



Entropía de Von Neumann y El Modelo de Heisenberg XXZ

Von Neumann Entropy and the Heisenberg Model XXZ

M. Arciniegas-Alvarez^a, R. Franco^a, J. Silva-Valencia^a

^aDepartamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, A.A 5997, Bogotá -Colombia

Recibido 23 de Oct. de 2007; Aceptado 2 de sep. 2009; Publicado en línea 30 de oct. 2009

Resumen

La entropía de Von Neumann 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. Considerando que cada una de las fases del modelo de Heisenberg tiene diferente grado de entrelazamiento, nosotros calculamos la entropía de Von Neumann para pequeñas de cadenas de espines, encontrando que esta cantidad es adecuada para describir las transiciones de fase que tienen lugar en el modelo. Un estudio de los efectos de tamaño finito fue realizado al comparar nuestros resultados con los obtenidos a partir de la solución exacta.

Palabras Clave: Entropía de Von Neumann, Entrelazamiento, Transición de Fase.

Abstract

The Von Neumann entropy is a quantity which allow us measure the degree of entanglement that presents a quantum system and it is possible to calculate from the reduced density matrix. Considering that each of the phases of the Heisenberg model have a different degree of entanglement, we calculate the Von Neumann entropy for small spin chains, finding that this quantity is adequate to describe the phase transitions that take place in the model. An study of the facts of finite size was realized to compare our results with the obtains from the exact solution.

Keywords: Von Neumann entropy, entanglement, Phase Transition.

©2009. Revista Colombiana de Física. Todos los derechos reservados.

1. Introducción

Los progresos experimentales en la síntesis de nuevos materiales ha dado la oportunidad de observar la física de baja dimensionalidad predicha teóricamente, tal como los valles en las curvas de magnetización. Este tipo de sistemas presentan propiedades inusuales debidas a la presencia de fuertes fluctuaciones cuánticas y efectos topológicos. En la literatura se observa que son muchos los materiales reales, cuyas propiedades magnéticas pueden ser descritas mediante el estudio de cadenas de espines o escaleras de espines debilmente interactuantes; a su vez la descripción de estas cade-

nas o escaleras se realiza usando el modelo de Heisenberg o generalizaciones de este[1]. El hamiltoniano del modelo de Heisenberg describe un sistema de espines interactuante y viene dado por

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

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. J es conocida como la integral de intercambio y Δ es el parámetro de anisotropía, ambos son parámetros de interacción propios del modelo. El modelo de Heisenberg para espines $s = \frac{1}{2}$ en 1D tiene una fase antiferromagnética

para $\Delta < -1$, una fase antiferromagnética para $\Delta > 1$ y una fase paramagnética entre $-1 < \Delta < 1$.

Las transiciones de fase cuánticas (TFC's) a temperatura cero están caracterizadas por el cambio en las propiedades del estado base de un sistema de muchos cuerpos causada por modificaciones en los parámetros de interacción incluidos en el hamiltoniano del mismo, este tipo de fenómenos han sido ampliamente observados en sistemas fuertemente correlacionados. Debido a la naturaleza cuántica de estos sistemas, el entreveramiento cuántico calculado por medio de la entropía de von Neumann se muestra como una herramienta muy útil con este fin [2]-[3]. Para los sistemas correlacionados de muchos cuerpos, cómo cuantificar apropiadamente el entreveramiento y cuál es su conexión intrínseca con las TFC's han sido preguntas tanto desafiantes como fundamentales por mucho tiempo. Con lo anterior, se espera que el entreveramiento cuántico juegue un papel importante en las TFC's, ya que éste aportará a un conocimiento más profundo este tipo de fenómenos.

En este trabajo calcularemos la entropía de von Neumann para cadenas finitas de espines y compararemos los resultados con los obtenidos en el límite termodinámico, analizaremos los efectos de tamaño finito y determinaremos cual es el tamaño límite para el cual los resultados son aceptables.

2. Resultados y Discusión

A continuación mostramos como se calculan la matriz densidad reducida y el entreveramiento para una cadena finita de espines. Nosotros consideramos un bloque con dos espines y analizamos su entreveramiento con el resto de la cadena que actúa como un baño térmico. Aquí usamos 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. También es posible mostrar que el hamiltoniano (1) conmuta con el operador $S_{total}^z = \sum_i S_i^z$. Esto significa que el hamiltoniano puede ser dividido en sectores o bloques con valores fijos del operador S_{total}^z .

A continuación mostramos de manera explicita, como se calcula el entreveramiento para una cadena de Heisenberg isotrópica ($J = 1$, $\Delta = 1$) con cuatro espines $s = \frac{1}{2}$. 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

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

Considerando el hamiltoniano (1) y la representación matricial anterior, nosotros hallamos el sector con espín $S_{total}^z = 0$ del hamiltoniano de una cadena con 4 espines, dado por

$$H(L=4, S_{total}^z=0) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -3 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & -3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

De la solución exacta del modelo de Heisenberg sabemos que el estado fundamental se caracteriza por tener $S^z = 0$, por lo tanto diagonalizando (2) nosotros encontramos que el estado fundamental tiene una energía $e_0 = -\frac{1}{4}(3 + 2\sqrt{3})$ y su autoestado es

$$\psi_0 = \frac{1}{2\sqrt{3}(2+\sqrt{3})} \begin{pmatrix} 1 \\ -2-\sqrt{3} \\ 1+\sqrt{3} \\ 1+\sqrt{3} \\ -2-\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \psi_{\downarrow\downarrow,\uparrow\uparrow} \\ \psi_{\downarrow\uparrow,\uparrow\downarrow} \\ \psi_{\downarrow\uparrow,\uparrow\downarrow} \\ \psi_{\uparrow\downarrow,\downarrow\uparrow} \\ \psi_{\uparrow\downarrow,\downarrow\uparrow} \\ \psi_{\uparrow\uparrow,\downarrow\downarrow} \end{matrix}, \quad (3)$$

donde los ψ_{ij} que aparecen al lado derecho representan las entradas numéricas reales de ψ_0 .

El espacio de Hilbert de un bloque con dos espines vecinos tiene dimensión 4 y su base es $|\downarrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\uparrow\uparrow\rangle$. Entonces la matriz densidad reducida para un bloque con dos espines, se puede hallar a partir del estado fundamental del sistema con cuatro espines ψ_0 por medio de la expresión $\rho_{ii'} = \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j}$, donde ψ_{ij} son las entradas numéricas del estado ψ_0 con i (j) corriendo a través de los estados del bloque (baño térmico). A continuación mostramos como se calcula un elemento de la matriz densidad a partir de (3) $\rho_{\downarrow\downarrow,\downarrow\downarrow} = \sum_j \psi_{\downarrow\downarrow j} \psi_{\downarrow\downarrow j} = \psi_{\downarrow\downarrow,\uparrow\uparrow} \psi_{\downarrow\downarrow,\uparrow\uparrow} = \frac{1}{12(2+\sqrt{3})}$, que significa que el elemento $\rho_{\downarrow\downarrow,\uparrow\uparrow}$ estará ubicado en la fila correspondiente al estado $|\downarrow\downarrow\rangle$ y en la columna del estado $|\uparrow\uparrow\rangle$. De esta manera obtenemos la matriz densidad reducida del bloque con dos sitios que es

$$\rho_r = \frac{1}{12(2+\sqrt{3})} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 11+6\sqrt{3} & -2(5+3\sqrt{3}) & 0 \\ 0 & -2(5+3\sqrt{3}) & 11+6\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

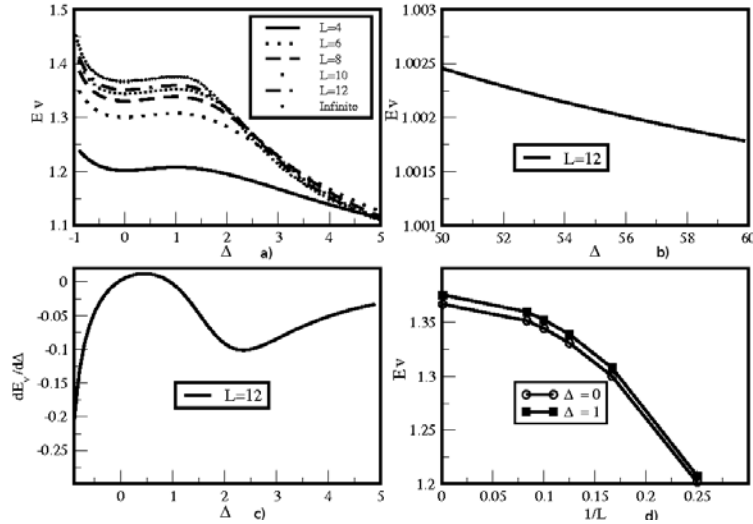


Figura 1. El entreveramiento local (arriba-izquierda) en función del parámetro Δ , tendencia del entreveramiento para valores grandes de Δ (arriba-derecha), la primera derivada para un tamaño $L = 12$ (abajo-izquierda), variación del entreveramiento en los puntos Δ críticos con respecto a $1/L$ (abajo-derecha).

diagonalizando esta matriz nosotros obtenemos los autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ y λ_4 ; con los cuales calculamos la entropía de Von Neumann[2] que viene dada por

$$E_v = -\text{tr}(\rho_r \log_2 \rho_r) = -\lambda_1 \log_2 \lambda_1 - \lambda_2 \log_2 \lambda_2 - \lambda_3 \log_2 \lambda_3 - \lambda_4 \log_2 \lambda_4,$$

la entropía de Von Neumann E_v mide el entreveramiento entre un bloque de dos sitios y el resto del sistema actuando como un baño térmico.

Por tanto se espera que al variar el parámetro de anisotropía, los autovalores de la matriz densidad cambien y de esta manera analizar el comportamiento de E_v en función del parámetro Δ y estudiar las transiciones de fase en el sistema.

En la Figura (1) se muestran los resultados obtenidos. En la grafica (1a) mostramos la evolución de la entropía de Von Neumann E_v en función del parámetro de anisotropía Δ para cadenas de espines de tamaños $L = 4, 6, 8, 10, 12$. La gráfica teórica muestra el entreveramiento calculado a partir de las funciones de correlación del modelo de Heisenberg, obtenidas usando el ansatz de Bethe [2] para una cadena de $L = 1280$ sitios. Para cadenas finitas se observa un rapido incremento en la entropía de von Neumann con el número de sitios y se muestra que al aumentar el tamaño de la cadena se obtienen valores cada vez más cercanos a los del límite termodinámico.

En la grafica (1b) se observa que cuando Δ tiende a infinito, $E_v \rightarrow 1$ de forma monótona para $\Delta > 1$, en este límite el valor promedio de la función de cor-

relación longitudinal $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$ teóricamente adquiere un valor mínimo de $-\frac{1}{4}$ y produce un valor de entropía local igual a 1 en el límite termodinámico. Por otra parte, cuando Δ decrece las interacciones entre las otras componentes de espín vienen a ser más relevantes y aunque no se produzca una contribución nula de la correlación longitudinal se observa un incremento en E_v . Teóricamente, E_v adquiere un máximo en $\Delta = 1$, donde el estado base de energía es $1/4 - \ln 2$ [4] en el límite termodinámico, en este punto se satisface $\langle S_i^x S_{i+1}^x \rangle = \langle S_i^y S_{i+1}^y \rangle = \langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$ que conduce a un valor de $E_v = 1,3759$ [2], en este punto se obtuvo que éste máximo local permanecía en $\Delta = 1$ para todos los tamaños de red, específicamente para una cadena de $L = 12$ sitios $E_v = 1,3597$ que discrepa en 1.17% del valor en el límite termodinámico. La presencia de este máximo es debida al hecho de que la función de correlación longitudinal es reducida muy rápidamente cuando Δ comienza a acercarse a cero. Por lo tanto, uno de los puntos críticos del modelo, $\Delta = 1$ es reconocido como el punto maximal del entreveramiento local. Además, se observa que $E_v(\Delta)$ es continuo y derivable en este punto. Lo anterior no sucede cuando Δ viene a ser negativo donde la correlación antiferromagnética longitudinal es cada vez más apantallada por las contribuciones de la correlación transversales, en este punto se observa una singularidad en $E_v(\Delta)$. Ésto debido principalmente a la degenerancia infinita del estado base en $\Delta = -1$.

Finalmente, tomando los valores de E_v en los puntos $\Delta = 0$ y $\Delta = 1$ se puede apreciar una extrapolación

realizada hacia el límite termodinámico, donde se observa que aún para valores relativamente pequeños (es este caso $L = 12$) se observa una tendencia clara hacia el valor de la entropía en el límite termodinámico.

3. Conclusiones

La entropía de Von Neumann como una medida del entrelazamiento resulta ser una herramienta muy útil ya que permite observar transiciones de fase en el modelo de Heisenberg utilizando tamaños de red muy pequeños,

para un tamaño de red de $L = 12$ se obtuvo una discrepancia del 1.17% con respecto al valor en el límite termodinámico.

Referencias

- [1] Julián Jimenez Rincon, *Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad: Aplicación al Modelo XXZ Inhomogéneo*. Tesis de pregrado. Universidad Nacional de Colombia, (2005).
- [2] Shi-Jian Gu y colaboradores, arxiv:quant-ph/0511243v1 (2005).
- [3] Yan Chen y colaboradores, *New Journal of Physics* **8**, 97 (2006).
- [4] H. A. Bethe, *Z. Physics* **71**, 205 (1931).