



Universidad  
Zaragoza



Facultad de Ciencias  
Universidad Zaragoza

TRABAJO DE FIN DE GRADO EN FÍSICA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

---

# Modelos cuánticos de muy largo alcance: solución general y su aplicación a cadenas de Ising

---

## Quantum strong long-range models: general solution and its application to Ising chains

---

Víctor Herráiz López

Tutores:

Juan Román Roche

David Zueco Láinez

Junio de 2023



*Gracias a mi familia,  
por su constante apoyo a lo largo de estos años.*

*Gracias también a Juan y David,  
por abrirme una ventana al mundo de la investigación  
y conseguir que disfrute en el proceso.*



# Índice

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>Objetivos y estructura de la memoria</b>	<b>2</b>
<b>1. Sistemas cuánticos con interacciones de largo alcance</b>	<b>3</b>
1.1. Caso clásico con $\alpha = 0$ . . . . .	4
<b>2. Óptica cuántica: el modelo de Dicke</b>	<b>5</b>
2.1. Resolución <i>à la</i> Wang . . . . .	6
2.2. Obtención de una teoría efectiva para la materia . . . . .	7
2.3. Modelos de Dicke generalizados . . . . .	8
<b>3. Resolución de modelos cuánticos de muy largo alcance</b>	<b>8</b>
3.1. Inversión de la teoría efectiva . . . . .	9
3.2. ¿Qué tipo de interacciones se pueden resolver? . . . . .	10
<b>4. Modelo de Ising en campo longitudinal y transversal</b>	<b>11</b>
4.1. Cálculo de magnetizaciones y susceptibilidades . . . . .	13
4.2. La teoría de campo medio es exacta en modelos de muy largo alcance . . . . .	14
<b>5. Cadena de Ising ferromagnética</b>	<b>15</b>
5.1. Estudio del diagrama de fases . . . . .	16
5.2. Susceptibilidades . . . . .	17
<b>6. Cadena de Ising antiferromagnética</b>	<b>19</b>
6.1. Estudio del caso antihomogéneo . . . . .	21
6.2. Estudio de la línea crítica con la Teoría de Landau . . . . .	23
<b>7. Conclusiones y trabajo futuro</b>	<b>24</b>
<b>Referencias</b>	<b>25</b>
<b>A. Método de Laplace para aproximar integrales</b>	<b>27</b>
<b>B. Introduciendo interacciones de corto alcance en <math>H_m</math></b>	<b>28</b>
<b>C. Matrices circulantes simétricas</b>	<b>29</b>
<b>D. Propiedades de la matriz de interacción</b>	<b>31</b>
<b>E. La corrección de segundo orden del método de Laplace es despreciable</b>	<b>33</b>
<b>F. Homogeneidad en el modelo de Ising ferromagnético</b>	<b>33</b>
<b>G. Antihomogeneidad en el modelo de Ising antiferromagnético</b>	<b>35</b>
<b>H. Cadenas de Ising en el límite <math>\beta \rightarrow \infty</math></b>	<b>36</b>

I. Relación entre cadenas de Ising antiferromagnéticas y ferromagnéticas	37
J. Teoría de Landau en el diagrama de fases antiferromagnético	37

# Introducción

La física de la materia condensada centra su estudio en las propiedades y fenomenología que surgen en las llamadas fases condensadas de la materia. Aborda fenómenos colectivos como el magnetismo, la superconductividad y las transiciones de fase, que surgen de las interacciones entre un gran número de partículas y no pueden ser explicadas atendiendo únicamente a sus propiedades individuales.

Es en este contexto en el que el estudio de los sistemas cuánticos de múltiples Cuerpos (*quantum many-body systems*) ha resultado ser un pilar fundamental para la comprensión del comportamiento, tanto a nivel microscópico como macroscópico, de la materia. Mediante el análisis de sistemas formados por un gran número de partículas interactuantes, como electrones en sólidos, se busca explicar la fenomenología observada en los sistemas de materia condensada. En este campo confluyen ramas de la física como la mecánica cuántica y la física estadística, como podrá comprobarse a lo largo del trabajo. La investigación en este ámbito, además de expandir los límites de la física fundamental, tiene gran interés tecnológico, dando lugar, por ejemplo, a la nanoelectrónica y la computación cuántica.

En general los problemas estudiados son difíciles de resolver por involucrar un gran número de grados de libertad. Existen algunos sistemas exactamente resolubles de forma analítica, como la cadena de Ising en campo transversal con interacciones a primeros vecinos; pero una gran cantidad de los modelos estudiados no lo son, como el modelo ZZYZ, en que se añade un campo longitudinal a la cadena de Ising en campo transversal. Para atacar estas dificultades se han ido desarrollando a lo largo de los años una gran cantidad de técnicas analíticas (como la transformación de Jordan-Wigner que resuelve el modelo de Ising en campo transversal), variacionales y numéricas. Un método que destaca por su sencillez y capacidad de capturar los rasgos más importantes del comportamiento de múltiples sistemas es la teoría de campo medio, donde las interacciones entre partículas se sustituyen por la interacción con un campo efectivo.

Históricamente los esfuerzos en el campo se han centrado en el estudio de sistemas con interacciones de corto alcance por su mayor sencillez, si bien en los últimos años ha crecido el interés por los sistemas con interacciones de largo alcance, donde la intensidad de las mismas disminuye como una potencia de la distancia entre los cuerpos,  $r^{-\alpha}$ . A priori su estudio es más complicado porque presentan dificultades como un decaimiento de las correlaciones más lento, lo que los hace menos apropiados para enfoques numéricos. Sin embargo para  $\alpha = 0$ , debido a que todos los cuerpos interactúan con la misma intensidad (*all-to-all* en inglés), se espera que la teoría de campo medio resulte una técnica exacta.

En el trabajo se va a presentar un nuevo método de resolución analítico, exacto en el límite termodinámico, para sistemas con interacciones de largo alcance en los que  $\alpha < d$ , donde  $d$  es la dimensión del sistema. Se demostrará además que la teoría de campo medio es una técnica exacta en estos sistemas. De esta forma se probará la existencia de una nueva familia de sistemas exactamente resolubles.

Parte de los resultados presentados en la memoria han sido recientemente recogidos por el autor y sus tutores en un artículo científico que ha sido subido como *preprint* al arXiv y enviado para revisión a una revista [1].

## Objetivos y estructura de la memoria

Este Trabajo de Fin de Grado tiene dos grandes objetivos. Por una parte presentar una nueva técnica analítica que permite resolver en el formalismo canónico modelos cuánticos con interacciones de largo alcance en las que  $\alpha < d$ . Por otra parte, para mostrar su aplicabilidad, estudiar el modelo de Ising cuántico con interacciones de largo alcance, tanto ferromagnéticas como antiferromagnéticas.

Para alcanzar estos objetivos primero se presentan los sistemas interactuantes de largo alcance, cómo se clasifican usualmente en la literatura y algunos de sus resultados y características, esquematizando la resolución de modelos clásicos cuando  $\alpha < d$ .

Con intención de generalizar esta técnica, ya que no se puede hacer de manera directa por las restricciones que impone el formalismo de la Mecánica Cuántica, se tiene que estudiar primero el modelo de Dicke. Este modelo, que describe materia interactuando con luz cuántica, tiene dos características muy importantes para el desarrollo del trabajo: es exactamente resoluble y admite una teoría efectiva donde no aparecen los grados de libertad de la luz.

Llegado este punto se dispone de todos los ingredientes para desarrollar la técnica que permite resolver modelos cuánticos con interacciones de largo alcance con  $\alpha < d$ . Tras presentar el resultado principal, una expresión analítica para la función de partición canónica de estos modelos, se ejemplifica su aplicabilidad estudiando el modelo de Ising cuántico con interacciones de largo alcance. Su estudio permite mostrar algunas de las características de los sistemas con interacciones de largo alcance, así como profundizar en el análisis de modelos que no han sido apenas tratados en la literatura.

La memoria se estructura de la siguiente manera. En la sección 1 se presentan los modelos de largo alcance y algunos de sus resultados. La sección 2 se dedica al modelo de Dicke, paradigmático en óptica cuántica. En la sección 3 se muestra cómo aplicar los resultados de este modelo para resolver interacciones de largo alcance en que  $\alpha < d$ , ejemplificando en la sección 4 con modelos de Ising en campo longitudinal y transversal. Las secciones 5 y 6 se dedican al análisis de la cadena de Ising particularizando las interacciones a ferromagnéticas y antiferromagnéticas respectivamente. Por último en la sección 7 se presentan las conclusiones del trabajo y las líneas de investigación que deja abiertas. Al final del documento se incluyen una serie de apéndices donde se recogen de forma extendida algunas demostraciones y técnicas empleadas a lo largo del texto principal.



# 1. Sistemas cuánticos con interacciones de largo alcance

Se entiende frecuentemente como sistemas de largo alcance (tanto en física clásica como en cuántica) a aquellos en los que la interacción entre dos cuerpos decae con la distancia de forma potencial y suficientemente lento, en el sentido que posteriormente se precisará. Algunos ejemplos son las interacciones de Van-der-Waals, la de Coulomb y la gravitatoria [2].

El interés en su estudio para sistemas cuánticos se ha visto renovado por avances experimentales en distintos campos como la óptica cuántica y la simulación de sistemas cuánticos, donde a menudo surgen interacciones de largo alcance ajustables [3]. Es por ello que se requiere la comprensión de este tipo de interacciones, mucho menos estudiadas que sus análogas de corto alcance. Se pueden encontrar en la literatura algunos estudios numéricos de estos sistemas [4]. Sin embargo, el objetivo de este trabajo es hacer avances analíticos en el campo. De forma general se van a considerar hamiltonianos en redes de  $N$  sitios del tipo

$$H = H_m - \sum_{i,j=1}^N J_{ij} C_i C_j, \quad (1.1)$$

donde  $H_m$  es un hamiltoniano exactamente resoluble que no contiene interacciones de largo alcance,  $C_i$  es un operador hermítico que actúa en el sitio  $i$  y  $J_{ij} = \Gamma \tilde{J}(\mathbf{r}_{ij}) / \tilde{N}$  es la matriz que define las interacciones, con

$$\tilde{J}(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} b & \text{si } \mathbf{r}_{ij} = 0 \\ |\mathbf{r}_{ij}|^{-\alpha} & \text{si } \mathbf{r}_{ij} \neq 0 \end{cases}. \quad (1.2)$$

La constante  $\Gamma$  define la intensidad de la interacción y  $\tilde{N} = \sum_i \tilde{J}_{ij}$  es el factor de Kac. Para el cálculo de la distancia se emplearán condiciones de contorno periódicas con la convención de la imagen más próxima, de forma que existe simetría traslacional y la suma de la definición de  $\tilde{N}$  no depende de  $j$ . El parámetro  $b$  se puede emplear para desplazar el espectro de  $J$ , en secciones posteriores se concretará cómo fijar su valor.

La fenomenología que surge en estos modelos se puede entender clasificándolos en función del valor de  $\alpha$  [5]. Para  $\alpha < d$ , siendo  $d$  la dimensión del sistema, las interacciones decaen lo suficientemente despacio para que se rompa la extensividad y aditividad de los modelos. La pérdida de extensividad se debe a que la parte interactuante del hamiltoniano contiene  $N^2$  términos que decaen lentamente, por lo que la suma crecerá más rápido que lineal con  $N$ . La introducción del factor de Kac (que diverge cuando  $\alpha < d$ ) recupera la extensividad en estos casos, haciendo que tengan un límite termodinámico bien definido [2]. La no aditividad significa que la energía de interacción entre los subsistemas que forman el sistema completo no es despreciable en el límite termodinámico, como sí que sucede siempre en sistemas de corto alcance debido a que la frontera entre subsistemas resulta una parte despreciable del sistema total.

A este régimen se le denomina de “muy largo alcance” (*strong long-range regime* en inglés), y presenta una serie de peculiaridades como no ergodicidad y posible inequivalencia de formalismos (*ensemble inequivalence*), que da cuenta de la aparición de diferencias cualitativas en el diagrama de fases empleando diferentes descripciones estadísticas.

Dentro del régimen de  $\alpha > d$  se pueden diferenciar dos subregímenes. Existe un  $\alpha_*$  tal que si  $\alpha > \alpha_*$  los exponentes críticos de los modelos coinciden con los de primeros vecinos,  $\alpha \rightarrow \infty$ , por lo que los sistemas son esencialmente de corto alcance (*short-range regime* en inglés). Para

$d < \alpha < \alpha_*$  se tiene el régimen de (no muy) largo alcance (*weak long-range regime*) en el que las interacciones de largo alcance juegan un papel relevante pero se mantiene la aditividad. Para  $\alpha > d$ ,  $\tilde{N}$  tiende a un valor constante en el límite termodinámico, por lo que su inclusión supone únicamente un reescalado de la intensidad de interacción.

La clasificación según el rango de las interacciones se esquematiza en la Fig. 1. El resto del trabajo centra su estudio en sistemas de muy largo alcance,  $\alpha < d$ , para los cuales se proporcionará una solución analítica en el formalismo canónico.

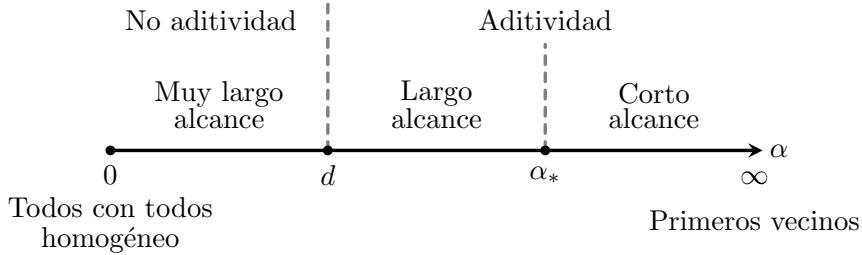


Figura 1: Esquema de la clasificación de las interacciones de largo alcance, válido para sistemas clásicos y cuánticos [2, 5]. Los resultados de secciones posteriores proporcionan una solución analítica de los sistemas de muy largo alcance en el formalismo canónico.

### 1.1. Caso clásico con $\alpha = 0$

Se va a dedicar este apartado a calcular la función de partición canónica de un sistema clásico con  $\alpha = 0$ . En el resto del trabajo se generalizará la técnica al caso cuántico con  $\alpha < d$ .

Se considera un sistema de espines clásicos,  $s_i = \pm 1$ , con interacciones de muy largo alcance dadas por  $\alpha = 0$ . Es el caso paradigmático de los sistemas de muy largo alcance, donde las interacciones son de todos con todos con la misma intensidad. Nótese que  $\tilde{N}(\alpha = 0) = N$ . Empleando la expresión del hamiltoniano de Ising clásico

$$H = -\Omega \sum_{i=1}^N s_i - \frac{\Gamma}{N} \sum_{i,j=1}^N s_i s_j, \quad (1.3)$$

se observa claramente la necesidad del factor  $1/N$  para que el límite termodinámico esté bien definido, ya que el número de términos de interacción escala con  $N^2$ . La parte no interactuante corresponde a un campo magnético homogéneo,  $\Omega$ , acoplado a los espines. Para  $\Gamma > 0$  se tendrán interacciones ferromagnéticas entre espines (que tenderán a estar alineados), mientras que si  $\Gamma < 0$  las interacciones serán antiferromagnéticas. Definiendo el espín total,  $S = \sum_i s_i$ , la función de partición se puede calcular como

$$Z = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \exp\left(\frac{\beta\Gamma}{N} S^2 + \beta\Omega S\right). \quad (1.4)$$

Para su cálculo se va a emplear una transformación de Hubbard-Stratonovich (THS), que es una identidad de las integrales gaussianas

$$\exp\left\{-\frac{a}{2}x^2\right\} = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2a}y^2 - ixy\right\} dy. \quad (1.5)$$

De esta forma el término cuadrático en  $S$  de la Ec. (1.4) puede transformarse en un término lineal a costa de introducir un campo real,  $u$ , sobre el que se realiza una integral. Resulta equivalente

a un conjunto de espines clásicos que no interactúan entre ellos pero sí con un campo clásico. La función de partición se puede calcular como

$$Z \propto \int_{-\infty}^{+\infty} du \exp \{N\phi(u)\} , \quad (1.6)$$

$$\phi(u) = -\beta\Gamma u^2 + \ln [2 \cosh (\beta\Omega + 2\beta\Gamma u)] . \quad (1.7)$$

Para evaluar la integral en el límite termodinámico, debido a la dependencia explícita con  $N$  en el exponente, se puede emplear el método de Laplace [6]. Este método para aproximar integrales permite calcularla determinando el máximo global de la función  $\phi(u)$ , y resulta exacto en el límite termodinámico. Se basa en que la exponencial magnifica el efecto del máximo global, por lo que se puede aproximar la integral para  $N$  suficientemente grande como una integral gaussiana centrada en ese máximo. En el apéndice A se recoge una breve explicación del método.

Generalizando el método que se acaba de explicar, Alessandro Campa y colaboradores [7] consiguen resolver modelos clásicos de muy largo alcance, cuando  $\alpha < d$ . Las siguientes secciones se dedican a extender esta técnica al caso cuántico. La extensión no es trivial debido a que la THS se basa en separar el argumento de una exponencial, lo que viene impedido en el caso cuántico por la no conmutación de los operadores. Para ello se empleará la equivalencia de determinados modelos de óptica cuántica (materia interactuando con luz cuántica) con modelos de materia interactuante a largo alcance. Como se verá más adelante, esta equivalencia juega el papel de la THS para sistemas clásicos. La analogía entre ambos casos será evidente más adelante, encontrando expresiones para el caso cuántico muy similares a las mostradas en este apartado.

## 2. Óptica cuántica: el modelo de Dicke

Dicke presentó en 1954 un modelo para describir la emisión coherente de  $N$  átomos preparados en un estado excitado. Encontró que, si los átomos están atrapados en una distancia menor a la longitud de onda de la luz emitida, los fotones que se emiten son indistinguibles. Esto da lugar a una densidad de energía proporcional a  $N^2$ . En 1973 Hepp y Lieb estudiaron el modelo de Dicke en equilibrio térmico. Encontraron que en el límite termodinámico existe una transición de segundo orden a una fase donde la cavidad esta poblada de forma macroscópica [8].

En su forma más simple, el modelo considera los átomos como sistemas de dos niveles que no interactúan entre sí pero están acoplados a una cavidad electromagnética monomodo. El hamiltoniano que lo describe es

$$H_D = \omega a^\dagger a - \sum_{j=1}^N \left( \frac{\varepsilon}{2} \sigma_j^z + \frac{\lambda}{\sqrt{N}} (a + a^\dagger) \sigma_j^x \right) , \quad (2.1)$$

donde  $\omega$  es la frecuencia de la cavidad,  $\varepsilon$  es la diferencia de energía entre los niveles del átomo,  $a^\dagger$  y  $a$  son los operadores de creación y destrucción de bosones de la cavidad,  $[a, a^\dagger] = 1$ ,  $\sigma_j^z$  son las matrices de Pauli y  $\lambda$  proporciona la intensidad del acoplo entre los átomos y el modo electromagnético de la cavidad. El factor  $1/\sqrt{N}$  se introduce para asegurar la extensividad del modelo, haciendo que tenga un límite termodinámico bien definido. Este límite se toma haciendo  $N \rightarrow \infty$ , pero de forma que la densidad de átomos en el interior de la cavidad,  $\rho = N/V$ , permanezca constante. El modelo se ha esquematizado en la Fig. 2.

Este modelo satisface dos características importantes para el desarrollo del trabajo: es exactamente resoluble y admite una teoría efectiva donde los grados de libertad de la luz no intervienen, siendo sustituidos por una serie de interacciones efectivas entre los grados de libertad de la materia.

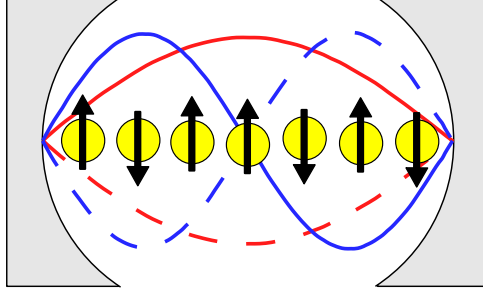


Figura 2: Esquema de un modelo de Dicke. Por completitud la cavidad se ha dibujado multimodo, ya que posteriormente resultará necesaria la generalización.

## 2.1. Resolución à la Wang

El artículo de Hepp y Lieb fue rápidamente reformulado por Wang y Hioe [9], demostrando la existencia de la transición de fase con un enfoque menos matemático. Es de esta forma en que se va a resolver el modelo, calculando su función de partición canónica

$$Z = \text{Tr} \left( e^{-\beta H_D} \right) . \quad (2.2)$$

Para calcular la traza sobre la luz van a emplearse los estados coherentes del campo bosónico, que son los autoestados del operador destrucción  $a|z\rangle = z|z\rangle$   $z \in \mathbb{C}$ , y la base de autoestados de  $\sigma_j^z$ . De esta forma, denotando  $d^2z = d\text{Re}(z)d\text{Im}(z)$ ,

$$Z = \int \frac{d^2z}{\pi} \sum_{s_i=\pm 1} \langle z | \langle s_1 \dots s_N | e^{-\beta H_D} | s_1 \dots s_N \rangle | z \rangle , \quad (2.3)$$

que en el límite termodinámico puede calcularse como [9]

$$Z = \int \frac{d^2z}{\pi} \left( \sum_{s_i=\pm 1} \langle s_1 \dots s_N | e^{-\beta \langle z | H_D | z \rangle} | s_1 \dots s_N \rangle \right) , \quad (2.4)$$

$$\langle z | H_D | z \rangle = \omega |z|^2 - \sum_{j=1}^N \left( \frac{\varepsilon}{2} \sigma_j^z + \frac{\lambda}{\sqrt{N}} (z + z^*) \sigma_j^x \right) . \quad (2.5)$$

Separando  $z = x + iy$  en su parte real e imaginaria, y empleando que la traza sobre los espines factoriza, se obtiene

$$Z = \int \frac{dx dy}{\pi} e^{-\beta \omega (x^2 + y^2)} \left( \prod_{j=1}^N \text{Tr} \left( e^{-\beta H_j(x)} \right) \right) , \quad (2.6)$$

$$H_j(x) = -\frac{\varepsilon}{2} \sigma_j^z - \frac{2\lambda x}{\sqrt{N}} \sigma_j^x . \quad (2.7)$$

Escribiendo el operador en forma matricial es directo encontrar sus autovalores por tratarse de una matriz de dimensión 2. De esa forma puede calcularse la traza

$$\text{Tr} \left( e^{-\beta H_j(x)} \right) = 2 \cosh \left( \frac{-\beta \varepsilon}{2} \sqrt{1 + 4\lambda^2 x^2 / N \varepsilon^2} \right), \quad (2.8)$$

que es independiente de  $j$  por considerar acoplos homogéneos entre la cavidad y los átomos. Evaluando dos integrales puede obtenerse la función de partición

$$Z = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \{-\beta y^2\} dy \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\beta x^2 + N \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{-\beta \varepsilon}{2} \sqrt{1 + 4\lambda^2 x^2 / N \varepsilon^2} \right) \right] \right\} dx. \quad (2.9)$$

La primera es una integral gaussiana, y para la segunda se introduce un cambio de variable,  $u = x/\sqrt{N}$ , resultando

$$Z = \sqrt{\frac{N}{\beta \pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \{N \phi(u)\} du, \quad (2.10)$$

$$\phi(u) = -\beta u^2 + \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{-\beta \varepsilon}{2} \sqrt{1 + 4\lambda^2 u^2 / \varepsilon^2} \right) \right]. \quad (2.11)$$

En el límite  $N \rightarrow \infty$  se puede emplear el método de Laplace debido a la dependencia explícita con  $N$  en el exponente del integrando. De esta forma calcular la función de partición se reduce a buscar el máximo absoluto de la función  $\phi(u)$ . La posición del máximo dependerá de los valores de los parámetros, dando lugar a una transición de fase de segundo orden, donde el parámetro de orden cambia de forma continua [8, 9].

## 2.2. Obtención de una teoría efectiva para la materia

El modelo de Dicke admite una representación en la que no aparecen de forma explícita los grados de libertad de la cavidad electromagnética y las interacciones de la materia con la cavidad son sustituidas por interacciones efectivas entre los grados de libertad de la materia [10]. Se quiere obtener un hamiltoniano que dependa únicamente de los grados de libertad de materia,  $H_{\text{ef}}$ , de forma que se pueda escribir

$$Z = \text{Tr} \left( e^{-\beta H_{\text{D}}} \right) = \text{Tr}_{\text{m}} \left( e^{-\beta H_{\text{ef}}} \right). \quad (2.12)$$

Donde  $\text{Tr}_{\text{m}}$  representa la traza sobre únicamente los grados de libertad de la materia.

Partiendo de la Ec. (2.4) se toma primero la traza sobre los grados de libertad de la luz. Completando cuadrados en la Ec. (2.5) se puede escribir

$$\langle z | H_{\text{D}} | z \rangle = \omega y^2 + \omega \left( x - \frac{\lambda}{\omega \sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \right)^2 - \frac{\varepsilon}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^z - \frac{\lambda^2}{\omega N} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \right)^2, \quad (2.13)$$

resultando la traza sobre los grados de libertad de la luz en dos integrales gaussianas, separando las exponenciales debido a que el hamiltoniano de la materia conmuta con los operadores de acoplo en el límite termodinámico. Evaluando las integrales se obtiene

$$Z = \frac{1}{\pi \beta \omega} \sum_{s_i = \pm 1} \langle s_1 \dots s_N | \exp \left\{ -\beta \left[ -\frac{\varepsilon}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^z - \frac{\lambda^2}{\omega N} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \right)^2 \right] \right\} | s_1 \dots s_N \rangle, \quad (2.14)$$

que permite obtener el hamiltoniano efectivo (2.12). Obviando las constantes aditivas

$$H_{\text{ef}} = -\frac{\varepsilon}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^z - \frac{\lambda^2}{\omega N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i^x \sigma_j^x. \quad (2.15)$$

A costa de excluir los grados de libertad de la luz del problema se necesitan incluir interacciones efectivas entre los grados de libertad de la materia. Nótese que se ha obtenido la versión cuántica del hamiltoniano (1.3).

### 2.3. Modelos de Dicke generalizados

Las secciones anteriores pueden generalizarse considerando una cavidad con  $M$  modos de frecuencias  $\omega_k$ . El acoplamiento puede depender del modo de la cavidad y el grado de libertad de la materia considerado,  $\lambda_{ik}$ , como surge de manera natural en una situación como la de la Fig. 2. El hamiltoniano que describe el modelo es

$$H_D = H_m + \sum_{k=0}^{M-1} \omega_k a_k^\dagger a_k - \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{i=1}^N (a_k + a_k^\dagger) \frac{\lambda_{ik}}{\sqrt{N}} C_i, \quad (2.16)$$

donde  $[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}$  son los operadores creación-destrucción de cada modo de la cavidad,  $H_m$  es un hamiltoniano general de los grados de libertad de la materia y  $C_i$  es un operador hermítico que se encarga de acoplar la materia con los modos de la cavidad.

La teoría efectiva se obtiene de forma análoga a como se ha obtenido para la cavidad monomodo (2.15), resultando

$$H_{\text{ef}} = H_m - \sum_{i,j=1}^N \left( \sum_{k=0}^{M-1} \frac{\lambda_{ik} \lambda_{jk}}{N \omega_k} \right) C_i C_j. \quad (2.17)$$

Escrito de esta forma se aprecia la relación con los sistemas de materia interactuantes a largo alcance, hamiltoniano (1.1). De esta forma un modelo de Dicke generalizado puede describirse como un sistema de materia con interacciones adicionales entre sus grados de libertad dadas por

$$J_{ij} = \sum_{k=0}^{M-1} \frac{\lambda_{ik} \lambda_{jk}}{N \omega_k}. \quad (2.18)$$

La estructura de modos de la cavidad determinará las interacciones efectivas entre los grados de libertad de la materia.

La relación entre ambos tipos de modelos puede interpretarse en ambos sentidos, tal como se esquematiza en la Fig. 3, y es exacta en el límite termodinámico.

## 3. Resolución de modelos cuánticos de muy largo alcance

Empleando la relación entre modelos de Dicke generalizados y de materia interactuante puede idearse un método que permita resolver estos últimos. Considérese primero como caso particular el hamiltoniano (2.15), que representa  $N$  espines interactuantes con  $\alpha = 0$  a los que se les aplica un campo magnético en una dirección perpendicular a la de interacción. Mediante la teoría efectiva se demuestra que es equivalente al modelo de Dicke monomodo de la Ec. (2.1), que se

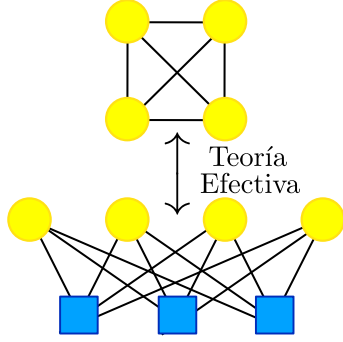


Figura 3: Esquema de la relación entre modelos de Dicke generalizados y de materia interactuante a largo alcance. Los puntos amarillos representan grados de libertad de materia, y los cuadrados azules los modos de la cavidad. Esquematiza los hamiltonianos (1.1) y (2.16), y la relación que existe entre ellos a través de la Ec. (2.17).

puede resolver en el formalismo canónico *à la* Wang. De esta forma se encuentra la función de partición del hamiltoniano original (2.15) analíticamente.

En el caso clásico [7] los modelos de materia interactuantes se resuelven empleando la THS, que permite sustituir las interacciones entre los grados de libertad por interacciones efectivas con un campo clásico. En el caso cuántico la equivalencia entre modelos de Dicke y de materia interactuante permite reemplazar las interacciones de manera análoga, empleando la equivalencia entre modelos como una “THS generalizada”.

Nótese que en la resolución del modelo de Dicke resulta necesario emplear el método de Laplace, igual que al aplicar la THS para resolver el modelo clásico. De hecho, comparando las ecuaciones (1.7) y (2.11) se observa que las funciones a maximizar son muy similares. La diferencia entre ambas se entiende al considerar que en el caso cuántico el campo magnético se aplica en una dirección perpendicular a la de interacción.

### 3.1. Inversión de la teoría efectiva

El procedimiento esquematizado puede generalizarse partiendo de un modelo de materia interactuante a largo alcance cualquiera (1.1), buscando el modelo de Dicke generalizado (2.16) que le corresponde por la teoría efectiva (2.17). Partiendo de  $H = H_m - \sum_{i,j} J_{ij} C_i C_j$  se diagonaliza la matriz de interacciones, escribiendo

$$J_{ij} = \sum_{p=0}^{N-1} \Lambda_{ip} D_p \Lambda_{jp} . \quad (3.1)$$

La matriz  $J$  será invertible por ser simétrica, sus autovalores,  $D_p$ , serán reales y la matriz de autovectores será ortogonal,  $\Lambda^{-1} = \Lambda^T$ . Suponiendo que la matriz tiene  $M$  autovalores no nulos, cuestión que se abordará en la siguiente sección, se define para ellos  $\omega_p = 1/D_p$ . Denotando  $\lambda_{ip} = \sqrt{N} \Lambda_{ip}$  se puede escribir la Ec. (3.1) de forma idéntica a las interacciones efectivas que generan los modos de un modelo de Dicke (2.18).

A un modelo de materia interactuante a largo alcance se le asocia pues un modelo de Dicke donde la estructura de modos de la cavidad viene determinada por la diagonalización de la matriz de interacciones original,  $J$ . Las frecuencias vendrán determinadas por la inversa de los autovalores no nulos y la matriz de acoplamiento por los autovectores correspondientes a cada frecuencia.

Una vez se tiene el modelo de Dicke generalizado que corresponde al problema tratado, se

encuentra su función de partición *à la* Wang

$$Z = \frac{1}{\pi^M} \int \prod_{k=0}^{M-1} dx_k dy_k \text{Tr}_m \left[ \exp \left\{ -\beta \left( \sum_{k=0}^{M-1} \omega_k (x_k^2 + y_k^2) + H_m - \sum_{i=1}^N \sum_{k=0}^{M-1} \frac{2\lambda_{ik}}{\sqrt{N}} x_k C_i \right) \right\} \right]. \quad (3.2)$$

El primero de los términos de la exponencial no depende de los operadores de materia, por lo que no es afectado por la traza. Sobre  $y_k$  se obtiene una integral gaussiana, mientras que definiendo  $u_k = x_k/\sqrt{N}$  y  $f_m[u_k] = \ln(Z_m[u_k])/N$ , con

$$Z_m[u_k] = \text{Tr}_m \left[ \exp \left\{ -\beta \left( H_m - \sum_{i=1}^N \sum_{k=0}^{M-1} 2\lambda_{ik} u_k C_i \right) \right\} \right], \quad (3.3)$$

la función de partición termina pudiéndose expresar como

$$Z = \int \prod_{k=0}^{M-1} \sqrt{\frac{N}{\pi\omega_k}} dx_k \exp \{N\phi[u_k]\}, \quad (3.4)$$

$$\phi[u_k] = -\beta \sum_{k=0}^{M-1} \omega_k u_k^2 + f_m[u_k]. \quad (3.5)$$

Se denotan las funciones multivariable  $g[u_k] = g(u_0, u_1, \dots, u_{M-1})$ . De esta forma se tiene la integral expresada adecuadamente para emplear el método de Laplace, convirtiendo el problema en una optimización multivariable de la función  $\phi[u_k]$ . Denotando por  $\{\bar{u}_k\}$  al máximo de la función, en el límite termodinámico

$$Z = \left( \prod_{k=0}^{M-1} \sqrt{\frac{2}{\omega_k}} \right) \exp \{N\phi[\bar{u}_k]\}. \quad (3.6)$$

Éste es el primer resultado importante del trabajo, ya que supone un nuevo método exacto de resolución de sistemas cuánticos con interacciones de largo alcance.

La necesidad de poder calcular la traza analíticamente en la Ec. (3.3) limita el tipo de hamiltonianos que se pueden considerar en  $H_m$ . La aplicabilidad del método queda limitada a aquellos modelos en los que  $H_m + \sum_i k_i C_i$  sea exactamente resoluble con  $k_i$  constantes cualesquiera. Esto hace que se puedan considerar en  $H_m$  partículas independientes, como se hará en posteriores secciones, pero también se pueden incluir interacciones de corto alcance si dan lugar a modelos integrables, como se muestra en un ejemplo en el apéndice B.

### 3.2. ¿Qué tipo de interacciones se pueden resolver?

Para que la equivalencia entre modelos de Dicke y de materia interactuante sea válida, el número de autovalores no nulos de la matriz de interacción debe cumplir [10]

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M(N)}{N} = 0. \quad (3.7)$$

Sin embargo, al diagonalizar una matriz  $N \times N$ ,  $M$  será de forma general proporcional a  $N$ . Es por ello que no se podrán resolver cualquier tipo de interacciones, sino que habrá que restringirse únicamente a aquellas que cumplan la condición (3.7).

Para ver en qué condiciones se cumple este requisito se estudia el espectro de la matriz de interacciones definida por la Ec. (1.2). Cuando en la sección 1 se ha presentado la matriz, se ha



introducido  $\tilde{J}(\mathbf{r} = 0) = b$  sin especificar cómo se elige este valor. Modificarlo hace que el espectro de  $J$  se desplace, sumándole un valor constante. Es por ello que se escoge  $b$  de forma que el mínimo autovalor sea nulo, haciendo que el resto sean no negativos y por tanto  $M \geq 1$ .

Considerando condiciones de contorno periódicas la invarianza traslacional permite calcular los autovalores de la matriz de interacción en el espacio de momentos. Así

$$D(\mathbf{q}) = \frac{\Gamma}{\tilde{N}} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{J}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (3.8)$$

donde  $\mathbf{q}$  es uno de los  $N$  vectores del espacio recíproco en el interior de la primera zona de Brillouin y el sumatorio sobre  $\mathbf{r}$  se extiende a todas las posiciones de la red. Para  $d = 1$  la matriz  $J$  es una matriz circulante simétrica [11], por lo que la Ec. (3.8) es consecuencia de sus propiedades generales. Éstas se detallan en el apéndice C, donde también se proporciona una expresión analítica para  $\lambda_{ik}$ .

En [7] se evalúa el comportamiento de los autovalores (3.8) en el límite  $N \rightarrow \infty$  sustituyendo la suma por una integral, lo que proporciona un criterio de cuándo puede resolverse el modelo con el método clásico análogo al aquí presentado. Alternativamente, como parte del trabajo, se ha desarrollado un criterio fácilmente generalizable a otros modelos sin necesidad de conocer una expresión analítica de sus autovalores. Para que el modelo sea resoluble se necesita que el número de autovalores no nulos sea una fracción despreciable del total,  $M/N \rightarrow 0$ . Cuando esto suceda el promedio de los autovalores tenderá a cero, ya que los autovalores están acotados para interacciones dadas por la Ec. (1.2). Empleando que la traza es la suma de los autovalores

$$\langle D_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} D_k = \frac{1}{N} \text{Tr}(J) = \frac{\Gamma b}{\tilde{N}}. \quad (3.9)$$

En el apéndice D se demuestra que  $b$  tiende a un valor constante cuando  $N \rightarrow \infty$  para cualquier valor de  $\alpha \geq 0$ , mientras que  $\tilde{N}$  diverge para  $\alpha < 1$ . Por tanto se tendrá que  $\langle D_k \rangle \rightarrow 0$  si  $0 \leq \alpha < 1$ . Para matrices de interacción más generales se puede optar por un análisis numérico para comprobar si condiciones análogas se cumplen, siendo necesario únicamente construir la matriz de interacción y calcular su traza.

Aunque establecer  $b \neq 0$  introduce términos no triviales en el hamiltoniano,  $-b \sum_i C_i^2 / \tilde{N}$ , serán despreciables en el límite termodinámico cuando  $b/\tilde{N} \rightarrow 0$ . Además para escribir la expresión de la función de partición tras evaluar la integral con el método de Laplace (3.6) se han despreciado las correcciones de segundo orden. Como se muestra en el apéndice E, es posible gracias a que  $M/N \rightarrow 0$ , por lo que esta condición ha aparecido de dos maneras independientes en la teoría. En el caso clásico [7] esta última consideración lleva a restringir también la aplicabilidad del método a modelos de muy largo alcance, si bien es la única vez que aparece.

## 4. Modelo de Ising en campo longitudinal y transversal

El modelo de Ising en campo transversal con interacciones de corto alcance es un modelo paradigmático de sistema de muchos cuerpos exactamente resoluble [12, 13]. Su relevancia radica en que presenta una transición de fase cuántica ya en  $d = 1$ , lo cual lo convierte en el punto de partida en el estudio de fenómenos críticos cuánticos. Al añadirle un campo magnético longitudinal se vuelve un ejemplo típico de sistema no exactamente resoluble, el modelo ZZZ [14]. En esta sección se va a emplear el método presentado para resolver la generalización de este

modelo a interacciones de largo alcance. Se considera una matriz de interacciones con invarianza traslacional que cumpla las condiciones detalladas en el apartado 3.2 en dimensión  $d$  general. En secciones posteriores se particularizará para interacciones ferromagnéticas y antiferromagnéticas en  $d = 1$ . El modelo viene descrito por el hamiltoniano

$$H = -\omega_z \sum_{i=1}^N S_i^z - \omega_x \sum_{i=1}^N S_i^x - \sum_{i,j=1}^N J_{ij} S_i^x S_j^x, \quad (4.1)$$

donde  $\omega_z$  y  $\omega_x$  son respectivamente el campo magnético transversal y longitudinal, y  $\vec{S}_i$  es un espín  $s$ . Puede escribirse como la Ec. (2.17) definiendo  $C_i = S_i^x$  y  $H_m = -\omega_z \sum_i S_i^z - \omega_x \sum_i S_i^x$ .

Para resolver el hamiltoniano mediante su equivalencia con un modelo de Dicke generalizado se tiene que calcular analíticamente

$$Z_m[u_k] = \text{Tr}_m \left[ \exp \left\{ -\beta \left( -\omega_z \sum_{i=1}^N S_i^z - \omega_x \sum_{i=1}^N S_i^x - 2 \sum_{i=1}^N \sum_{k=0}^{M-1} \lambda_{ik} u_k S_i^x \right) \right\} \right] = \prod_{i=1}^N \text{Tr}_i \left( e^{-\beta H_i} \right). \quad (4.2)$$

donde  $H_i = -\omega_z S_i^z - \left( \omega_x + 2 \sum_{k=0}^{M-1} \lambda_{ik} u_k \right) S_i^x$ . Para calcular sus autovalores se pueden rotar los operadores de spin, definiendo

$$S_i^x = S_i^{x'} \cos \phi_i + S_i^{z'} \sin \phi_i, \quad (4.3)$$

$$S_i^z = -S_i^{x'} \sin \phi_i + S_i^{z'} \cos \phi_i, \quad (4.4)$$

y eligiendo los ángulos de rotación que cumplan  $\tan \phi_i = \left( \omega_x + 2 \sum_{k=0}^{M-1} \lambda_{ik} u_k \right) / \omega_z$ . De esta forma  $H_i = 2\varepsilon_i S_i^{z'}$ , cuyos autovalores son triviales de obtener

$$2\varepsilon_i = \sqrt{\omega_z^2 + \left( \omega_x + 2 \sum_{k=0}^{M-1} \lambda_{ik} u_k \right)^2}, \quad (4.5)$$

$$\text{Tr}_i \left( e^{-\beta H_i} \right) = \sum_{m=-s}^{+s} e^{-2m\beta\varepsilon_i} = \frac{\sinh((2s+1)\beta\varepsilon_i)}{\sinh(\beta\varepsilon_i)}. \quad (4.6)$$

A priori puede parecer que existe ambigüedad en la elección del signo de  $\varepsilon_i$ , pero es eliminada porque los autovalores de  $H_i$  son  $\pm 2\varepsilon_i m$  y se suma a todos ellos. De esta forma la función de partición puede calcularse maximizando

$$\phi[u_k] = -\beta \sum_{k=0}^{M-1} \omega_k u_k^2 + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \ln \left[ \frac{\sinh((2s+1)\beta\varepsilon_i[u_k])}{\sinh(\beta\varepsilon_i[u_k])} \right]. \quad (4.7)$$

Denotando por  $\{\bar{u}_k\}$  a su máximo global, la condición de gradiente nulo se traduce en

$$\omega_k \bar{u}_k = \frac{s}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_{ik} \left( \omega_x + 2 \sum_{l=0}^{M-1} \lambda_{il} \bar{u}_l \right)}{2\bar{\varepsilon}_i} B_s(2s\beta\bar{\varepsilon}_i), \quad (4.8)$$

donde  $B_s(x)$  son las funciones de Brillouin. Se cumple que  $B_{1/2}(x) = \tanh(x)$  y toda la familia presenta un comportamiento cualitativamente similar, siendo funciones impares y saturando a  $\lim_{x \rightarrow \infty} B_s(x) = 1$ .

#### 4.1. Cálculo de magnetizaciones y susceptibilidades

Los resultados anteriores proporcionan la solución del modelo en el formalismo canónico, permitiendo calcular su función de partición. En cuanto a observables físicos se va a centrar el estudio en el cálculo de la magnetización a lo largo del eje de las interacciones, como parámetro de orden, y de su susceptibilidad respecto a un campo externo, que dará una medida de las correlaciones debido a que por su definición da cuenta de cómo reacciona un espín a un estímulo en otro distinto. Introduciendo un campo longitudinal perturbativo inhomogéneo se podrán calcular estas magnitudes mediante derivadas de la función de partición. Para ello se sustituye el hamiltoniano de la Ec. (4.1) por

$$H \rightarrow H - \sum_{i=1}^N h_i S_i^x . \quad (4.9)$$

La función de partición pasa a depender del campo perturbativo,  $\{h_i\}$ , permitiendo calcular magnetizaciones y susceptibilidades como

$$\langle S_i^x \rangle = \frac{1}{\beta} \lim_{\{h_n\} \rightarrow 0} \frac{\partial \ln Z [h_n]}{\partial h_i} , \quad (4.10)$$

$$\chi_{ij} = \frac{1}{\beta} \lim_{\{h_n\} \rightarrow 0} \frac{\partial^2 \ln Z [h_n]}{\partial h_j \partial h_i} . \quad (4.11)$$

Se puede mantener el campo perturbativo, definiendo una magnetización que depende de su valor,  $\langle S_i^x [h_n] \rangle = \beta^{-1} \partial Z [h_n] / \partial h_i$ . La introducción de este campo sigue permitiendo describir el modelo mediante la función  $\phi [u_k]$  presentada en la Ec. (4.7), redefiniendo  $2\varepsilon_i [u_k; h_n] = \sqrt{\omega_z^2 + \left( \omega_x + h_i + 2 \sum_{k=0}^{M-1} \lambda_{ik} u_k \right)^2}$  de forma que la función a maximizar dependerá también del campo perturbativo. Tomando la derivada de la función de partición (3.6) se obtiene

$$\langle S_i^x [h_n] \rangle = \frac{N}{\beta} \frac{\partial \phi}{\partial h_i} \Big|_{\{\bar{u}_k\}} , \quad (4.12)$$

donde el máximo global,  $\{\bar{u}_k\}$ , dependerá de  $\{h_i\}$ . Calculando explícitamente la derivada se obtiene la expresión para la magnetización de cada espín

$$\langle S_i^x [h_n] \rangle = -s B_s (2s\beta\varepsilon_i [\bar{u}_k; h_n]) \frac{\omega_x + h_i + 2 \sum_{k=0}^{M-1} \bar{u}_k \lambda_{ik}}{2\varepsilon_i [\bar{u}_k; h_n]} . \quad (4.13)$$

Tal como se espera  $|\langle S_i^x [h_n] \rangle / s| \leq 1$  siempre, pudiendo aproximarse al límite superior únicamente si  $\varepsilon_i [\bar{u}_k; h_n] \gg \omega_z$  y  $2s\beta\varepsilon_i \gg 1$ .

Las ecuaciones (4.10) y (4.11) corresponden a los límites  $\langle S_i^x \rangle = \lim_{\{h_n\} \rightarrow 0} \langle S_i^x [h_n] \rangle$  y  $\chi_{ij} = \lim_{\{h_n\} \rightarrow 0} \partial \langle S_i^x [h_n] \rangle / \partial h_j$  respectivamente. Esta última igualdad permite calcular las susceptibilidades mediante una derivada numérica, si bien también se puede encontrar una expresión analítica para modelos con invarianza traslacional [15][Cap. 6].

Manteniendo en las susceptibilidades la dependencia con el campo perturbativo  $\chi_{ij} [h_n] = \partial \langle S_i^x [h_n] \rangle / \partial h_j$ , de forma que  $\chi_{ij} = \lim_{\{h_n\} \rightarrow 0} \chi_{ij} [h_n]$ , e introduciendo el campo en la condición de extremo (4.8) se llega a

$$\omega_k \bar{u}_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i^x [h_n] \rangle \lambda_{ik} . \quad (4.14)$$

Esta ecuación permite relacionar las derivadas de la posición del máximo global con las susceptibilidades,

$$\omega_k \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial h_j} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \lambda_{ik} \chi_{ij} [h_n] . \quad (4.15)$$

Por otra parte, por cálculo directo de la derivada de la Ec. (4.13) se llega a

$$\chi_{ij} [h_n] = Y_i \left( \delta_{ij} + 2 \sum_{l=0}^{M-1} \lambda_{il} \frac{\partial \bar{u}_l}{\partial h_j} \right) , \quad (4.16)$$

$$Y_i = \frac{s}{2\bar{\varepsilon}_i^2} \left[ \bar{\varepsilon}_i B_s (2s\beta\bar{\varepsilon}_i) + \left( \omega_x + h_i + 2 \sum_{l=0}^{M-1} \lambda_{il} \bar{u}_l \right)^2 \left( \frac{s\beta}{2} B'_s (2s\beta\bar{\varepsilon}_i) - \frac{1}{4\bar{\varepsilon}_i} B_s (2s\beta\bar{\varepsilon}_i) \right) \right] . \quad (4.17)$$

Combinando ambos resultados y tomando el límite  $\{h_i\} \rightarrow 0$  se obtiene

$$\chi_{ij} = Y_i \left( \delta_{ij} + 2 \sum_{a=1}^N J_{ia} \chi_{aj} \right) . \quad (4.18)$$

Bajo la suposición de que  $Y_i = Y$  para todos los grados de libertad, que posteriormente se justificará, se puede aislar la susceptibilidades de la ecuación anterior. Debido a la invarianza traslacional las matrices  $J$  y  $\chi$  se pueden diagonalizar en el espacio de momentos, resultando

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_{ik} D_k \lambda_{jk} , \quad \chi_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_{ik} \chi_k \lambda_{jk} . \quad (4.19)$$

En  $d = 1$  esto puede contemplarse como consecuencia de que ambas magnitudes vienen definidas por matrices circulantes simétricas, apéndice C. Despejando de la Ec. (4.18) con  $Y_i = Y$ , los modos de Fourier de la susceptibilidad vienen dados por

$$\chi^k = \frac{Y}{1 - 2Y D_k} . \quad (4.20)$$

Como  $D_{k \geq M} = 0$  se tendrá  $\chi_{k \geq M} = Y$ , lo que permite escribir

$$\chi_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_{ik} \chi_k \lambda_{jk} = Y \delta_{ij} + \frac{2Y^2}{N} \sum_{k=0}^{M-1} \frac{\lambda_{ik} \lambda_{jk}}{\omega_k - 2Y} . \quad (4.21)$$

De esta expresión puede identificarse que los elementos no diagonales de la susceptibilidad escalan como  $M/N$ , de forma que se anularán en el límite termodinámico.

A pesar de que para obtener los resultados analíticos se ha supuesto que se trabaja en el límite termodinámico,  $N \rightarrow \infty$ , el cálculo de la susceptibilidad requiere tomar valores finitos para  $N$  y  $M$ . Para cada valor de  $N$  y  $\alpha$  lo que se hace es incrementar  $M$  hasta alcanzar la convergencia, forzando siempre que se cumpla que  $\lim_{N \rightarrow \infty} M(N)/N = 0$ .

## 4.2. La teoría de campo medio es exacta en modelos de muy largo alcance

Tomando una combinación lineal de las condiciones definidas por la Ec. (4.14), en el límite  $\{h_n\} \rightarrow 0$ , se demuestra que  $\sum_{k=0}^{M-1} \lambda_{ik} \bar{u}_k = \sum_{j=1}^N J_{ij} \langle S_j^x \rangle$ . Sustituyendo en la Ec. (4.13) da lugar a un conjunto de relaciones autoconsistentes que deben cumplir las magnetizaciones

$$\langle S_i^x \rangle = -s B_s (2s\beta\bar{\varepsilon}_i) \frac{\omega_x + 2 \sum_{j=1}^N J_{ij} \langle S_j^x \rangle}{2\bar{\varepsilon}_i} , \quad (4.22)$$

donde  $2\varepsilon_i = \sqrt{\omega_z^2 + \left(\omega_x + 2 \sum_{j=1}^N J_{ij} \langle S_j^x \rangle\right)^2}$ . Éstas son precisamente las ecuaciones que se obtienen al emplear la teoría de campo medio.

Por tanto, como el método empleado es exacto en el límite termodinámico, se demuestra que la teoría de campo medio es exacta para sistemas cuánticos de muy largo alcance. Anecdóticamente se demuestra además que la descripción que proporciona campo medio es redundante en el sentido de que emplea  $N$  variables, las magnetizaciones  $\{\langle S_i^x \rangle\}$ , mientras que basta con emplear las  $M$  variables  $\{u_k\}$ , donde  $\lim_{N \rightarrow \infty} M/N = 0$ .

La demostración de que la teoría de campo medio es exacta para sistemas de espines con interacciones de muy largo alcance es el segundo resultado importante del trabajo.

## 5. Cadena de Ising ferromagnética

Particularizando el modelo estudiado en la sección anterior al caso más sencillo posible, se considera una cadena de Ising ( $d = 1$ ) con interacciones ferromagnéticas. En el hamiltoniano (4.1) la matriz de interacciones,  $J_{ij} = \Gamma \tilde{J}(\mathbf{r}_{ij})/\tilde{N}$ , viene definida en este caso por la Ec. (1.2) y  $\Gamma > 0$ . Para la distancia entre espines se emplean condiciones de contorno periódicas junto con el criterio de la imagen más próxima, de forma que  $r_{ij} = \min\{|i - j|, N - |i - j|\}$ . Estas interacciones cumplen las condiciones del apartado 3.2 que permiten que el modelo se resuelva con el método presentado siempre que  $\alpha < 1$ . La menor frecuencia del modelo de Dicke asociado será  $\omega_0 = 1/\Gamma$  (3.8), a la que le corresponderán acoplos homogéneos con todos los grados de libertad,  $\lambda_{i0} = 1$ , tal y como se justifica en el apéndice C.

Las interacciones ferromagnéticas tienden a alinear todos los espines paralelos entre sí a lo largo del eje X, que es el mismo efecto que produce el campo longitudinal,  $\omega_x$ . A causa de que ambos términos tienen el mismo efecto y no compiten entre sí se estudia únicamente el caso  $\omega_x = 0$ . De esta forma en el hamiltoniano se tienen dos términos: la interacción entre espines, de intensidad dada por  $\Gamma$  que tiende a alinearlos entre ellos a lo largo del eje X, y el campo magnético transversal,  $\omega_z$ , que tiende a alinear los espines en su dirección, el eje Z.

En el caso ferromagnético el problema de maximización puede convertirse a un problema univariable. La demostración radica en que se pueden definir unas variables en los sitios de la red,  $\mu_i = \sum_{k=0}^{M-1} \lambda_{ik} u_k$ , que en el máximo global cumplirán que  $\bar{\mu}_i = \bar{\mu} \forall i$ . A este tipo de solución se le llama homogénea en la red, por tomar las variables valores independientes de la posición. Invertiendo la definición se tiene  $\bar{u}_k = \sum_{i=1}^N \bar{\mu}_i \lambda_{ik}/N$ , y por tanto las variables de maximización cumplirán

$$\bar{u}_k = \delta_{k0} \bar{u} . \quad (5.1)$$

El problema de optimización se ha vuelto de una única variable, lo que asegura que se va a poder encontrar el máximo global de la función de forma numérica. Resulta de crucial importancia debido a que en un problema de optimización multivariable el paisaje de máximos locales puede ser muy complejo, no existiendo ninguna garantía de éxito en el proceso. En el cálculo de susceptibilidades de la sección anterior la homogeneidad impondrá  $Y_i = Y$  (4.17), justificando el desarrollo llevado a cabo en la parte final del apartado. La demostración completa de que el máximo homogéneo existe y es el global se recoge en el apéndice F.

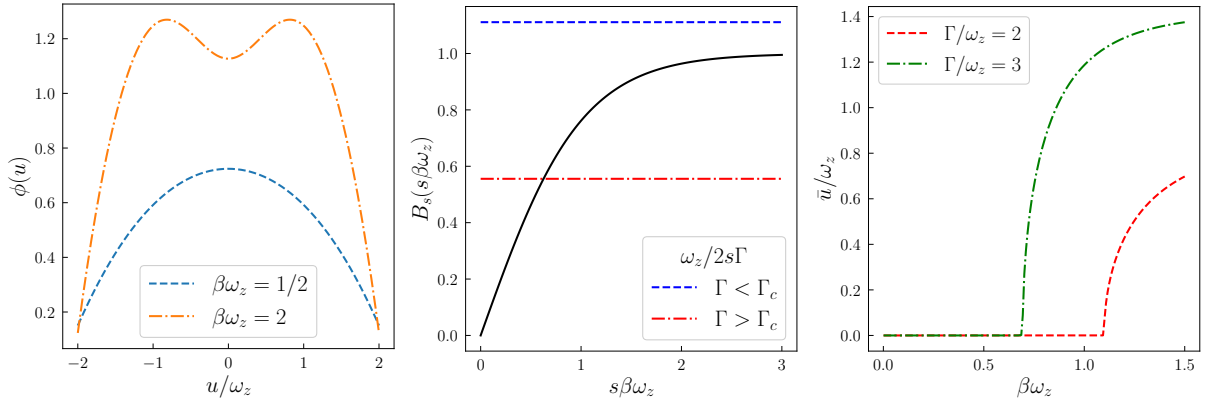
Bajo las premisas presentadas la función a maximizar queda particularizada a

$$\phi(u) = -\beta\omega_0 u^2 + \ln \left[ \frac{\sinh((2s+1)\beta\varepsilon(u))}{\sinh(\beta\varepsilon(u))} \right] , \quad (5.2)$$

con  $2\varepsilon(u) = \sqrt{\omega_z^2 + 4u^2}$ . En la figura 4a se muestra la función  $\phi(u)$  (5.2) para distintos valores de los parámetros, apreciando la aparición de dos mínimos no triviales. El máximo global, por ser un punto estacionario, cumplirá la ecuación

$$\bar{u}B_s(2s\beta\varepsilon(\bar{u})) = \bar{u}\varepsilon(\bar{u})/s\Gamma. \quad (5.3)$$

En las ecuaciones (5.2) y (5.3) desaparece la dependencia con  $\alpha$ , que existía a través de  $D_{k \neq 0}$ . De esta forma la búsqueda de los extremos será común para cualquier  $\alpha$ . El comportamiento crítico de la cadena de Ising con interacciones ferromagnéticas de muy largo alcance no dependerá pues del exponente de decaimiento.



(a) Aparición de máximos no triviales en  $\phi(u)$ .  $\Gamma/\omega_z = 2$ ,  $s = 1/2$ . (b) Estabilidad del extremo  $u = 0$ .  $s = 1/2$ . (c) Transición de segundo orden en el máximo de  $\phi(u)$ .  $s = 1/2$ .

Figura 4: En el panel (a) se muestra la función  $\phi(u)$  para dos temperaturas diferentes. El extremo de  $u = 0$  se convierte en un mínimo y aparecen dos máximos en  $u \neq 0$  al aumentar  $\beta$ . Para poder observar este comportamiento se necesita que  $\Gamma > \Gamma_c$ . En el panel (b) se analiza la estabilidad del extremo de  $u = 0$ . Para que sea un máximo se necesita que la recta horizontal esté por encima de  $B_s(s\beta\omega_z)$ . Cuando  $\Gamma < \Gamma_c$  esto sucede siempre; mientras que si  $\Gamma > \Gamma_c$  existe una  $\beta_c$ , definida por la Ec. (5.6) y geoméricamente por la intersección de las dos funciones, tal que si  $\beta > \beta_c$ ,  $u = 0$  pasa a ser un mínimo. En el panel (c) se muestra el comportamiento del máximo global de  $\phi(u)$ . La transición es de segundo orden, con la temperatura crítica definida por la Ec. (5.6).

## 5.1. Estudio del diagrama de fases

Partiendo de la Ec. (4.14) y empleando que en el modelo ferromagnético  $\lambda_{i0} = 1$  y  $\bar{u}_k = \delta_{k0}\bar{u}$  se llega a que la magnetización intensiva viene dada por

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i^x \rangle = \frac{\bar{u}}{\Gamma}. \quad (5.4)$$

De esta manera  $m$  y  $\bar{u}$  son parámetros de orden equivalentes. La solución del problema de optimización se encuentra acotada por  $|\bar{u}| \leq s\Gamma$ .

La ecuación (5.3) se satisface por todos los extremos de la función, no únicamente por el máximo global, y admite siempre como solución  $u = 0$ . Empleando la segunda derivada se puede discernir en qué casos es un máximo,

$$\left. \frac{d^2\phi(u)}{du^2} \right|_{u=0} = -\frac{2\beta}{\Gamma} + \frac{4s\beta}{\omega_z} B_s(s\beta\omega_z). \quad (5.5)$$

Si  $B_s(s\beta\omega_z) < \omega_z/2s\Gamma$  la segunda derivada será negativa y  $u = 0$  será un máximo. En la figura 4b se muestra un análisis gráfico de la situación. Definiendo una intensidad de interacción crítica,  $\Gamma_c = \omega_z/2s$ , se tendrá que si  $\Gamma < \Gamma_c$ ,  $u = 0$  es siempre el máximo global. Cuando  $\Gamma > \Gamma_c$  se define la temperatura crítica según

$$B_s(s\omega_z\beta_c) = \omega_z/2s\Gamma. \quad (5.6)$$

Si  $\Gamma > \Gamma_c$  y  $\beta < \beta_c$ ,  $u = 0$  es el máximo; mientras que si  $\beta > \beta_c$  pasa a ser un mínimo, por lo que el máximo global cumplirá  $u \neq 0$  y se habrá producido una transición de fase, apareciendo magnetización espontánea. Cuando  $\Gamma > \Gamma_c$  y  $\beta > \beta_c$  el máximo global,  $\bar{u} \neq 0$ , cumplirá la ecuación trascendental

$$\bar{\varepsilon}/s\Gamma = B_s(2s\beta\bar{\varepsilon}), \quad (5.7)$$

donde  $\bar{\varepsilon} = \varepsilon(\bar{u})$ . Esta ecuación da origen a una transición de fase de segundo orden. En la figura 4c se muestra la evolución del máximo global para dos valores de la intensidad de la interacción. Aumentar  $\Gamma$  favorece el alineamiento entre espines, permitiendo que exista ordenación ferromagnética a temperaturas mayores. La figura se ha obtenido mediante búsqueda numérica del máximo global.

En la figura 5 se representa el diagrama de fases completo, construido por optimización numérica barriendo los dos parámetros libres del modelo. Se pueden identificar claramente las fases ferromagnética y paramagnética en función de la magnetización que presentan. Además se representa la línea crítica calculada analíticamente (5.6), que concuerda con la frontera entre ambas fases. Coincide con los puntos obtenidos numéricamente para  $\alpha = 0.05$  por Gonzalez Lazo y colaboradores [4], que emplean técnicas de *finite-size scaling*.

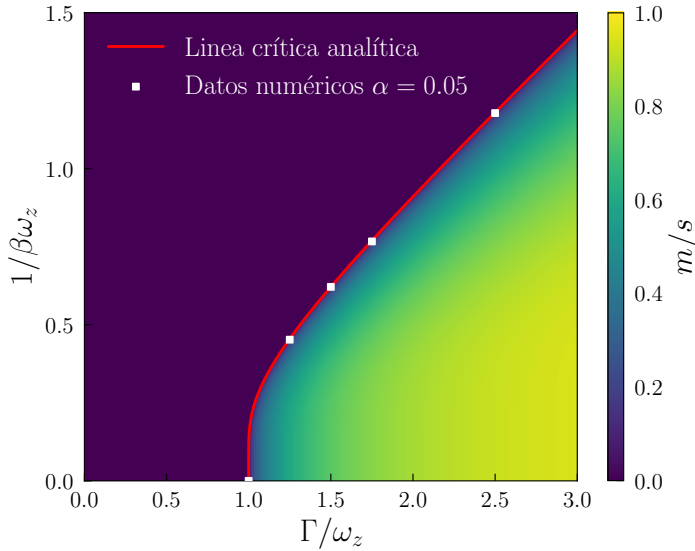


Figura 5: Diagrama de fases del modelo de Ising ferromagnético en campo transversal de largo alcance con  $s = 1/2$ . Para  $\Gamma/\omega_z < 1$  no existe la fase ferromagnética para ninguna temperatura. La línea crítica analítica viene definida por la Ec. (5.6), los datos numéricos se han extraído de la Ref. [4].

## 5.2. Susceptibilidades

Para estudiar las correlaciones entre partículas se calculan las susceptibilidades entre espines empleando la Ec. (4.21). Debido a la invarianza traslacional del modelo solamente depende de la distancia que los separa, por lo que se puede definir  $\chi_r = \chi_{i,i+r}$ . En la figura 5 se observa la transición de fase que ya se ha analizado pero en términos de la susceptibilidad, donde se ha tomado el límite  $\beta \rightarrow \infty$  y por tanto  $\Gamma_c/\omega_z = 1/2s$ .

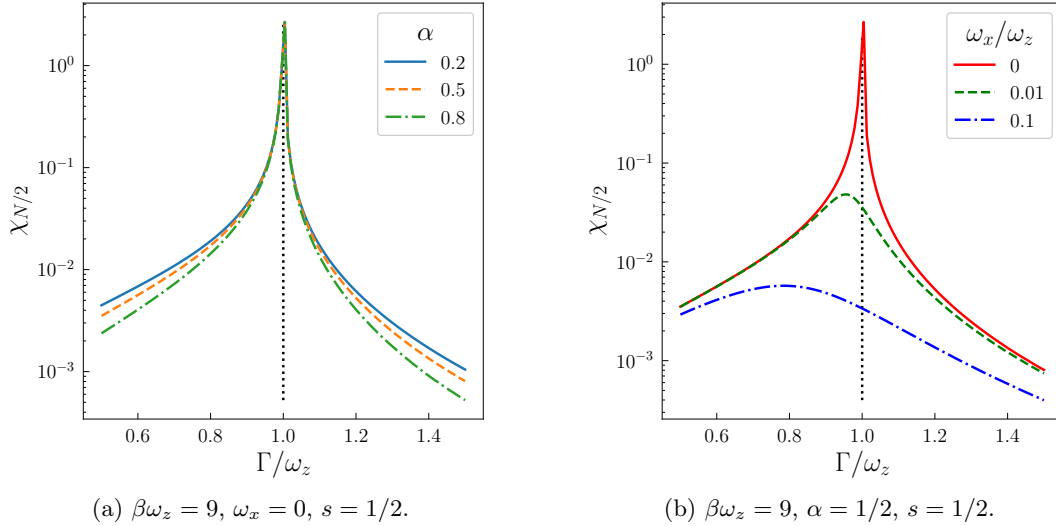


Figura 6: Transición de fase en el modelo ferromagnético estudiada mediante la susceptibilidad entre espines. En el panel (a) se muestra que el punto crítico no cambia al variar  $\alpha$ , aunque sí que se modifica la magnitud de las correlaciones. En el panel (b) se muestra cómo introducir campo magnético transversal,  $\omega_x \neq 0$ , impide que se produzca una transición de fase propiamente dicha. Los datos de ambos paneles han sido calculados con  $N = 100$ .

En la figura 6a se muestra el comportamiento de  $\chi_{N/2}$  (susceptibilidad de espines máximamente alejados) para distintos valores de  $\alpha$ . Tal como se había mencionado, el comportamiento crítico no depende del exponente de decaimiento, si bien sí que lo hacen las susceptibilidades en ambas fases (paramagnética a la izquierda y ferromagnética a la derecha). Se observa mayor correlación entre espines conforme se disminuye  $\alpha$ , lo que concuerda con el hecho de que interactúan más fuertemente. Además la susceptibilidad diverge en la transición, dando lugar a la aparición de orden a gran escala.

En la figura 6b se muestra el comportamiento de la susceptibilidad al introducir un campo longitudinal no nulo,  $\omega_x \neq 0$ . Se aprecia como primer efecto que la introducción del campo adelanta la aparición del máximo, debido a que favorece que los espines se ordenen a lo largo del eje X. Además disminuye el valor de la susceptibilidad y desaparece la divergencia porque la fase ordenada que aparece no se debe únicamente a la existencia de correlaciones entre espines. Aunque es cierto que apuntan en la misma dirección, una parte relevante del efecto está causada por el hecho de que exista un campo magnético que favorece esta ordenación. Es decir, a que el término de  $\omega_x$  no compite contra la interacción, sino que tiene el mismo efecto. Estos resultados justifican la decisión de estudiar en profundidad únicamente el caso  $\omega_x = 0$ , única situación en que se puede hablar de transición de fase propiamente dicha.

Por último se puede estudiar la dependencia espacial de la susceptibilidad, es decir, cómo decaen las correlaciones. En la figura 7a se muestra la dependencia de  $\chi_r$  con la distancia. Se observa que las correlaciones disminuyen de forma potencial,  $\chi_r \propto r^{-\alpha_\chi}$ , no exponencial como sucede en los sistemas de corto alcance fuera de la criticidad. Es esta ausencia de decaimiento exponencial la que hace que no se pueda definir de manera directa una longitud de correlación en sistemas de largo alcance. Se observa un crecimiento de  $\alpha_\chi$  al aumentar  $\alpha$ , tal como se espera debido a que cuanto más rápidamente decaigan las interacciones, más rápido se espera que la



correlación entre dos partículas disminuya. Además para  $\alpha = 0$  todos los grados de libertad interactúan con la misma intensidad, por lo que no se espera dependencia con la distancia, que no juega ningún papel en las interacciones. Analizando la dependencia entre  $\alpha_\chi$  y  $\alpha$ , se observa una relación lineal de término independiente nulo (salvo precisión numérica), justificada por el argumento expuesto. Este comportamiento se muestra en la Fig. 7b. La pendiente de la relación lineal dependerá del punto del diagrama de fases de la Fig. 5. En la figura 7c se muestra que los valores de  $a$  están acotados entre cero y uno, anulándose en el entorno de la línea crítica (5.6). Esto quiere decir que cuando se produce la transición de fase las susceptibilidades no dependen de la distancia, independientemente del valor de  $\alpha$ , lo que concuerda con el establecimiento de un orden de largo alcance. Tanto en el interior de la fase ferromagnética como paramagnética se recupera la dependencia con la distancia para  $\alpha \neq 0$ .

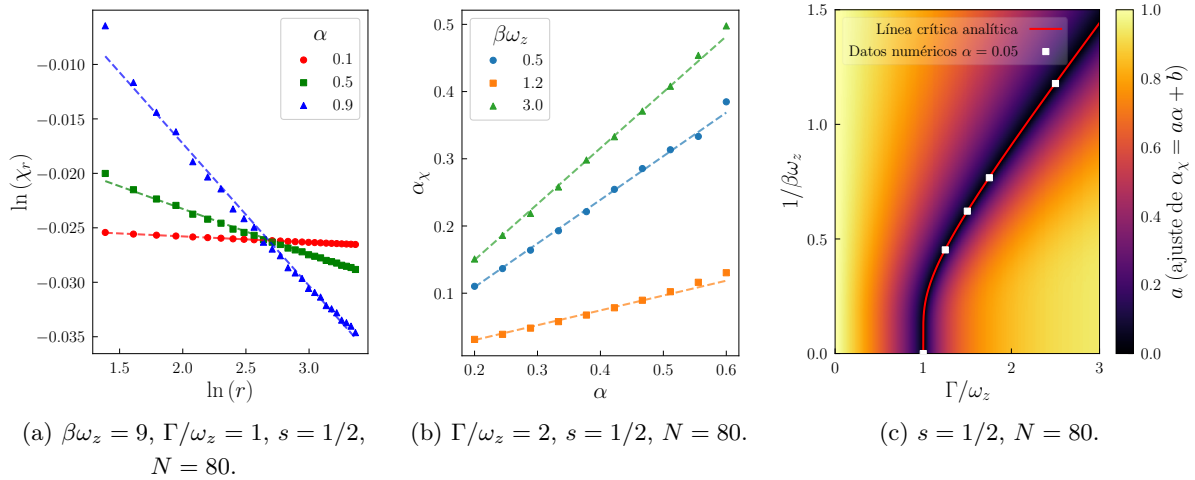


Figura 7: Análisis de la dependencia espacial de la susceptibilidad en la cadena de Ising ferromagnética en campo transversal. En el panel (a) se muestra el decaimiento potencial de las correlaciones. En el panel (b) se muestra que el exponente de esta relación queda bien ajustado por  $\alpha_\chi = a\alpha + b$  ( $b \approx 0$  porque para  $\alpha = 0$  la distancia no juega papel en las interacciones). En el panel (c) se muestra la pendiente de la relación a lo largo del diagrama de fases. Se observa que en la línea crítica la susceptibilidad no depende de la distancia para ningún valor de  $\alpha$ . Se representa la línea crítica analítica (5.6) y los datos numéricos extraídos de la Ref. [4].

## 6. Cadena de Ising antiferromagnética

Las interacciones ferromagnéticas tienden a alinear todos los espines. En ausencia de términos adicionales en el hamiltoniano el estado fundamental vendrá dado por una alineación completa, de forma que todas las interacciones se verán satisfechas. Por el contrario, considerar interacciones antiferromagnéticas abre la puerta a la aparición de la frustración, que sucede cuando no se pueden satisfacer los requerimientos de todas las interacciones. Con interacciones a primeros vecinos esto puede suceder únicamente por efecto de la geometría de la red (por ejemplo en una red triangular) o si los acoplos son aleatorios (como en los vidrios de espín). Al introducir interacciones antiferromagnéticas entre todas las partículas la aparición de frustración es inevitable. Si cualquier par de partículas tienden a estar antialineadas entre sí será imposible satisfacer los requerimientos de todas las interacciones forma simultánea. Esto lleva a que no sea trivial

encontrar el estado fundamental de los modelos con frustración, que además tienen una gran degeneración. Los modelos frustrados corresponden a tomar  $\Gamma < 0$  en el análisis del apartado anterior, pero no van a ser tratables con el método expuesto en este trabajo debido a que el término que permite que el menor autovalor sea nulo,  $b$ , se vuelve del orden de  $\tilde{N}$ . Esto hace que se introduzcan términos diagonales no triviales en el hamiltoniano (1.1), y por tanto se altera el modelo que se está resolviendo, y que se obtenga un promedio de los autovalores distinto de cero en el límite termodinámico (3.9), por lo que se incumplen las condiciones del apartado 3.2.

Es por ello que como generalización de la cadena de Ising antiferromagnética ( $d = 1$ ) con interacciones a primeros vecinos se definen las “interacciones antiferromagnéticas no frustradas”. Para evitar la frustración se impone que el carácter de las interacciones vaya cambiando con la distancia entre espines. Entre primeros vecinos la interacción será antiferromagnética, entre segundos vecinos ferromagnética y así sucesivamente. Las interacciones vienen definidas por una matriz en que sus elementos se van alternando de signo  $J_{ij} = (-1)^{i+j}\Gamma\tilde{J}(\mathbf{r}_{ij})/\tilde{N}$ , con  $\tilde{J}(\mathbf{r}_{ij})$  dada por la Ec. (1.2). Si no existiesen más términos en el hamiltoniano, en el estado fundamental la red se dividiría en dos subredes alternadas con magnetizaciones opuestas. De esta forma se evitaría la frustración en todas las interacciones y se minimizaría la energía, lo que se esquematiza en la Fig. 8. Para evitar la frustración por efectos de borde, al estar considerando condiciones de contorno periódicas, se necesita restringir el número de partículas,  $N$ , a valores pares. Estas interacciones son generalizables a redes de cualquier dimensión si no existe frustración geométrica en los modelos análogos de corto alcance. A diferencia del caso ferromagnético, los tres términos del modelo (interacción entre espines, campo transversal y campo longitudinal) compiten entre sí, por lo que ahora sí se va a estudiar el caso  $\omega_x \neq 0$ .

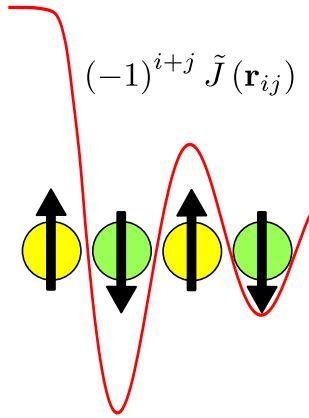


Figura 8: Esquema de las interacciones antiferromagnéticas no frustradas entre un espín (el izquierdo) y sus tres primeros vecinos. Se representa la intensidad de la interacción con línea continua, si bien únicamente está definida para distancias múltiplo de la mínima separación. Se ha dibujado la orientación de los espines en el estado fundamental cuando no existen otro tipo de interacciones, con diferente color las dos subredes que se generan a causa del signo alternado de las interacciones.

Igual que en el caso ferromagnético se ha considerado una solución homogénea en la red, en el caso antiferromagnético se puede considerar una solución “antihomogénea” dada por  $\bar{\mu}_i = (-1)^{i+1}\bar{\mu}_1$ . Esta alternancia de signo viene motivada porque con interacciones antiferromagnéticas la mínima de las frecuencias tiene asociada acoplos alternantes,  $\lambda_{i0} = (-1)^i$ , como se demuestra en el apéndice C. Analíticamente se puede demostrar que el máximo global es antiferromagnético para los casos particulares  $\omega_x = 0$  y  $\alpha = 0$ , como se recoge en el apéndice G, aunque no para el caso general. Sin embargo numéricamente sí que se comprueba que la solución es antihomogénea para cualquier valor de los parámetros.

## 6.1. Estudio del caso antihomogéneo

Empleando que  $\bar{\mu}_i = (-1)^{i+1}\bar{\mu}$ , y debido a la estructura de la matriz  $\lambda_{ik}$  con las interacciones antiferromagnéticas no frustradas, se vuelve a recuperar un problema de optimización univariable ya que  $\bar{u}_k = \delta_{k0}\bar{u}$ . De esta forma la función a maximizar (4.7) queda particularizada a

$$\phi(u) = -\beta \frac{u^2}{\Gamma} + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{\sinh((2s+1)\beta\varepsilon_+(u))}{\sinh(\beta\varepsilon_+(u))} \right] + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{\sinh((2s+1)\beta\varepsilon_-(u))}{\sinh(\beta\varepsilon_-(u))} \right], \quad (6.1)$$

donde  $2\varepsilon_{\pm}(u) = \sqrt{\omega_z^2 + (\omega_x \pm 2u)^2}$  y se ha empleado que  $\omega_0 = 1/\Gamma$  (3.8). En cuanto al significado físico del parámetro de optimización, partiendo de la Ec. (4.14) se puede demostrar su relación con la magnetización alternada

$$m_s = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (-1)^i \langle S_i^x \rangle = \frac{\bar{u}}{\Gamma}, \quad (6.2)$$

donde el subíndice se toma del término inglés *staggered magnetization*.

Aunque el modelo puede estudiarse directamente resulta conveniente particularizar al límite de temperatura nula, reduciendo el número de parámetros que intervienen y obteniendo dependencias funcionales abordables analíticamente y menos costosas de tratar numéricamente. Tomando el límite  $\beta \rightarrow \infty$  de la Ec. (6.1) por el procedimiento que se detalla en el apéndice H se obtiene

$$\frac{\phi(u)}{\beta} = -\frac{u^2}{\Gamma} + \frac{s}{2} \left( \sqrt{\omega_z^2 + (\omega_x + 2u)^2} + \sqrt{\omega_z^2 + (\omega_x - 2u)^2} \right). \quad (6.3)$$

En la figura 9 se muestra el diagrama de fases al que da lugar el estudio numérico de los máximos de la Ec. (6.3). Se representa tanto  $m_s$ , que es el parámetro de orden, como  $m$ . Al ser a temperatura nula proporciona información de cuál es el estado fundamental en cada región. Existe una fase donde predominan las interacciones antiferromagnéticas en la que  $m_s \neq 0$ , mientras que en la fase paramagnética  $m_s = 0$ . Aunque la magnetización normal,  $m$ , no sea un buen parámetro de orden sí que ayuda a interpretar el significado físico de los resultados. En la fase paramagnética los espines tienden a alinearse con los campos magnéticos, por lo que cuando predomina  $\omega_x$  se tiene  $m \sim s$ , mientras que cuando predomina  $\omega_z$  entonces  $m \approx 0$ . En la mayor parte de la fase antiferromagnética se tiene  $m \approx 0$ , aunque existe una región cercana a la línea crítica donde  $m \neq 0$  que se corresponde a configuraciones ferrimagnéticas, donde las dos subredes están magnetizadas en sentidos contrarios pero con distinta magnitud.

En el diagrama de fases, Fig. 9, se observa una región donde la transición es abrupta y otra donde es más suave. Para estudiar el orden de la transición se van a considerar primero dos casos límites.

Al establecer  $\omega_x = 0$  en la Ec. (6.3) se recupera la Ec. (5.2) del caso ferromagnético, como puede entenderse también con un argumento alternativo recogido en el apéndice I, por lo que el análisis hecho en la sección anterior de la transición de fase en función de la temperatura permanece válido cambiando el significado físico del parámetro de orden. La transición será de segundo orden y particularizando la Ec. (5.6) para temperatura nula se obtiene  $\omega_z^c/s\Gamma = 2$ , tal como se observa por optimización numérica de la Ec. (6.3).

Tomando  $\omega_z = 0$  las raíces de la Ec. (6.3) dan lugar a valores absolutos. La función queda definida por tramos cuyos extremos varían dependiendo del valor de  $\omega_x$ . Comparando los máximos de cada uno de los tramos se puede encontrar de forma analítica el máximo absoluto de la función.

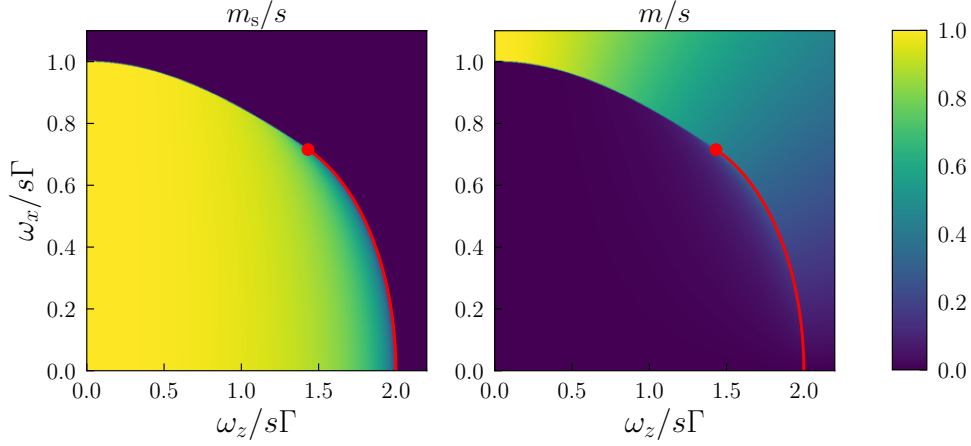


Figura 9: Diagrama de fases de la cadena de Ising antiferromagnética en el límite  $\beta \rightarrow \infty$ . La magnetización alternada,  $m_s$ , se comporta como un buen parámetro de orden; mientras que la magnetización normal,  $m$ , no. Se ha dibujado la región de la línea crítica en que la transición es de segundo orden, calculada mediante la teoría de Landau.

En la figura 10 se muestra la función  $\phi(u)$  para distintos valores de  $\omega_x/s\Gamma$ . Cuando  $\omega_x/s\Gamma = 0$  se tienen solamente dos máximos en los laterales. Conforme  $\omega_x/s\Gamma$  aumenta, aparece un máximo local en  $u = 0$  que va creciendo hasta convertirse en el máximo global para  $\omega_x^c/s\Gamma = 1$ , lo que concuerda con lo observado numéricamente en la Fig. 9. Este comportamiento es característico de una transición de primer orden, ya que el parámetro de orden presenta una discontinuidad en la transición.

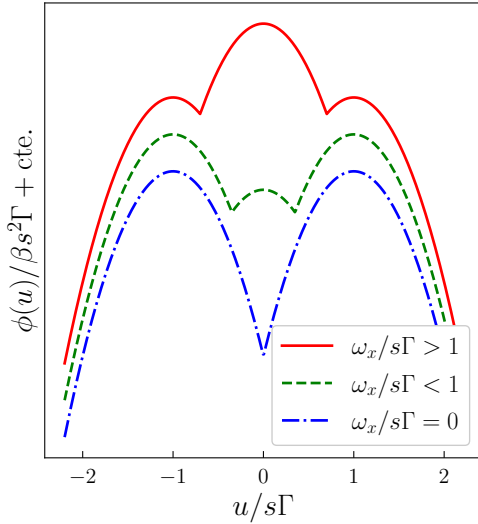


Figura 10: Función  $\phi(u)$  (6.3) para  $\omega_z = 0$  y distintos valores de  $\omega_x/s\Gamma$ . La posición del máximo sufre una transición de primer orden.  $\phi(u)$  viene definida a tramos cuyos extremos dependen de  $\omega_x$ . La altura del máximo central es proporcional a  $\omega_x$ , mientras que la posición y altura de los máximos laterales permanece constante, por lo que dejan de ser el máximo global. Se le ha añadido a la función una constante para que no se superpongan los tramos laterales.

Como para  $\omega_x = 0$  se tiene una transición de fase de segundo orden y para  $\omega_z = 0$  es de primer orden, la pregunta que surge de manera natural es qué sucede en el resto de la línea crítica. En el modelo de corto alcance (solo interacciones a primeros vecinos) la transición permanece de segundo orden en toda la línea crítica hasta  $\omega_z = 0$ , donde se hace de primer orden en el llamado punto supercrítico [14, 16]. En el caso de largo alcance la antihomogeneidad de la solución para  $\alpha = 0$  permite visualizar  $\phi(u)$  (6.3), observando que para  $\omega_z \gg \omega_x$  la transición es de primer orden y para  $\omega_x \ll \omega_z$  es de segundo orden, aun cuando los dos campos son no nulos. Esto apunta a una diferencia cualitativa entre el comportamiento de los modelos de corto y largo alcance en

su diagrama de fases. Para caracterizar el orden de la transición a lo largo de toda la línea crítica de forma analítica y encontrar la posición del punto supercrítico se va a emplear la teoría de Landau.

## 6.2. Estudio de la línea crítica con la Teoría de Landau

Típicamente la teoría de Landau captura la fenomenología de las transiciones de fase de primer y segundo orden mediante un desarrollo en serie de la energía libre, que se tiene que minimizar [17][Cap. 11]. En el problema estudiado se busca el máximo absoluto de una función, lo que cambiará el signo de los coeficientes respecto del caso usual. Desarrollando en serie la función en el límite de temperatura nula (6.3)

$$\phi(u; s, \Gamma, \omega_z, \omega_x)/\beta = g_0 + \frac{1}{2}g_2u^2 + \frac{1}{4}g_4u^4 + \frac{1}{6}g_6u^6, \quad (6.4)$$

$$g_2 = 4s \frac{\omega_z^2}{(\omega_z^2 + \omega_x^2)^{3/2}} - \frac{2}{\Gamma}, \quad (6.5)$$

$$g_4 = 8s \frac{\omega_z^2 (4\omega_x^2 - \omega_z^2)}{(\omega_z^2 + \omega_x^2)^{7/2}}, \quad (6.6)$$

donde  $g_i \equiv g_i(s, \Gamma, \omega_z, \omega_x)$  y se presentan las expresiones analíticas que tienen posterior relevancia. La variación de los signos y las magnitudes de los distintos coeficientes da lugar a los distintos paisajes de máximos y mínimos que se pueden tener, los cuales determinan a su vez las transiciones de fase.

Para el estudio de la línea crítica de segundo orden se busca encontrar cuándo  $u = 0$  deja de ser el máximo global y se convierte en un mínimo local. Para ello se necesita que en la Ec. (6.4) el coeficiente  $g_4$  sea negativo y  $g_2$  cambie de signo. Para que  $g_4$  sea negativo se necesita  $|\omega_z| > 2|\omega_x|$  y marca los límites de la región en que la transición es de segundo orden. Que  $g_2 = 0$  proporciona la ecuación de la línea crítica

$$4s^2\Gamma^2 (\omega_z^c)^4 = \left( (\omega_z^c)^2 + (\omega_x^c)^2 \right)^3. \quad (6.7)$$

En la figura 9 se observa que concuerda a la perfección con los resultados obtenidos por optimización numérica de la función completa. El punto supercrítico, donde la transición pierde su carácter de segundo orden, es aquel que cumple que  $g_2 = 0$  y  $g_4 = 0$ .

Aunque la teoría de Landau permite describir cualitativamente una transición de primer orden no permite capturar de forma precisa la posición de la línea crítica, debido a que el carácter no local de la transición provoca que intervengan todos los coeficientes de la expansión en serie de la energía libre (6.4). No obstante, al haber determinado dónde la transición es de segundo orden, por exclusión el resto de la línea crítica deberá corresponder a una transición de primer orden. Los detalles de la obtención de la línea crítica de segundo orden y de la imposibilidad de obtener la línea crítica de primer orden se recogen en el apéndice J.

De esta forma la teoría de Landau ha permitido caracterizar el orden de la transición a lo largo de toda la línea crítica y encontrar las coordenadas del punto supercrítico, confirmando que existe una diferencia cualitativa con el diagrama de fases del modelo con interacciones de corto alcance.

## 7. Conclusiones y trabajo futuro

En la primera parte del trabajo se han presentado los modelos cuánticos de largo alcance, su clasificación, fenomenología y la importancia de su estudio. Para resolverlos analíticamente se ha tenido que estudiar el modelo de Dicke, que permite sustituir las interacciones entre partículas por interacciones efectivas con un campo cuántico. Esto da lugar a una nueva técnica analítica que permite resolver de forma exacta sistemas cuánticos con interacciones de muy largo alcance en el formalismo canónico. Se ha demostrado por tanto que los modelos de muy largo alcance pertenecen a una nueva familia de sistemas exactamente resolubles de forma analítica.

En la segunda parte del trabajo se ha pasado a emplear la técnica presentada para estudiar el modelo de Ising cuántico, obteniendo expresiones para el parámetro de orden equivalentes a las que se obtienen empleando la teoría de campo medio. Como el método desarrollado es exacto, se demuestra que la teoría de campo medio es una técnica exacta para los modelos de muy largo alcance. Hasta este punto el trabajo es extensión los resultados de Alessandro Campa y colaboradores [7] al caso cuántico.

Concretando la forma de las interacciones entre espines se ha estudiado primero el modelo ferromagnético en campo transversal. Se ha calculado el diagrama de fases en función del campo externo y la temperatura, obteniendo una expresión analítica para la línea crítica. Este modelo ya había sido estudiado empleando técnicas numéricas por Gonzalez Lazo y colaboradores [4], quienes obtuvieron resultados que coinciden con los obtenidos analíticamente en el trabajo. En este modelo se ha comprobado también que las correlaciones decaen potencialmente con la distancia, incluso fuera de la criticidad, característico de las interacciones de largo alcance.

Si bien no se pueden estudiar interacciones antiferromagnéticas de largo alcance de forma general, debido a la aparición de frustración, se han definido un tipo de interacciones antiferromagnéticas no frustradas y se ha estudiado el modelo resultante. En el límite de temperatura nula se ha explorado el estado fundamental del modelo al variar los parámetros, encontrando un diagrama de fases con transiciones de primer y segundo orden que se ha estudiado de forma analítica. Esto supone una diferencia de comportamiento cualitativa respecto del modelo equivalente con interacciones de corto alcance, que además no es exactamente resoluble.

Este trabajo abre otras posibles líneas de investigación. Por una parte queda pendiente la obtención de resultados analíticos rigurosos en el modelo antiferromagnético para  $\alpha \neq 0$ , aunque los resultados numéricos indican que la solución es equivalente al caso  $\alpha = 0$ . Por otra parte, en el régimen de muy largo alcance, la aparición en el diagrama de fases de una transición de primer orden abre la puerta a la aparición de inequivalencia de formalismos. Deberá tenerse en cuenta para seguir profundizando en el estudio de las interacciones antiferromagnéticas no frustradas, apenas tratadas previamente en la literatura.

Por último, queda abierto el estudio de otros modelos empleando la técnica presentada. Se ha comprobado que podrían abordarse algunos modelos con interacciones combinadas de corto y largo alcance, lo que podría dar lugar a muy diversa fenomenología. A lo largo del proyecto se ha planteado también la posibilidad de estudiar sistemas de fermiones interactuantes, llegando a la conclusión de que la técnica permite resolver modelos de Fermi-Hubbard, pero no otros como la cadena de Kitaev. Estos resultados pueden ser la base para el estudio de otros modelos con interacciones de largo alcance, así como de los límites de aplicabilidad de la técnica.

## Referencias

- [1] J. Román-Roche, V. Herráiz-López y D. Zueco, «Exact solution for quantum strong long-range models via a generalized Hubbard-Stratonovich transformation», [arXiv:2305.10482 \[quant-ph\]](#) (2023).
- [2] D. Mukamel, «Statistical Mechanics of systems with long range interactions», [AIP Conf. Proc.](#) **970**, 22 (2008).
- [3] J. W. Britton, B. C. Sawyer, A. C. Keith, C.-C. J. Wang, J. K. Freericks, H. Uys, M. J. Biercuk y J. J. Bollinger, «Engineered two-dimensional Ising interactions in a trapped-ion quantum simulator with hundreds of spins», [Nature](#) **484**, 489 (2012).
- [4] E. Gonzalez Lazo, M. Heyl, M. Dalmonte y A. Angelone, «Finite-temperature critical behavior of long-range quantum Ising models», [SciPost Phys.](#) **11**, 076 (2021).
- [5] N. Defenu, T. Donner, T. Macrì, G. Pagano, S. Ruffo y A. Trombettoni, «Long-range interacting quantum systems», [arXiv:2109.01063 \[cond-mat.quant-gas\]](#) (2021).
- [6] B. Minea y E. Paltanea, «Laplace’s method for the case of a countably infinite set of global maximum points», [Bull. math. Soc. Sci. Math. Répub. Social. Roum.](#) **58**, 81 (2015).
- [7] A. Campa, A. Giansanti y D. Moroni, «Canonical solution of classical magnetic models with long-range couplings», [J. Phys. A Math. Gen.](#) **36**, 6897 (2003).
- [8] P. Kirton, M. M. Roses, J. Keeling y E. G. Dalla Torre, «Introduction to the Dicke Model: From Equilibrium to Nonequilibrium, and Vice Versa», [Adv. Quantum Technol.](#) **2**, 1800043 (2019).
- [9] Y. K. Wang y F. T. Hioe, «Phase Transition in the Dicke Model of Superradiance», [Phys. Rev. A](#) **7**, 831 (1973).
- [10] J. Román-Roche y D. Zueco, «Effective theory for matter in non-perturbative cavity QED», [SciPost Phys. Lect. Notes](#) (2022).
- [11] E. Demidenko, «Applications of Symmetric Circulant Matrices to Isotropic Markov Chain Models and Electrical Impedance Tomography», [Adv. Pure Math.](#) **07**, 188 (2017).
- [12] G. B. Mbeng, A. Russomanno y G. E. Santoro, «The quantum Ising chain for beginners», [arXiv:2009.09208 \[quant-ph\]](#) (2020).
- [13] S. Gammelmark y K. Mølmer, «Phase transitions and Heisenberg limited metrology in an Ising chain interacting with a single-mode cavity field», [New J. Phys.](#) **13**, 053035 (2011).
- [14] A. A. Ovchinnikov, D. V. Dmitriev, V. Y. Krivnov y V. O. Cheranovskii, «Antiferromagnetic Ising chain in a mixed transverse and longitudinal magnetic field», [Phys. Rev. B](#) **68**, 214406 (2003).
- [15] F. Schwabl, [Statistical Mechanics](#) (Springer Berlin Heidelberg, Heidelberg, Germany, 2006).
- [16] J. Simon, W. S. Bakr, R. Ma, M. E. Tai, P. M. Preiss y M. Greiner, «Quantum simulation of antiferromagnetic spin chains in an optical lattice», [Nature](#) **472**, 307 (2011).
- [17] M. Reis, [Fundamentals of magnetism](#) (Academic Press, Boston, USA, 2013).