

# Cálculo de la concurrencia para el modelo de Heisenberg

(*Calculation of concurrence to the Heisenberg model*)

R. Castellanos, R. Franco y J. Silva-Valencia<sup>1</sup>

*Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia*

Recebido em 26/9/2009 ; Aceito em 26/1/2010; Publicado em 15/2/2011

La concurrencia es una cantidad que nos permite medir el grado de entrelazamiento que presenta un sistema cuántico y se puede calcular a partir de la matriz densidad reducida. En este artículo mostramos explícitamente como calcular la concurrencia para una cadena finita de espines  $s = 1/2$  descrita por el modelo de Heisenberg anisotrópico. Nosotros mostramos que para cadenas finitas la concurrencia tiene un máximo en el punto crítico  $\Delta = 1$ , la cual es una de las principales características en el límite termodinámico. Se mostró que es posible obtener información sobre las transiciones de fase del modelo calculando la concurrencia para cadenas de por lo menos 12 sitios.

**Palavras-chave:** concurrencia, entrelazamiento cuántico, modelo de Heisenberg.

The concurrence is a quantity that allows us to measure the entanglement of a quantum system and can be calculated from the reduced density matrix. In this paper we show explicitly how to calculate the concurrence for a finite chain of spins  $s = 1/2$  described by the anisotropic Heisenberg model. We show that for finite chains the concurrence has a maximum at the critical point  $\Delta = 1$ , which is the main feature in the thermodynamic limit. We observe that it is possible to obtain information about quantum phase transitions of the model by calculating the concurrence for chains of at least 12 sites.

**Keywords:** concurrence, quantum entanglement, Heisenberg model.

## 1. Introducción

El entrelazamiento cuántico (EC) es la característica más intrigante de la teoría cuántica, el sorprendente comportamiento de los estados entrelazados había sido acentuado por Einstein, Podolsky y Rosen en 1931 [1] quienes consideraron un sistema de dos partículas en un estado entrelazado y mostraron que las suposiciones de localidad, realismo y completés de la mecánica cuántica fallan al dar una descripción física consistente de los sistemas cuánticos. Varios años después, Bell encontró sus famosas desigualdades [2] con las cuales mostró que el entrelazamiento no puede ser consistente con ninguna teoría local que contenga variables ocultas. Desde entonces el entrelazamiento se ha vuelto un recurso de mucho valor en la teoría de información y comunicación cuántica.

Debido al isomorfismo existente entre los espacios de Hilbert de un espín ( $|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle$ ) y los de un qubit ( $|0\rangle, |1\rangle$ ), se ha considerado que los sistemas de espines serían la implementación natural de los dispositivos de la teoría cuántica de información [3].

Los progresos experimentales en la síntesis de nuevos materiales han permitido observar que las

propiedades magnéticas de muchos materiales reales pueden ser descritas mediante cadenas o escaleras de espines débilmente interactuantes, cuyas propiedades físicas pueden ser explicadas usando el modelo de Heisenberg o generalizaciones de este [4]. Estas cadenas o escaleras de espines presentan propiedades inusuales debidas a la presencia de fuertes fluctuaciones cuánticas y efectos topológicos, ejemplos de estas propiedades inusuales son los valles en las curvas de magnetización y las transiciones de fase cuánticas a temperatura cero que están caracterizadas por el cambio en las propiedades del estado base causada por modificaciones en los parámetros de interacción presentes en el Hamiltoniano.

El entrelazamiento es una cualidad de la mecánica cuántica, que corresponde a la presencia de correlaciones no locales entre diferentes partes de un sistema que no pueden ser explicadas de manera clásica. Un estado puro de un par de sistemas cuánticos se llama entrelazado si no es factorizable (es decir, si el estado total no puede escribirse como producto de estados de una partícula), y un estado mezclado es entrelazado si no se puede representar como la mezcla de estados puros factorizables [5].

<sup>1</sup>E-mail: jsilvav@unal.edu.co.

Dada la importancia del concepto de entrelazamiento en la teoría cuántica de la información (QIT) [6–8], la atención de este campo ha sido puesta, en los últimos años, en los sistemas estudiados en la materia condensada, donde es posible observar estados entrelazados. Además se ha encontrado un especial vínculo entre el entrelazamiento cuántico y las transiciones de fase cuánticas, las cuales describen cambios en el estado fundamental de un sistema a temperatura cero ( $T = 0$ ), cuando se varía algún parámetro en el Hamiltoniano del sistema, como el campo magnético, el parámetro de anisotropía u otros. Wu [9] mostró de forma general que las transiciones de fase cuánticas son señaladas por medio de una discontinuidad en alguna medida del entrelazamiento en un sistema cuántico. Algunas de las medidas del entrelazamiento son por ejemplo la concurrencia y la entropía de von Neumann. Aunque el entrelazamiento es una nueva herramienta para estudiar las transiciones de fase cuánticas en diversos modelos, aún no se sabe por que algunas medidas del entrelazamiento son útiles y otras no.

Wootters and Hill [5, 10] definieron la concurrencia de un sistema bipartita de la siguiente forma

$$C = C(S) = \max(0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}), \quad (1)$$

donde  $\lambda_i$  son los autovalores en orden decreciente de la matriz

$$S = \rho_r(\sigma_y \otimes \sigma_y \rho_r^* \sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (2)$$

donde  $\rho_r$  es la matriz densidad reducida del sistema considerado y  $\sigma_y$  es la matriz de Pauli usual en 2 dimensiones. Varios autores han encontrado que la concurrencia y/o otras medidas del entrelazamiento son herramientas útiles para identificar transiciones de fase en diversos sistemas correlacionados ya que estas cantidades presentan valores extremos y/o singularidades en los puntos críticos [11–16]. Para los sistemas correlacionados de muchos cuerpos, cómo cuantificar apropiadamente el entrelazamiento y cuál es su conexión intrínseca con las transiciones de fase cuánticas han sido preguntas tanto desafiantes como fundamentales en la última década. Proximamente se espera que el entrelazamiento cuántico juegue un papel importante en la determinación de las transiciones de fase cuánticas, ya que éste aportará a un conocimiento más profundo de éste tipo de fenómenos.

En este artículo calculamos de manera explícita la concurrencia para cadenas finitas de espines descritas por el modelo de Heisenberg unidimensional. Al mostrar cómo se calcula la concurrencia para este modelo se contribuye con la formación de los estudiantes de física de pregrado y postgrado, ya que el concepto de entrelazamiento y sus medidas está siendo ampliamente abordado en los cursos de mecánica cuántica y ya es incluido en algunos textos [17].

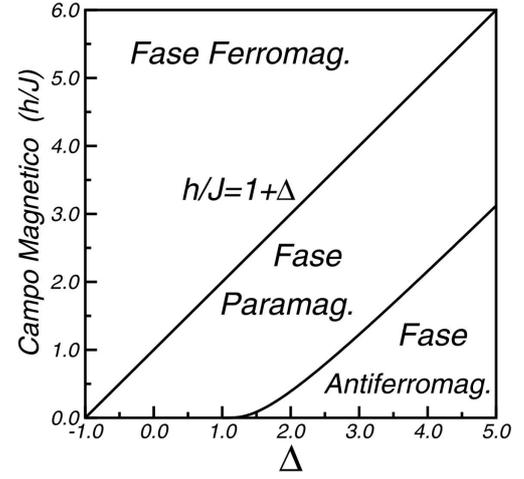


Figura 1 - Diagrama de fases del modelo de Heisenberg. Aquí  $h$  es un campo magnético externo.

El artículo está organizado de la siguiente manera, en la sección 2 mencionamos el modelo de Heisenberg, las diferentes fases que presenta y su diagrama de fases cuando un campo magnético externo es aplicado. En la sección 3 mencionamos las simetrías del modelo de Heisenberg, discutimos cómo determinar el Hamiltoniano para una cadena de espines, calculamos la matriz densidad reducida explícitamente para un sistema conformado por dos espines, calculamos la concurrencia y finalmente mostramos cómo se puede incrementar el tamaño del sistema. En las secciones 4 y 5 se presentan los resultados para la concurrencia en función del parámetro de anisotropía para redes de varios tamaños y las conclusiones del artículo respectivamente.

## 2. El modelo

Nosotros estudiaremos una cadena de espines  $s = 1/2$  interactuantes, descrita por el modelo de Heisenberg cuyo Hamiltoniano viene dado por

$$H = J \sum_i \left[ \left( \hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y \right) + \Delta \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z \right], \quad (3)$$

donde  $\hat{S}_i^x$ ,  $\hat{S}_i^y$  y  $\hat{S}_i^z$  denotan los operadores de espín y la suma es sobre todos los sitios de la cadena, la cual tiene una longitud  $L$ .  $J$  es conocida como la integral de intercambio y  $\Delta$  es el parámetro de anisotropía, ambos son parámetros de interacción propios del modelo. El Hamiltoniano (3) también puede ser escrito en términos de los operadores  $\hat{S}_i^+ = \hat{S}_i^x + i\hat{S}_i^y$  y  $\hat{S}_i^- = \hat{S}_i^x - i\hat{S}_i^y$  así

$$H = J \sum_i \left[ \frac{1}{2} \left( \hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \text{h.c.} \right) + \Delta \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z \right]. \quad (4)$$

El modelo de Heisenberg para espines  $s = \frac{1}{2}$  en una dimensión (1D) tiene solución exacta usando el anstaz de Bethe. En la Fig. 1 presentamos el diagrama de fases para el modelo de Heisenberg cuando un campo

magnético  $h$  es aplicado, vemos que el modelo presenta tres fases: ferromagnética, paramagnética y antiferromagnética. Se observa que el campo crítico para el cual se da la transición ferro-para viene dado por  $h_c/J = \Delta + 1$  y que en ausencia de campo magnético el modelo tiene una fase paramagnética para  $-1 < \Delta < 1$ , una fase ferromagnética para  $\Delta < -1$  y una fase antiferromagnética para  $\Delta > 1$  (ver Fig. 1). En la fase paramagnética los espines apuntan aleatoriamente en todas las direcciones (ver Fig. 1(a)) conduciendo a magnetización total igual a cero. En la fase ferromagnética todos los espines apuntan en la misma dirección y la magnetización total por sitio es  $1/2$  (ver Fig. 1(b)). En la fase antiferromagnética los espines vecinos están ordenados antiparalelamente y la magnetización total es igual a cero (ver Fig. 1(c)).

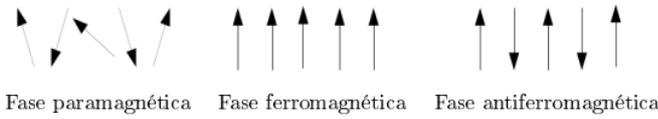


Figura 2 - Configuración de espines en una fase paramagnética (a), ferromagnética (b) y antiferromagnética (c).

### 3. Diagonalización exacta, matriz densidad y concurrencia

La expresión “diagonalización exacta” es usada para describir un número de diferentes aproximaciones las cuales conducen a resultados numéricamente exactos para sistemas de redes finitas, diagonalizando directamente la representación matricial del Hamiltoniano del sistema en una base apropiada de muchas partículas. El proceso más simple, pero a su vez el que más consume tiempo y memoria es la diagonalización completa de la matriz Hamiltoniana que permite calcular todas las propiedades deseadas del sistema. Sin embargo, la dimensión de la base para un sistema cuántico fuertemente interactuante crece exponencialmente con el tamaño del sistema, así que es posible tratar a lo más con unos pocos sitios.

A continuación mostramos cómo se calculan la matriz densidad reducida y el entreveramiento para una cadena finita de espines a través de la diagonalización exacta del Hamiltoniano del modelo. Vamos a considerar un bloque con dos espines y analizaremos su entreveramiento con el resto de la cadena que actúa como un baño térmico. Aquí se usan condiciones de frontera periódicas sobre el sistema y por lo tanto este es invariante bajo traslaciones, es decir que podemos escoger cualquier par de vecinos más cercanos como el bloque con dos espines.

Es posible mostrar que el Hamiltoniano (3) conmuta con la componente  $z$  del operador espín total ,

$$S_t^z = \sum_i S_i^z, \text{ es decir}$$

$$[H, S_t^z] = 0$$

Esto significa que el Hamiltoniano puede ser dividido en sectores o bloques con valores fijos del operador  $S_t^z$  y que además los autoestados de  $H$  son a la vez autoestados del operador  $S_t^z$ .

La base del espacio de Hilbert de cada sitio de la red está compuesta por los siguientes kets  $|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle$ , es decir el espacio de Hilbert de cada sitio tiene dimensión 2, por lo tanto  $2^L$  será la dimensión del espacio de Hilbert para una red con  $L$  sitios. La representación matricial de los operadores  $S^z$  y  $S^+$  para cada sitio de la red, en la base escogida es

$$S^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} |\downarrow\rangle & |\uparrow\rangle \\ -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad S^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} |\downarrow\rangle & |\uparrow\rangle \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

donde la primera y segunda columna de las matrices están asignadas a los estados  $|\downarrow\rangle$  y  $|\uparrow\rangle$  respectivamente. Considerando lo anterior, el Hamiltoniano para una cadena de dos sitios está dado por la expresión

$$H = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} |\downarrow\downarrow\rangle & |\downarrow\uparrow\rangle & |\uparrow\downarrow\rangle & |\uparrow\uparrow\rangle \\ J\Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J\Delta & 2J & 0 \\ 0 & 2J & -J\Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J\Delta \end{pmatrix}.$$

Debido a la simetría del modelo explicada anteriormente es posible sectorizar por espín en la base escogida, asignando por ejemplo, al sector de espín  $S^z = 0$  las columnas y filas de los estados  $|\downarrow\uparrow\rangle$  y  $|\uparrow\downarrow\rangle$ , así el Hamiltoniano de dos sitios puede ser organizado en subbloques con espín definido  $-2, 0$  y  $2$  (ver (3.)), así

$$H = \left( \begin{array}{c|c|c} -2 & & \\ \hline & 0 & \\ \hline & & 2 \end{array} \right),$$

note que las entradas de la matriz que no están en los subbloques con espín definido son iguales a cero, lo cual hace que la matriz sea esparsa y permite diagonalizarla mas facilmente.

Ahora mostraremos como calcular el Hamiltoniano, la matriz densidad y la concurrencia para una cadena de cuatro espines  $s = \frac{1}{2}$  antiferromagnética tipo Heisenberg con condiciones de frontera periódicas y considerando  $J = 1$  y  $\Delta = 1$ , es decir isotropica. La cadena de espines será dividida en dos bloques cada uno con dos espines inicialmente, como se aprecia en la Fig. 3. El espacio de Hilbert correspondiente a cada bloque tendrá dimensión 4 y su base será la base de ocupación  $|\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle$ . De esta manera podemos escribir (3) para el caso periódico como

$$\begin{aligned}
H_{12} = & (H_1 \otimes H_2) + (H_1 \otimes 1_2) + (S_2^z \otimes S_1^z) + \\
& \frac{1}{2}[S_2^\dagger \otimes S_1^- + \text{h.c.}] + (S_1^z \otimes S_2^z) + \\
& \frac{1}{2}[S_1^\dagger \otimes S_2^- + \text{h.c.}], \quad (5)
\end{aligned}$$

donde  $H_i$ ,  $S_i^z$  y  $S_i^\dagger$  con  $i = 1, 2$  es el Hamiltoniano, el operador de proyección de espín en el eje  $z$  y el operador escalera respectivamente para cada espacio compuesto por dos sitios. En la ecuación (5) "h.c" significa el conjugado hermitico.

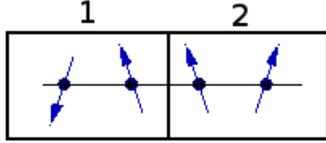


Figura 3 - Esquema de creación de bloques para un tamaño de  $L = 4$  sitios, la numeración marca el espacio correspondiente.

En el Hamiltoniano (5) tenemos el producto directo entre operadores de dos espacios de Hilbert cada uno de dimensión 4, el resultado será un espacio de Hilbert de dimensión 16 y los operadores de este nuevo espacio serán matrices de  $16 \times 16$  como es de esperarse ya que la dimensión aumenta de forma exponencial con el número de sitios. Los elementos de matriz de los operadores del nuevo espacio se calculan de la siguiente forma: si  $A$  (dimensión  $m = 4$ ) es la representación matricial de un operador del espacio 1 y  $B$  (dimensión  $n = 4$ ) es la representación matricial de un operador del espacio 2, entonces la matriz  $D$  que es el producto directo de  $A$  y  $B$  tiene una dimensión  $mn$  y elementos [18]

$$D_{\alpha\beta} = A_{ij}B_{kl}, \quad (6)$$

donde

$$\alpha = n(i-1) + k, \quad \beta = n(j-1) + l. \quad (7)$$

Se puede notar también que el producto de un elemento de  $S_1^z$  en el subbloque con espín 2, con un elemento de  $S_2^z$  en el subbloque con espín -2, aparecerá en el subbloque con espín 0 del Hamiltoniano del espacio de Hilbert resultante del producto directo entre los espacios 1 y 2. Esto se evidencia, por ejemplo, en el siguiente caso

$$|\uparrow\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\uparrow\rangle = |\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow\rangle,$$

es decir el espacio resultante tendrá igualmente una estructura de bloques con los sectores de espín siendo obtenido a partir de los sectores de espín de los subbloques de  $S_1^z$  y  $S_2^z$ .

De la solución exacta del modelo de Heisenberg obtenida por medio del ansatz de Bethe [19], se sabe que el estado fundamental se caracteriza por tener

$S^z = 0$ , por tanto al considerar el Hamiltoniano (3) y sus simetrías encontramos que no es necesario diagonalizar toda la matriz Hamiltoniana (dimensión 16), solo necesitamos el sector con espín  $S_i^z = 0$ , el cual tiene una dimensión de 6 para cadena con 4 espines. El Hamiltoniano para el sector  $S_i^z = 0$  para  $J = 1$  y  $\Delta = 1$  es

$$H_{12}(S^z = 0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

Al diagonalizar (8) obtenemos que el estado fundamental tiene una energía  $E_0 = -2.0$  y su autoestado es

$$\psi = \begin{pmatrix} -0.2887 \\ 0.5773 \\ -0.2887 \\ -0.2887 \\ 0.5773 \\ -0.2887 \end{pmatrix} \begin{matrix} \psi_{\downarrow\downarrow, \uparrow\uparrow} \\ \psi_{\downarrow\downarrow, \uparrow\downarrow} \\ \psi_{\downarrow\downarrow, \uparrow\downarrow} \\ \psi_{\downarrow\downarrow, \uparrow\downarrow} \\ \psi_{\downarrow\downarrow, \uparrow\downarrow} \\ \psi_{\uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow} \end{matrix}, \quad (9)$$

donde los  $\psi_{ij}$  que aparecen al lado derecho representan las entradas numéricas reales de  $\psi$ .

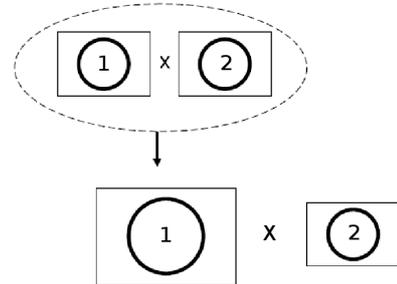


Figura 4 - Iteración en el método de DE para la extensión en longitud del sistema, los espacios 1 y 2 formarán el nuevo espacio 1, aumentando así el tamaño del sistema.

Para calcular el entrelazamiento cuántico es necesario calcular la matriz densidad reducida ( $\rho_r$ ) para un bloque con dos espines, esta matriz se puede hallar a partir del estado fundamental del sistema  $\psi$  por medio de la expresión

$$\rho_{ii'} = \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j}, \quad (10)$$

donde  $\psi_{ij}$  son las entradas numéricas del estado  $\psi$  con  $i$  ( $j$ ) corriendo a través de los estados del bloque (baño térmico), considerando que  $[H, S_i^z] = 0$  tenemos que  $[\rho_r, S_i^z] = 0$ , por lo tanto la matriz densidad puede ser escrita de forma matricial como

$$\rho_r = \begin{pmatrix} u^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_1 & z & 0 \\ 0 & z^* & w_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u^- \end{pmatrix},$$

cuyos elementos de matriz pueden ser expresados en términos de las funciones de correlación de espín [13] de la forma

$$\begin{aligned} u^\pm &= \frac{1}{4} \pm \langle S_i^z \rangle + \langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle, \\ z &= \langle S_i^x S_{i+1}^x \rangle + \langle S_i^y S_{i+1}^y \rangle, \\ w_1 &= w_2 = \frac{1}{4} - \langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle \end{aligned}$$

A continuación mostramos cómo calcular algunos elementos de la matriz densidad a partir de la ec. (9) haciendo uso de la ec. (10),

$$\begin{aligned} u^+ &= \rho_{\Downarrow, \Downarrow} = \sum_j \psi_{\Downarrow j} \psi_{\Downarrow j} = \psi_{\Downarrow, \uparrow} \psi_{\Downarrow, \uparrow} \\ &= 0.0833, \end{aligned}$$

que significa que el elemento  $\rho_{\Downarrow, \Downarrow}$  estará ubicado en la fila correspondiente al estado  $|\Downarrow\rangle$  y en la columna del estado  $|\Downarrow\rangle$ . También para un elemento fuera de la diagonal tendremos

$$\begin{aligned} z &= \rho_{\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow} = \sum_j \psi_{\uparrow\downarrow j} \psi_{\uparrow\downarrow j} \\ &= \psi_{\uparrow\downarrow, \uparrow} \psi_{\uparrow\downarrow, \uparrow} + \psi_{\uparrow\downarrow, \downarrow} \psi_{\uparrow\downarrow, \downarrow} = -0.33 \end{aligned}$$

De esta manera obtenemos la matriz densidad reducida del bloque con dos sitios que es

$$\rho_r = \begin{pmatrix} 0.0833 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.416 & -0.333 & 0 \\ 0 & -0.333 & 0.416 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0833 \end{pmatrix}.$$

Ahora usando la matriz densidad anterior y la matriz de Pauli  $\sigma_y$  vamos a calcular la matriz

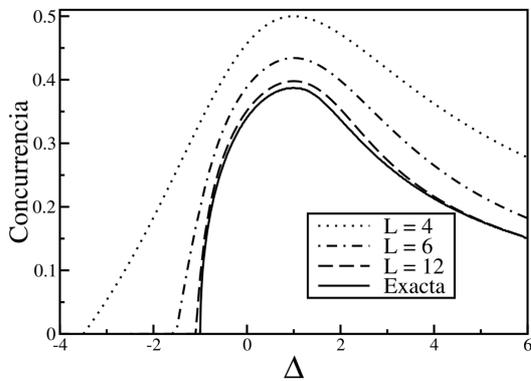


Figura 5 - Concurrencia en función del parámetro de anisotropía  $\Delta$ .

$$S = \rho_r (\sigma_y \otimes \sigma_y \rho_r^* \sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (11)$$

y obtenemos

$$S = \begin{pmatrix} 0.00694 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.28472 & -0.2777 & 0 \\ 0 & -0.2777 & 0.28472 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.00694 \end{pmatrix},$$

diagonalizando esta matriz nosotros obtenemos los autovalores  $\lambda_1 = 0.56249$ ,  $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = 0.006944$ ; con los cuales se calcula concurrencia que viene dada por [13]

$$\begin{aligned} C = C(S) &= \max(0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}) \\ &= 0.499999 \end{aligned}$$

Este es valor de la concurrencia para  $\Delta = 1$  para una red de cuatro sitios, esta cantidad mide el entrelazamiento entre un bloque de dos sitios y el resto del sistema que actúa como un baño térmico, éste tipo de entrelazamiento es de tipo local porque exhibe las correlaciones entre un estado local y la otra parte del sistema. Al variar el parámetro de anisotropía, los autovalores de la matriz densidad cambian y por tanto la medida del entrelazamiento  $C(S)$  cambia, este hecho nos permite estudiar las transiciones de fase en el modelo, determinando como cambia  $C(S)$  en función del parámetro anisotropía  $\Delta$ .

Hasta aquí hemos calculado la concurrencia para una red de cuatro sitios, sin embargo la mecánica cuántica nos dice que la energía del estado fundamental en un pozo de potencial infinito depende del tamaño, por tanto al aumentar el tamaño de la red los valores de energía, los autovalores de la matriz densidad y la concurrencia van a cambiar, este efecto es comunmente denominado efecto de tamaño finito. Por tanto es necesario incrementar el tamaño de la red para obtener resultados más reales, para esto es necesario definir nuevos operadores que contengan toda la información de la red anterior y denominarlos como los operadores del nuevo espacio 1, así

$$\begin{aligned} H_{12} &\rightarrow H_1 \\ S_{12}^\dagger &= 1_1 \otimes S_2^\dagger \rightarrow S_1^\dagger \end{aligned}$$

En la Fig. (4) se muestra la manera esquemática de realizar el aumento en la longitud del sistema. Por tanto el primer espacio queda con las propiedades de una cadena de cuatro espines con una dimensión de 16. Note que el operador  $S_1^-$  se puede hallar simplemente como el adjunto del operador  $S^+$ .

Usando rutinas de diagonalización estandar es posible repetir el procedimiento anterior hasta alcanzar aproximadamente una longitud de 12 sitios, sin embargo es posible alcanzar redes mayores usando algoritmos como el Lanczos o el Davidson para obtener el estado fundamental de matrices grandes [20, 21].

## 4. Resultados y Discusión

En la Fig. 5 se muestra el comportamiento de la concurrencia  $C$  en función del parámetro de anisotropía  $\Delta$  para cadenas de espines de tamaños  $L = 4, 6, 12$ . Se observa que para  $L = 4$  la concurrencia es cero hasta que  $\Delta = -3.5$ , a partir de este valor es diferente de cero, note que un comportamiento similar se observa para  $L = 6$  y  $L = 12$ , pero el valor de  $\Delta$  para el cual deja de ser cero aumenta. En la Fig. 6(a) observamos la evolución del valor de  $\Delta$  donde deja de ser cero la concurrencia en función de  $1/L$ , en la figura vemos que efectivamente  $\Delta$  tiende a  $-1$  valor para el cual en ausencia de campo magnético tiene lugar la transición de la fase ferromagnética a la fase paramagnética (ver Fig. 2).

También observamos en la Fig. 5 que la concurrencia crece hasta alcanzar un máximo, el cual ocurre en  $\Delta = 1$  para todos los tamaños de redes finitas  $L = 4, 6, 12$ . A partir de este máximo la concurrencia decrece monotonamente en función del parámetro de anisotropía.

La curva continua en la Fig. 5 corresponde a la concurrencia exacta, la cual se puede obtener a partir de las funciones de correlación [6]

$$C = 2\max(0, |G^{xx} + G^{yy} - G^{zz} - \frac{1}{4}|), \quad (12)$$

donde  $G^{\alpha\alpha} = \langle S^\alpha \otimes S^\alpha \rangle$ , ( $\alpha = x, y, z$ ), estas funciones de correlación fueron calculadas usando el ansatz de Bethe [12] para una cadena de  $L = 1280$  sitios. Vemos que la concurrencia deja de ser cero en  $\Delta = -1$  indicando la transición ferro-para en el modelo de Heisenberg, lo cual verifica la tendencia observada para redes finitas (ver Fig. 6(a)). Cuando  $\Delta = 1$  la energía del estado base es  $1/4 - \ln 2$  [19] y se satisface que

$$\langle S_i^x S_{i+1}^x \rangle = \langle S_i^y S_{i+1}^y \rangle = \langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle = (1/4 - \ln 2)/3,$$

con esto obtenemos que  $C = 0.3862$ , que es el valor máximo de la concurrencia.

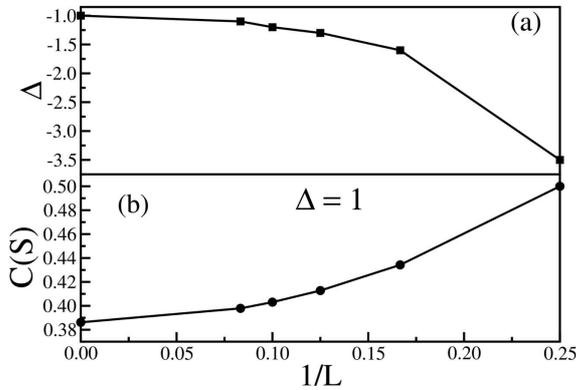


Figura 6 - Variación del punto inicial de la concurrencia (a) y del valor de la concurrencia en  $\Delta = 1$  respecto a  $1/L$  (b).

Para una cadena de  $L = 4$  sitios se mostro que la concurrencia para  $\Delta = 1$  es  $C = 0.499999$ , el cual es su valor máximo para esta cadena. En la Fig. 5 vemos que a medida que el tamaño de la red aumenta la posición del máximo de la concurrencia no cambia, pero el valor de la concurrencia en este punto disminuye tendiendo hacia su valor en infinito  $C = 0.3862$ , la evolución del valor máximo de la concurrencia a medida que el tamaño de la cadena crece puede observarse en la Fig. 6(b).

Para una cadena de  $L = 12$  se obtuvo que para anisotropías mayores a  $\Delta = -1.01$  la concurrencia es diferente de cero, que discrepa en 1.0% del valor en el límite termodinámico que es  $\Delta = -1$ . El valor máximo de la concurrencia para esta cadena es  $C = 0.398$ , para el cual obtuvimos un error de 3.06% al compararlo con el valor en el límite termodinámico. Observamos como para este modelo se puede obtener información sobre el entrecruzamiento y las transiciones de fase aún estudiando cadenas finitas de hasta  $L = 12$  sitios.

Otra cantidad que nos permite estimar el entrecruzamiento cuántico en un sistema es la entropía de formación, la cual puede calcularse a partir de la concurrencia por medio de la expresión

$$S_f = -x \log_2(x) - (1-x) \log_2(1-x) \quad (13)$$

donde  $x = 1/2 + \sqrt{1-C^2}/2$ .

En la Fig. 7 presentamos el comportamiento de la entropía de formación en función del parámetro de anisotropía  $\Delta$  para redes finitas de tamaños  $L = 4, 6, 12$ . La curva continua corresponde a la entropía de formación exacta obtenida a partir de las funciones de correlación. En esta figura observamos que la entropía de formación tiene un máximo en  $\Delta = 1$  para todos los tamaños de red, lo cual indica la transición de la fase antiferromagnética a la fase paramagnética. Al igual que en el caso de la concurrencia se observa que a medida que crece el tamaño de la red, el valor del parámetro de anisotropía para el cual la entropía de formación deja de ser cero va tendiendo hacia  $\Delta = -1$  donde tiene lugar la transición de fase ferro-para.

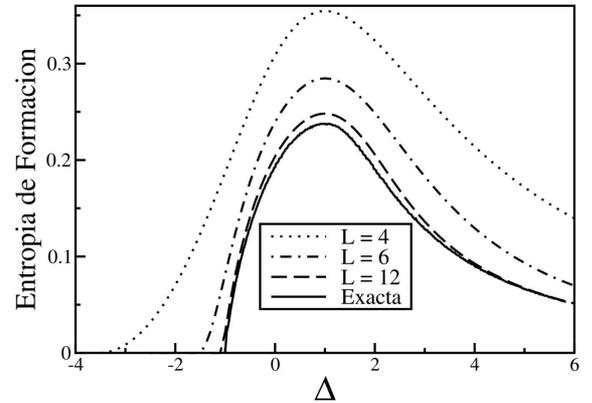


Figura 7 - Entropía de formación en función  $\Delta$ .

## 5. Conclusiones

En este artículo hemos mostrado explícitamente como calcular la concurrencia, la cual es una de las principales medidas del entrelazamiento cuántico. Este tópico es de gran actualidad y ya se incluye en varios libros de texto de mecánica cuántica, por lo que mostrar como calcular medidas del entrelazamiento como la concurrencia es fundamental y representa el principal aporte de este artículo.

El estudio del entrelazamiento cuántico en cadenas de espines  $1/2$  descritas por el modelo de Heisenberg nos permite ganar información acerca de las transiciones de fase cuánticas presentadas por estos sistemas y compararlas con los resultados conocidos en el límite termodinámico. Nosotros mostramos que para cadenas finitas la concurrencia tiene un máximo en el punto crítico  $\Delta = 1$  indicando la transición antiferro-para. También se observó el punto crítico  $\Delta = -1$  donde la concurrencia deja de ser cero puede ser obtenido a partir de un análisis de efectos de tamaño finito.

Aunque los modelos estudiados ya tienen solución exacta, pequeñas variaciones en éstos conducen a modelos no solubles analíticamente, es allí donde un estudio numérico como el realizado sería fundamental para obtener información sobre los nuevos modelos.

## Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por la División de Investigación Bogotá (DIB) de la Universidad Nacional de Colombia.

## Referencias

- [1] A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, *Physical Review* **47**, 777 (1935).
- [2] J.S. Bell, *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1987).
- [3] E. Plekhanov, A. Avella and F. Mancini, *Physica B* **403**, 1282 (2008).
- [4] D.C. Cabra, M.D. Grynberg, A. Honecker, P. Pujol, *Condensed Matter Theories*, vol. 16, Nova Science Publishers, New York, 2001.
- [5] S. Hill and W. K. Wootters, *Physical Review Letters* **78**, 5022 (1997)
- [6] L. Amico, *et al.*, *Review of Modern Physics* **80**, 517 (2008).
- [7] C T González-H, R Franco and J Silva-Valencia, *Eur. J. Phys.* **31**, 681 (2010).
- [8] J. J. Mendoza-Arenas, R. Franco, and J. Silva-Valencia, *Phys. Rev. A* **81**, 062310 (2010).
- [9] L.-A. Wu, *et al.*, *Physical Review Letters* **93**, 250404 (2004).
- [10] W.K. Wootters, *Physical Review Letters* **80**, 2245 (1998)
- [11] Yan Chen *et al.*, *New Journal of Physics* **8**, 97 (2006).
- [12] Shi-Jian Gu, Guang Shan-Tian and Hai-Qing Lin, *Chin. Phys. Lett.* **24**, 2737 (2007).
- [13] Shi-Jian Gu, H.Q. Lin and Y.Q. Li, *New Journal of Physics* **8**, 61 (2006).
- [14] Shi-Jian Gu, H.Q. Lin and Y.Q. Li *Physical Review A* **68**, 042330 (2003).
- [15] Shi-Jian Gu, G.S. Tian and H.Q. Lin *Physical Review A* **71**, 052322 (2005).
- [16] Shi-Jian Gu, Y.Q. Li and H.Q. Lin, *Physical Review Letters* **93**, 086402 (2004).
- [17] Stephen Gasiorowicz, *Quantum Physics* (John Wiley y Sons, Inc, New York, 2003).
- [18] George B. Arfken and Hans J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists* (Academic Press, New York, 1995).
- [19] H.A. Bethe, *Z. Physics* **71**, 205 (1931).
- [20] E.R. Davidson. *Computational Physics* **7**, 519 (1993).
- [21] G.P. Zhang. *Computational Physics Communications* **109**, 27 (1997).