquivalenzverbot*. E. Z. Physik. 47: 631 (1928).

- 
- [12] M. Metlitski, *The XY Model in one dimension*. UBC Physics & Astronomy (2004).
- [13] S. Sachdev, *Quantum phase transitions*. Yale University (2004).
- [14] M. Nielsen, *The Fermionic canonical commutation relations and the Jordan-Wigner transform*. School of Physical Sciences, The University of Queensland, Brisbane, Queensland 4072, Australia (2005).
- [15] B. Bock, M. Azzouz *Generalization of the Jordan-Wigner transformation in three dimensions and its application to the Heisenberg bilayer antiferromagnet*. Phys. Rev. B 64, 054410 (2001).
- [16] O. Derzhko, *Jordan–Wigner fermionization for spin–1/2 systems in two dimensions: A brief review*. arXiv:cond-mat/0101188 (2001).
- [17] L. Landau, *The Theory of a Fermi Liquid*. SOVIET PHYSICS JETP VOLUME 3, NUMBER 6 (1957).
- [18] M. Rams, B Damski *Quantum fidelity in the thermodynamic limit*. arXiv:1010.1048 (2011).