

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE

FACULTAD DE CIENCIA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

# Simulación Numérica de Modelos de espín Clásico y Cuántico

Tesis para optar al grado de  
Doctor en Ciencia con Mención en Física

David A. Zambrano Mora

Profesor guía: Dr. Guillermo Palma

Profesores Comisión: Dr. Gonzalo Gutiérrez  
Dr. Mario Molina  
Dr. Juan Escrig  
Dr. Norman Cruz

SANTIAGO – CHILE

Octubre 2011

# Simulación Numérica de Modelos de espín Clásico y Cuántico

David A. Zambrano Mora

Este trabajo de Graduación fue preparado bajo la supervisión del profesor guía Dr. Guillermo Palma, del Departamento de Física de la Universidad de Santiago de Chile, y ha sido aprobado por los miembros de la comisión calificadora

Dr. Guillermo Palma	.....
Dr. Gonzalo Gutiérrez	.....
Dr. Mario Molina	.....
Dr. Juan Escrig	.....
Dr. Norman Cruz	.....

.....  
Director Departamento de Física

## *Agradecimientos*

Primero que nada, quiero agradecer a la universidad de Bern, Suiza por facilitarnos su cluster computacional para realizar nuestras simulaciones.

Quisiera agradecer a los profesores que integran el comité, gracias por todos sus comentarios y disposición. A mi tutor y profesor guía de este trabajo de tesis, el Dr. Guillermo Palma por su increíble disposición y apoyo. Desde un principio, cuando me invito a trabajar con él estando yo aún en el pregrado, ha mostrado su gran apoyo, de no ser por él no habría decidido seguir estudios de post grado. A mi compañero Alejandro Riveros que siempre estuvo ahí cuando se le necesitaba, logramos sacar adelante varios problemas con su necesidad de demostrar todo rigurosamente y con mi facilidad a la hora de escribir algún código para resolver el problema de manera numérica, sin duda un gran complemento y amigo.

A mis seres más cercanos, muchas gracias por todo, a mi madre, padre y hermana por su apoyo constante e incondicional, a pesar de ya no estar los 4 juntos en la misma casa siempre los siento cerca, y en particular a mi pareja, Cecilia Cáceres por estar siempre a mi lado, incluso en los momentos difíciles.

También quisiera agradecer a mis amigos, los mismos de siempre, Rodrigo, Felipe, Cynthia y Mario, Roxana, Matias y Nicolas, Gino (pollo) y Guachoto. Siempre se puede contar con ustedes ya sea para juntarnos a hacer música, o al menos eso intentamos jejeje, o para jugar unas manos de poker, All in!, o simplemente para juntarnos a compartir un trago y una buena charla. Gracias por todos los buenos momentos que hemos pasado juntos.

Sin duda, haber llegado hasta este punto de mi vida sin ustedes habría sido muy difícil, gracias a todos.

DZM



# Resumen

Este trabajo de tesis se centra principalmente en adquirir los conocimientos necesarios, para poder generar algoritmos eficientes que permitan simular modelos de espín. Por ello, separaremos el problema en dos partes:

- Simulación de modelos de espín clásico y,
- simulación de modelos de espín cuántico.

Para el caso de modelos de espín clásico tipo Ising, se han usado algoritmos de “update” colectivo combinados con técnicas de Teoría de Grupo de Renormalización en la red, esto ha permitido el cálculo numérico de los exponentes críticos principales  $\nu$  y  $\eta$ . Por otro lado, para modelos de espín cuántico como el modelo de Heisenberg y el modelo  $XY$ , se ha usado el método “Loop Cluster Algorithm” y estimadores mejorados para simular dichos sistemas y así obtener curvas de magnetización en función de la temperatura. Estas curvas han sido comparadas con datos experimentales y expresiones analíticas aproximadas, obtenidas mediante Teoría de Perturbación Quiral, esto ha permitido calcular numéricamente el exponente crítico magnético  $\beta$  para los modelos estudiados.

Con el desarrollo de estas herramientas es posible estudiar fenómenos tales como:

- Invarianza de escala.
- Universalidad.
- Clases de equivalencia.
- Universalidad generalizada.
- Fenómeno de “crossover”.

Además se discutirán conceptos tales como:

- “Critical slowing down”.

- Función densidad de probabilidad.
- Transiciones de fase cuánticas a temperatura cero.
- Transiciones de fase exóticas tipo “liquid spin”.

En particular, es de interés estudiar el fenómeno de “Crossover”, el cual es mostrado de manera experimental en curvas de magnetización, en ellas se muestra un cambio en el exponente crítico magnético  $\beta$  a medida que la temperatura varia desde  $T = 0$  hacia  $T = T_c$ , donde  $T_c$  representa la temperatura de cambio de fase ferro-antiferromagnética. Este particular comportamiento de la magnetización ilustra que la invarianza de escala se hace presente no solo en las cercanías de  $T_c$ , sino que además está presente en todo el rango  $[0, T_c]$ . En la cercanía de  $T = 0$  esta invarianza de escala es debida a la existencia de una transición de fase cuántica a temperatura cero, lo cual se extiende a temperaturas  $0 \leq T < T_c$ .

*We barely remember  
what came before  
this precious moment,  
choosing to be here  
right now.  
Hold on,  
stay  
inside...*





# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Simulación de modelos Magnéticos de espín “clásico”</b>	<b>7</b>
2.1. Modelo de Ising . . . . .	7
2.1.1. Solución al Modelo de Ising . . . . .	8
2.2. Algoritmos locales y colectivos . . . . .	11
2.3. Grupo de renormalización en la red: El metodo CARG . . . . .	13
2.4. Escalamiento de tamaño Finito y Cumulante de Binder . . . . .	18
2.5. Flujo de la PDF bajo RGT y su trayectoria renormalizada . . . . .	21
2.6. Colapso de la PDF . . . . .	22
<b>3. Simulación de modelos Magnéticos de espín cuántico</b>	<b>25</b>
3.1. Modelo de Heisenberg de espín 1/2 anisotrópico en $d = 2$ . . . . .	26
3.1.1. Simulación vía algoritmos de cluster . . . . .	26
3.2. Modelo de Heisenberg de espín 1/2 isotrópico . . . . .	34
3.2.1. Magnetización y Winding number temporal . . . . .	35
3.2.2. Observables mejorados . . . . .	37
3.2.3. Función densidad de probabilidad mejorada para la magnetización . . . . .	39
3.2.4. Comportamiento a bajas temperaturas del parámetro de orden . . . . .	42
<b>4. Conclusiones generales y problemas abiertos</b>	<b>47</b>
<b>Apéndices</b>	
<b>A. Loop Cluster Algorithm</b>	<b>51</b>
A.1. Plaquetas activas . . . . .	52
A.2. Clasificar las plaquetas activas . . . . .	53
A.3. Definir Break ups . . . . .	53
A.4. Identificar y actualizar los Clusters . . . . .	54

**B. Teorema de Mermin-Wagner** **57**

**C. Papers de interes** **59**

# Capítulo 1

## Introducción

Las transiciones de fase son de vital importancia en nuestra vida diaria, ya sea a la hora de congelar agua para obtener cubos de hielo o cuando queremos magnetizar algún metal para construir algún artefacto tecnológico. Se pueden clasificar según el comportamiento de la energía libre<sup>1</sup> termodinámica como función de alguna otra variable termodinámica. De acuerdo al criterio de Ehrenfest, la derivada discontinua de menor orden de la energía libre define el orden de la transición de fase. Sin embargo, las transiciones de 1<sup>er</sup> y de 2<sup>do</sup> orden son las más comunes. Las de 1<sup>er</sup> orden se pueden definir como aquellas que involucran un calor latente, por ejemplo a medida que la temperatura del agua desciende de manera infinitesimal durante la transición de fase líquido-sólido, una cantidad de calor distinta de cero (calor latente) es emitida, esta pérdida de energía es evidencia del dramático reordenamiento que sufre a nivel molecular el agua. La estructura del agua pasa de una fase desordenada (líquido) a una fase ordenada (sólido) caracterizada por una estructura cristalina tipo FCC o “Face Centered Cubic”. Por otro lado, las transiciones de fase de 2<sup>do</sup> orden o transiciones de fase continuas, se caracterizan por presentar una discontinuidad en la tasa de cambio de alguna cantidad global del sistema mientras que la cantidad global en si cambia de manera suave y continua. Por ejemplo la transición de fase ferro-antiferromagnética que experimenta el Hierro<sup>2</sup> a la temperatura de Curie ( $T_c = 1043$  °K) se caracteriza por tener una discontinuidad, por ejemplo

---

<sup>1</sup>La energía libre termodinámica se puede definir como la energía interna del sistema menos una cantidad de energía que no puede realizar trabajo, esta última viene dada por la entropía del sistema.

<sup>2</sup>Al igual que el Cobre o el Zinc.

en la susceptibilidad magnética definida como

$$\chi = \left( \frac{\partial m}{\partial B} \right)_T, \quad (1.1)$$

donde  $B$  representa un campo magnético externo mientras que  $m$  es la magnetización del sistema. La susceptibilidad magnética mide la correlación entre distintas moléculas en la red cristalina del metal. Mientras que esta cantidad es discontinua para  $T = T_c$ , una cantidad global como la magnetización se mantiene como una función suave y continua de la temperatura[1]. En este caso, la estructura del metal pasa de una fase ordenada ( $T < T_c$ ) que en el límite  $B \rightarrow 0$  presenta una magnetización espontánea no nula, a una fase desordenada que no presenta magnetización espontánea, en ausencia de algún campo externo  $B$ .

En este trabajo de tesis, sólo se estudiarán transiciones de fase de 2<sup>do</sup> orden, en particular, se consideraran modelos numéricos capaces de representar la fenomenología asociada a este tipo de transiciones. Una característica importante de estas transiciones de fase es la invarianza de escala asociada a cantidades físicas en el punto crítico  $T = T_c$ , esto lleva a describir las cantidades física mediante una ley de potencia. Se define el parámetro de orden  $\phi$  como la cantidad física cuyo comportamiento es una función suave y continua distinta de cero para  $T < T_c$  mientras que para  $T > T_c$  toma el valor cero. A medida que se baja la temperatura hacia  $T_c$ , las fluctuaciones térmicas que sufren las cantidades físicas que representan el sistema en el punto crítico, desestabilizan su comportamiento llevando a que el sistema rompa la simetría del parámetro de orden en favor de minimizar la energía del mismo<sup>3</sup>. Para sistemas magnéticos, el parámetro de orden es la magnetización  $m$ . En una vecindad de  $T_c$  se representa como

$$m \sim (T_c - T)^\beta, \quad (1.2)$$

de igual manera, susceptibilidad magnética se describe en el punto crítico como

$$\chi \sim (T - T_c)^{-\gamma}, \quad (1.3)$$

las cantidades  $\beta$  y  $\gamma$  se conocen como exponentes críticos, estas cantidades adimensionales caracterizan por completo el comportamiento de las cantidades físicas que describen el sistema durante la transiciones de fase de 2<sup>do</sup> orden.

Una gran cantidad de sistemas físicos, como por ejemplo, transiciones ferro- y antiferromagnéticas, <sup>3</sup>He super fluido, superconductores a baja temperatura, etc, pueden ser descritos

---

<sup>3</sup>Para una discusión más a fondo sobre fenómenos críticos, ver [1].

durante la transición de fase por los mismos exponentes críticos. Este fenómeno se conoce como Universalidad. Sistemas definidos en la misma dimensión  $d$  cuyos parámetros de orden tienen la misma dimensión  $D$ , pertenecen a la misma clase de equivalencia cuando comparten el mismo comportamiento crítico descrito por sus exponentes críticos. Es más, a pesar de que las fuerzas intermoleculares subyacentes responsables de la transición de fase tienen una longitud de escala bien definida, las estructuras que generan no la poseen [1]. Otra característica de este fenómeno es el “colapso” de la Función Densidad de Probabilidad (PDF) del parámetro de orden a una curva universal. La PDF es una función que describe la probabilidad de ocurrencia de una cierta variable aleatoria y se puede definir [2] como

$$P(m) = \frac{1}{Z} \int D\phi e^{-\beta\hat{H}(\phi)} \delta(A(\phi) - m) \quad (1.4)$$

donde  $A(\phi)$  es algún promedio y  $z = \int D\phi e^{-\beta\hat{H}(\phi)}$  es la función partición.

En [3, 4] se presenta una extensión del concepto de Universalidad denominado “Universalidad Generalizada”, que a diferencia de lo anterior, vincula sistemas que no necesariamente comparten la misma dimensionalidad, incluyendo sistemas no Hamiltonianos (disipativos) como un flujo turbulento confinado [5] con sistemas conservativos. La PDF del parámetro de orden de dichos sistemas colapsa en una curva universal, descrita en la clase de equivalencia a la cual pertenece el modelo  $2DXY$  clásico [2, 6].

K. Wilson [7] en 1971 formuló la teoría que permite estudiar estos fenómenos, denominada Teoría de Grupo de Renormalización (RG). La teoría RG se puede separar en dos ramas: Expansiones analíticas tipo “ $\epsilon$  expansion”, técnica que involucra cálculos analíticos de renormalización directamente a partir del Hamiltoniano del sistema, y su aplicación a la formulación en la red, conocida como teoría RG en la red, la cual implica resolver las ecuaciones de grupo de renormalización discretizadas, utilizando simulaciones numéricas los modelos de interés. Ambas apuntan a obtener información de su comportamiento del sistema en el punto crítico.

En el presente trabajo se utilizarán técnicas de grupo de renormalización en la red y simulaciones numéricas eficientes de dichos sistemas, las cuales serán descritas en el Capítulo 2. Sin embargo, las simulaciones numéricas en sistemas críticos tienen serias limitaciones debido al efecto llamado “critical slowing down”, efecto que provoca que el algoritmo sea incapaz de generar configuraciones estadísticamente independientes en un tiempo computacional razonable, de modo que promedios de los observables físicos resulten confiables (teorema cuasi-ergódico). Esto se debe a que el tiempo de decorrelación  $\tau$ , es una cantidad que diverge en el punto

crítico como  $\tau \sim \xi^z$ , con  $\xi$  como la longitud de correlación del sistema y  $z$ , el exponente crítico dinámico. Típicamente  $z$  es cercano a 2 para algoritmos de “update” local como “Metropolis”. Por otro lado, los algoritmos de colectivos o de cluster [8, 9] son ampliamente conocidos por disminuir dramáticamente el critical slowing down [1], los cuales poseen un exponente crítico dinámico  $z < 1$ .

El uso de estos algoritmos junto con técnicas de RG en la red ha llevado al desarrollo del método CARG –Cluster Algorithms Renormalization Group– [10, 11], basado en la propuesta original de Swendsen [12]. Esta técnica nos ha permitido disminuir los tiempos de simulación gracias a la reducción del critical slowing down, y por medio de técnicas de Grupo de Renormalización (RG) poder calcular con gran exactitud los valores de exponentes críticos para modelos de espín clásico. En [13] se conjetura que el colapso de la PDF a una “curva universal” esta asociado a efectos de invarianza de escala en el modelo de Ising en dimensión  $d = 2$ . Para estudiar dicha afirmación hemos aplicado el método CARG al modelo de Ising en dimensión  $d = 2$  obteniendo los exponentes críticos con alta precisión numérica. En conjunto con un estudio de la PDF de la magnetización para este modelo, se ha obtenido evidencia que sugiere un comportamiento universal de dicha distribución, la cual describiría también a un gran número de sistemas disímiles tal como ha sido evidenciado en [3, 4]. Sin embargo dicho comportamiento esta asociado efectos de tamaño finito de red [2, 6] y estadística extrema<sup>4</sup> [14], en lugar de invarianza de escala conjeturada originalmente en [13].

En un estudio reciente [15], se verificaron experimentalmente en materiales magnéticos<sup>5</sup> varios aspectos de importancia para sistemas críticos y aplicaciones de la teoría RG. Conceptos característicos como universalidad, clases de universalidad, simetría del parámetro de orden, interacciones relevantes e irrelevantes son discutidas e ilustradas en [15] con datos experimentales muy precisos. Dichos resultados evidencian la validez de la teoría RG y de los métodos numéricos descritos en [10, 11]. Además presentan varios resultados que sugieren un cambio en el exponente crítico  $\beta^6$  en la región comprendida entre  $T = 0$  y  $T_c$  –denominada región de crossover–. Dicho cambio no puede ser explicado por modelos clásicos como el modelo de Ising, por ejemplo, ya que este modelo solo posee un exponente crítico  $\beta$  para el parámetro de orden en toda la región  $[0, T_c]$ . Más aún, fenómenos de universalidad para  $T \rightarrow 0$  y fenómenos de crossover caracterizados por un cambio del exponente crítico en el comportamiento universal entre dos puntos fijos van más allá de la teoría de RG, lo cual motiva el desarrollo de nuevos

---

<sup>4</sup>Estadística relacionada a un parámetro con un acotado.

<sup>5</sup>Como Níquel FCC, Hierro y materiales con interacciones isotrópicas en dimensión  $d = 3$ , mas detalles en [15].

<sup>6</sup>Exponente que modela el comportamiento del parámetro de orden.

métodos para el estudio de estos fenómenos.

Este singular comportamiento de la magnetización, muestra que la invarianza de escala se hace presente no solo en las cercanías de  $T_c$ , sino que además está presente en todo el rango  $[0, T_c]$ , lo cual permite conjeturar que se produce un entrecruzamiento (overlap) entre la transición de fase cuántica a temperatura cero [16] y la transición de fase clásica a la temperatura  $T_c$ . Las transiciones de fase cuánticas ocurren cuando a temperatura cero el sistema sufre un cambio de alguno de los parámetros del hamiltoniano de modo que se produce por ejemplo una discontinuidad (gap) entre el estado fundamental y el primer estado excitado, en las cuales las fluctuaciones cuánticas son las responsables de dicha transición.

Dada la complejidad que presenta el estudio de estos sistemas, es necesario desarrollar herramientas numéricas eficientes para la simulación de éstos, ya que debido al gran número de interacciones entre espines cuánticos y fenómenos de scattering que presentan, hacen prácticamente imposible la obtención de soluciones exactas por métodos teóricos convencionales.

Para analizar fenómenos a baja temperatura –régimen cuántico– y fenómenos de crossover [15], es necesario estudiar numéricamente modelos de espín cuántico como el modelo XY o Heisenberg. Es conocido en la literatura que estos modelos simplificados presentan transiciones de fase no triviales incluyendo una ferro-antiferromagnética para los cuales se conoce una gran cantidad de resultados analíticos como numéricos [17], por lo que resultan de particular interés.

Para ello se utilizará el método conocido como Loop Cluster Algorithm (LCA), propuesto originalmente por Wiese en [18], método que se estudiara en detalle en el Capítulo 3. Este método consiste principalmente en representar un modelo de espín cuántico en dimensión  $d$  como uno “clásico” en dimensión  $d+1$ . Mediante el uso de la fórmula de Trotter-Suzuki [19, 20] y la representación de la función partición vía una integral de camino es posible obtener la matriz de transferencia del sistema, la cual describe todas las posibles transiciones elementales del nuevo sistema en dimensión  $d+1$ . Para construir un algoritmo de este tipo es necesario construir un proceso de Markov donde estén garantizadas las condiciones de microreversibilidad y accesibilidad, de manera que el que las configuraciones de espines generadas por el algoritmo converjan a configuraciones distribuidas de acuerdo a la distribución de Gibbs.

Modelos como el de Heisenberg en  $d=2$  con una anisotropía en la dirección  $z$  ( $J_3 \neq J$ ) se caracterizan por tener dos puntos fijos de RG,  $T=0$  y  $T=T_c$ . Esta es una de las principales razones para esperar una transición de fase cuántica a temperatura cero, lo cual resulta de

interés para estudiar fenómenos de crossover presentado en [15]. no obstante, por el teorema de Mermin-Wagner [21], el modelo de Heisenberg isotrópico ( $J_3 = J$ ) para dimensión  $d \leq 2$  no presenta magnetización espontánea a temperatura finita distinta de cero. Esto ha sido corroborado numéricamente con resultados precisos en esta tesis. Junto al uso de observables mejorados, el método LCA se ha convertido en una poderosa herramienta para el estudio numérico de sistemas de espín cuántico en la región de crossover, además de su eventual extensión a teorías de gauge abelianas [22].

El objetivo principal del estudio de modelos de espín es adquirir el conocimiento necesario para eventualmente escribir algoritmos para modelos más complejos, que permitan explicar a cabalidad la fenomenología presentada. Modelos formulados para valores de espín distintos a  $s = 1/2$  descritos en redes con geometrías distintas, como por ejemplo una geometría tipo panal de abeja o “honeycomb” podrían ser de gran utilidad para explicar transiciones de fase exóticas como las descritas en [23, 24].

Con respecto al sistema de unidades, las temperaturas en general estarán expresadas en función de las unidades de  $\frac{J}{k_b}$  mientras que los tamaños de red  $L$  estarán dados en función del parámetro de red  $a$ , donde  $a$  tiene unidades de longitud y representa el espaciado de la red. En particular la magnetización se expresará de manera adimensional según

$$m = \frac{1}{N} \sum_{x \in \Lambda} s_x. \quad (1.5)$$

donde  $N$  es el número de espines en la red  $\Lambda$  y  $s_x$  es el valor de la variable de espín, por ejemplo para el modelo de Ising  $s_x = \pm 1$ .



# Capítulo 2

## Simulación de modelos Magnéticos de espín “clásico”

En este capítulo, se describirá el modelo de Ising, el cual es uno de los más sencillos para estudiar la interacción entre espines de un sistema magnético, que en dimensión  $d = 2$  muestra una transición de fase de 2<sup>do</sup> orden a temperatura finita. A pesar de estar descrito por variables de espín con valores discretos ( $s = \pm 1$ ), este modelo es considerado “clásico” ya que su descripción puede ser realizada completamente en términos de un Hamiltoniano diagonal.

Para comparar con los resultados obtenidos por el método propuesto por Swendsen [12] hemos calculado los exponentes críticos principales  $\nu$  y  $\eta$  mediante el método CARG [10, 11], resultados que se presentaran dentro de este capitulo.

Además se calculará la PDF de la magnetización para estudiar fenómenos de universalidad propuestos en [13] para el modelo de Ising en dimensión  $d = 2$ .

### 2.1. Modelo de Ising

A pesar de su aparente simplicidad, el modelo de Ising ha mostrado ser uno de los más importantes a la hora de estudiar transiciones de fase en la red, permitiendo el desarrollo de métodos y conceptos que se han aplicado también a sistemas ferromagnéticos, “lattice gas” y

“spin glass” entre otros. En una dimensión tiene solución analítica exacta, pero no presenta una transición de fase, mientras que en dos dimensiones este modelo tiene una transición de fase de 2<sup>do</sup> orden a la temperatura  $T \approx 2,269 J/k_b$ , solución debida a Lars Onsager [25] en 1944. En tres dimensiones este modelo presenta una transición de fase ferromagnética, sin embargo sólo tiene solución numérica.

El Hamiltoniano para este modelo se expresa en función de variables discretas  $s_i$  que sólo pueden tomar los valores  $\pm 1$ .

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \Lambda} s_i s_j - \mu B \sum_{i \in \Lambda} s_i. \quad (2.1)$$

La suma sobre  $\langle i, j \rangle$  se entiende a primeros vecinos,  $\Lambda$  es una red cuadrada de longitud  $L$  y espaciado  $a$ , que tomamos igual a 1; y  $B$  es un campo magnético externo y  $J$  es la constante de acoplamiento a primeros vecinos. Para  $J > 0$  el sistema favorece energéticamente el alineamiento de espines vecinos de igual signo, es decir, paralelos, lo cual resulta en un sistema ferromagnético, mientras que para  $J < 0$  el sistema resultante es anti-ferromagnético, favoreciendo las configuraciones de espines vecinos antiparalelos.

### 2.1.1. Solución al Modelo de Ising

El Hamiltoniano del modelo de Ising para una cadena ( $d = 1$ ) de  $L$  sitios unidimensional es el siguiente,

$$H = -J \sum_{i=1}^L s_i s_{i+1} - \mu B \sum_{i=1}^L s_i, \quad (2.2)$$

donde se consideran condiciones de borde periódicas, de manera que  $s_1 = s_{L+1}$ . Luego la función partición se expresa como,

$$Z = \sum_{\{s_i\}=\pm 1} e^{-\beta H} = \sum_{\{s_i\}=\pm 1} e^{\beta J(s_1 s_2 + \dots + s_L s_1) + \beta \mu B(s_1 + s_2 + \dots + s_L)} = \sum_{\{s_i\}=\pm 1} \prod_{i=1}^L e^{\beta J s_i s_{i+1} + \frac{1}{2} \beta \mu B (s_i + s_{i+1})}, \quad (2.3)$$

donde  $\{s_i\} = s_1, s_2, \dots, s_L$ . Además, se ha usado el hecho que  $\sum_{i=1}^L s_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L (s_i + s_{i+1})$  para una red periódica [26]. Luego es conveniente introducir la matriz de transferencia

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+\mu B)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-\mu B)} \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

cuyos elementos vienen dados por

$$\langle s_i | T | s_{i+1} \rangle = e^{\beta J s_i s_{i+1} + \frac{1}{2} \beta \mu B (s_i + s_{i+1})}. \quad (2.5)$$

De esta manera podemos escribir la función partición  $Z$  como

$$Z = \sum_{\{s_i\}=\pm 1} \prod_{i=1}^L e^{\beta J s_i s_{i+1} + \frac{1}{2} \beta \mu B (s_i + s_{i+1})} = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_L = \pm 1} \langle s_1 | T | s_2 \rangle \langle s_2 | T | s_3 \rangle \dots \langle s_L | T | s_1 \rangle \quad (2.6)$$

Como sabemos que el conjunto de los autoestados  $|s\rangle$  constituyen un conjunto completo, es decir,  $\sum_{s=\pm 1} |s\rangle \langle s| = 1$ , luego podemos reducir las  $L$  sumas que aparecen en (2.6) a

$$Z = \sum_{s_1 = \pm 1} \langle s_1 | T^L | s_1 \rangle = \text{Tr } T^L. \quad (2.7)$$

Ahora basta diagonalizar la matriz  $T$ , y usando propiedades de la traza obtenemos

$$Z = \text{Tr } T^L = \text{Tr } (UDU^\dagger)^L = \text{Tr } UU^\dagger D^L = \lambda_+^L + \lambda_-^L = \lambda_+^L \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^L \right], \quad (2.8)$$

donde  $D$  es una matriz diagonal con autovalores  $\lambda_\pm$  y  $U$  es la matriz unitaria de cambio de base. Los autovalores  $\lambda_\pm$  están definidos como sigue:

$$\lambda_\pm = e^{\beta J} \left[ \cosh(\beta \mu B) \pm \sqrt{\cosh^2(\beta \mu B) - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)} \right] \quad (2.9)$$

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} u_+ & 1 \\ 1 & u_- \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

con

$$u_\pm = e^{\beta J} (\lambda_\pm - e^{\beta(J \mp \mu B)}). \quad (2.11)$$

En el límite  $L \rightarrow \infty$  sólo el autovalor  $\lambda_+$  contribuye a las cantidades termodinámicas. Si calculamos, por ejemplo, la energía libre de Helmholtz por espín tenemos

$$f(\beta, B) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} F(\beta, B) = -\frac{1}{\beta} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln[Z] = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_+, \quad (2.12)$$

donde se ha considerado el hecho que  $\lim_{L \rightarrow \infty} (\lambda_-/\lambda_+)^L = 0$ . Luego

$$f(\beta, B) = -J - \frac{1}{\beta} \ln \left[ \cosh(\beta\mu B) + \sqrt{\cosh^2(\beta\mu B) - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)} \right]. \quad (2.13)$$

Finalmente el parámetro de orden viene dado por

$$\langle s \rangle = - \left( \frac{\partial f}{\partial(\mu B)} \right)_\beta = \frac{\sinh(\beta\mu B)}{\sqrt{\cosh^2(\beta\mu B) - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)}}. \quad (2.14)$$

Cuando hacemos tender  $B \rightarrow 0$  vemos que la Ecuación (2.14) también se hace cero, por lo tanto, el modelo de Ising en 1 dimensión no exhibe magnetización espontánea cuando el campo externo tiende a cero.

Sin embargo, en dimensión  $d = 2$  el modelo de Ising tiene solución exacta debida a Onsager [25], dicho modelo presenta una transición de fase a 2<sup>do</sup> orden a temperatura finita. Onsager encontró que la función partición para el modelo de Ising en dimensión  $d = 2$  puede ser mapeada a la función partición de un fermión libre bidimensional, permitiendo el cálculo del calor específico de manera exacta. Onsager obtuvo la siguiente expresión para la magnetización en función de la temperatura,

$$m = \left\{ 1 - \left[ \sinh \left( \log(1 + \sqrt{2}) \frac{T_c}{T} \right) \right]^{-4} \right\}^{\frac{1}{8}}. \quad (2.15)$$

Luego, el punto crítico para la transición de fase viene dado por la ecuación siguiente:

$$2 \tanh^2(2\beta_c J) = 1, \quad (2.16)$$

de aquí se obtiene que la temperatura crítica del modelo es

$$\beta_c J = 0,4406868 \quad \text{ó} \quad T_c = 2,269185 \frac{J}{k_b}. \quad (2.17)$$

Para una discusión completa sobre la solución del modelo de Ising en dimensión  $d = 2$ , ver el capítulo *The Onsager Solution* en [27].

## 2.2. Algoritmos locales y colectivos

Los algoritmos usados para simular sistemas de espín como el modelo de Ising, se pueden separar en 2 tipos: Algoritmos de update local y algoritmos de update colectivo. Un algoritmo de update local como Metropolis se caracteriza por realizar cambios en solo un espín en la red (local) buscando minimizar la energía, Metropolis se puede resumir en los siguientes pasos:

- Sea  $E_i$  la energía de la configuración de espines inicial antes del cambio local.
- Se realiza un cambio en el espín  $s_x$  perteneciente a la red  $\Lambda$ .
- Sea  $E_f$  la energía de la configuración de espines final después del cambio local.
- Si  $E_f < E_i$  se acepta el cambio en el espín  $s_x$ .
- Si  $E_f > E_i$  se acepta el cambio en el espín  $s_x$  con probabilidad  $p = e^{-\beta(E_f - E_i)}$ .

Esta dinámica permite obtener nuevas configuraciones considerando una minimización de la energía y aceptando configuraciones con mayor energía en función del factor de Boltzmann dado por la probabilidad  $p$ .

A diferencia de un algoritmo de update local, los algoritmos de cluster buscan representar de una manera más eficiente lo que ocurre físicamente en un sistema magnético cerca de una transición de fase. A medida que la longitud de correlación espacial se acerca al tamaño de la red  $L$ , cerca del punto crítico<sup>2</sup>, comienzan a aparecer clusters o dominios magnéticos de todos

<sup>1</sup>Todas las temperaturas presentadas en este trabajo de tesis se expresaran en unidades de  $\frac{J}{k_b}$ .

<sup>2</sup>En el limite de volumen infinito la longitud de correlación diverge.

los tamaños posibles, ver Figura 2.1, cada uno de estos clusters tiene la libertad de pasar de un mínimo al otro ( $\pm L$ ) sin un gasto energético durante la transición de fase. De esta manera, pensar un algoritmo colectivo en vez de uno local tiene una gran ventaja en convergencia numérica a la hora de simular sistemas magnéticos. Esto último además, se ve reflejado en una significativa disminución del critical slowing down [1], en comparación con algoritmos de update local.

El problema del “critical slowing down” yace principalmente en la rapidez con la cual el algoritmo es capaz de decorrelacionar una configuración de otra, en otras palabras, que tan rápido se puede generar configuraciones independientes para obtener promedios estadísticos confiables. En el caso de un algoritmo local como Metropolis los cambios realizados localmente sólo son percibidos por sus vecinos –primeros vecinos–. Como la actualización del sistema es realizada por un proceso estocástico, los cambios se propagan a través del sistema como un “camino aleatorio”, por lo que el número de pasos necesarios para propagar dicho cambio por toda la red va como  $\xi^2$ , donde  $\xi$  es la longitud de correlación espacial. En el punto crítico,  $\xi \sim L$ , por lo que esperamos que  $\tau \sim L^2$ , donde  $\tau$  es el tiempo de correlación. Esto es un gran problema para simulaciones de Monte Carlo dado que necesitamos que  $L$  sea grande, para obtener el límite termodinámico.

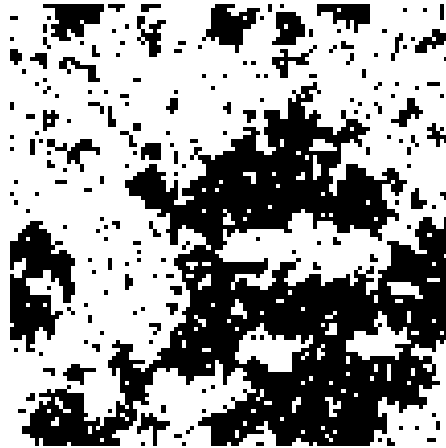


Figura 2.1: Configuración típica para el modelo de Ising en dimensión  $d = 2$  en una red cuadrada de tamaño  $L = 108$  con condiciones de borde periódicas, la configuración corresponde se obtuvo para la temperatura crítica. Se puede apreciar como existen clusters o dominios de todos los tamaños en la configuración. La dinámica usada para obtener esta configuración de espines esta dada por el algoritmo de Swendsen & Wang. [8]

En general,  $\tau(L) \sim L^z$  donde  $z$  es el exponente crítico dinámico del algoritmo. Usualmente tenemos  $z \approx 2$ , como ocurre con Metropolis. Para obtener algoritmos con  $z < 2$  es necesario usar algoritmos no locales o colectivos [1]. Para el caso de los algoritmos colectivos de Swendsen & Wang y Wolff [8, 9] tenemos  $z \sim 0,35$  y  $z \sim 0$ , respectivamente [28].

La dinámica de los algoritmos colectivos de multi o uni-clusters es esencialmente la misma, ambos generan un vínculo entre espines vecinos del mismo signo según el factor de Boltzman  $p = 1 - e^{-2\beta}$  [8]. El algoritmo de multi-cluster de Swendsen & Wang [8] recorre de manera ordenada toda la red determinando si existe o no un vínculo entre dos espines vecinos para luego etiquetar de manera eficiente todos los espines que pertenezcan a un mismo cluster, usando, por ejemplo el algoritmo de Hoshen-Kopleman [29] para asignar las etiquetas de manera efectiva. Luego cada cluster es actualizado con probabilidad 1/2. En cambio el algoritmo de uni-cluster de Wolff [9] escoje un sitio de manera aleatoria dentro de la red y a partir de ese sitio empieza a crecer un cluster usando la misma probabilidad  $p = 1 - e^{-2\beta}$  para luego ser actualizado con probabilidad 1, este procedimiento evita el problema del etiquetado de los clusters haciendo el algoritmo más sencillo.

## 2.3. Grupo de renormalización en la red: El metodo CARG

El método CARG –Cluster Algorithm Renormalization Group– [10, 11] tiene por objetivo obtener de manera numérica los exponentes críticos de modelos cuyas soluciones analíticas no se conocen, gracias a la autoconsistencia proporcionada por el estudio de tamaño finito –descrito en la Sección 2.4–, no es necesario conocimiento previo del modelo. Sin embargo, esta ventaja no es representada por el modelo de Ising, cuyo comportamiento esta ampliamente estudiado en dimensión  $d \leq 2$ , aún así se escogió este modelo para poder comparar los resultados obtenidos con los resultados de Swendsen [12] y para el posterior estudio de la PDF de la magnetización, estudio que permitirá discutir la hipótesis de “universalidad generalizada” que aparece en [3, 4].

Las características esenciales que se presentan en transiciones de fase de sistemas físicos, como invarianza de escala, universalidad y clases de equivalencia crítica, han sido exitosamente explicadas a través de la Teoría de Grupo de Renormalización, formulada originalmente por Wilson [7]. Sin embargo el concepto “universalidad generalizada” va mas allá de la teoría

propuesta por Wilson.

En [11] se cálculo la Función Densidad de Probabilidad o PDF del parámetro de orden para el modelo de Ising en dimensión  $d = 2$ . La forma de dicha curva es parte de la hipótesis propuesta en [3, 4], llamada “universalidad generalizada”, este fenómeno que vincula una gran gama de sistemas diferentes en dimensiones distintas y algunos incluso fuera del equilibrio. En este gran número de sistemas la PDF de una cantidad global –como la potencia consumida en un flujo turbulento confinado [5] o la magnetización en un sistema ferromagnético finito–, normalizada convenientemente a sus dos primeros momentos se deja representar por una sola curva [3, 4].

Luego nace la pregunta ¿son la invarianza de escala y la universalidad responsables que todos estos sistemas muestren el mismo comportamiento?. Dicha pregunta nos lleva a desarrollar un método combinando técnicas de grupo de renormalización –RG– en la red junto con algoritmos de cluster<sup>3</sup>, específicamente el algoritmo de U. Wolff [9], método que llamaremos CARG [10, 11] –Cluster Algorithm Renormalization Group–, el cual permite el cálculo con gran precisión de exponentes críticos de manera numérica. Para ello se calculan promedios en una trayectoria de renormalización para obtener la matriz linearizada de RG  $T_{\alpha\beta}^*$  vía una simulación directa del Hamiltoniano original. La conjetura de la existencia de la “curva universal” no está libre de controversia y ha sido el tema central de varias publicaciones [2, 6, 13, 14, 30–33]. Más aún, en [2] se ha mostrado que dicha curva corresponde a la PDF del modelo 2D-XY clásico sólo en el límite de temperatura cero.

El método propuesto por Swendsen [12] se explica brevemente como sigue. Consideremos un modelo de interacción de espines definido en una red cuadrada de espaciamiento  $a$  y tamaño lineal  $L$ , con condiciones de borde periódicas (PBC), donde  $a$  y  $L$  tienen unidades de longitud. Luego las variables de espín  $\sigma_i$  están definidas en cada sitio  $i$  de la red y el Hamiltoniano tiene la forma

$$H = \sum_{\alpha} K_{\alpha} S_{\alpha} , \quad (2.18)$$

donde cada  $S_{\alpha}$  es algún tipo de combinación de las variables de espín con el único requerimiento que se respete la invarianza translacional sujeta a las PBC, mientras que los  $K_{\alpha}$  representan la constante de interacción para dicha combinación de variables de espín. Por ejemplo, para el modelo de Ising con interacción a primeros vecinos tenemos  $K_1 = J$  y  $S_1 = \sigma_i \sigma_j$  donde los sitios  $i$  y  $j$  de la red son sitios vecinos.

---

<sup>3</sup>En la propuesta original [12] se usaron algoritmos de update local como Metropolis.



Para nuestro estudio se simuló el modelo de Ising con interacción a primeros vecinos en dos dimensiones y para el estudio RG se consideraron hasta 3 interacciones pares (primeros vecinos, segundos vecinos e interacción de 4 espines o interacción de plaquetas) más una interacción impar (un campo magnético externo débil). Los exponentes críticos se pueden obtener calculando los autovalores de la matriz linearizada RG  $T_{\alpha\beta}^*$ . Esta matriz se obtiene numéricamente del siguiente sistema de ecuaciones acopladas

$$\frac{\partial \langle S_\gamma^{(n)} \rangle}{\partial K_\beta^{(n-1)}} = \sum_\alpha \frac{\partial K_\alpha^{(n)}}{\partial K_\beta^{(n-1)}} \frac{\partial \langle S_\gamma^{(n)} \rangle}{\partial K_\alpha^{(n)}}, \quad (2.19)$$

donde los super-índices  $(n-1)$  y  $(n)$  denotan las cantidades en la red originales  $(n-1)$  de tamaño  $L$  y en la red renormalizadas  $(n)$  –después de una transformación de RG– de tamaño  $L/b^n$ , donde  $b$  es el parámetro de renormalización, Figura 2.2. Los promedios térmicos  $\langle F(\phi) \rangle$  se definen por la fórmula

$$\langle F(\sigma) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} F(\sigma) \exp(-H(\sigma)). \quad (2.20)$$

Las cantidades que aparecen en la Ecuación (2.19) se pueden obtener a través de las identidades

$$\frac{\partial \langle S_\gamma^{(n)} \rangle}{\partial K_\beta^{(n-1)}} = -\langle S_\gamma^{(n)} S_\beta^{(n-1)} \rangle + \langle S_\gamma^{(n)} \rangle \langle S_\beta^{(n-1)} \rangle \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial \langle S_\gamma^{(n)} \rangle}{\partial K_\alpha^{(n)}} = -\langle S_\gamma^{(n)} S_\alpha^{(n)} \rangle + \langle S_\gamma^{(n)} \rangle \langle S_\alpha^{(n)} \rangle, \quad (2.22)$$

donde  $\langle S_\alpha^{(n)} \rangle$ , por ejemplo corresponde al promedio de la interacción  $S_\alpha$  calculada en la red correspondiente al paso de renormalización  $(n)$ . Los promedios se calculan para las distintas configuraciones obtenidas durante la simulación.

Debido a la definición del Hamiltoniano renormalizado, los valores de expectación térmicos de cualquier función  $F$  de variables  $\sigma^{(n)}$  llevan al mismo resultado, ya sean evaluadas usando  $H^{(n-1)}$  o  $H^{(n)}$ , es decir,

$$\frac{1}{Z^{(n)}} \sum_{\{\sigma^{(n)}\}} F[\sigma^{(n)}] e^{-H^{(n)}[\sigma^{(n)}]} = \frac{1}{Z^{(n-1)}} \sum_{\{\sigma^{(n-1)}\}} F[\sigma^{(n-1)}] e^{-H^{(n-1)}[\sigma^{(n-1)}]}, \quad (2.23)$$

por lo tanto, las cantidades que aparecen en las Ecuaciones (2.21) y (2.22) se pueden obtener directamente vía una simulación numérica del Hamiltoniano original –no renormalizado– en

la red fundamental. Esto trae como consecuencia que la PDF calculada en los distintos paso de RG ( $n$ ) y en la red fundamental tienen la misma forma funcional, lo cual será mostrado más adelante de con datos numérica precisos.

Dado que las simulaciones deben ser realizadas cerca del punto crítico del sistema, las configuraciones producidas por un algoritmo de actualización local no son estadísticamente independientes, lo cual lleva a promedios térmicos poco representativos.

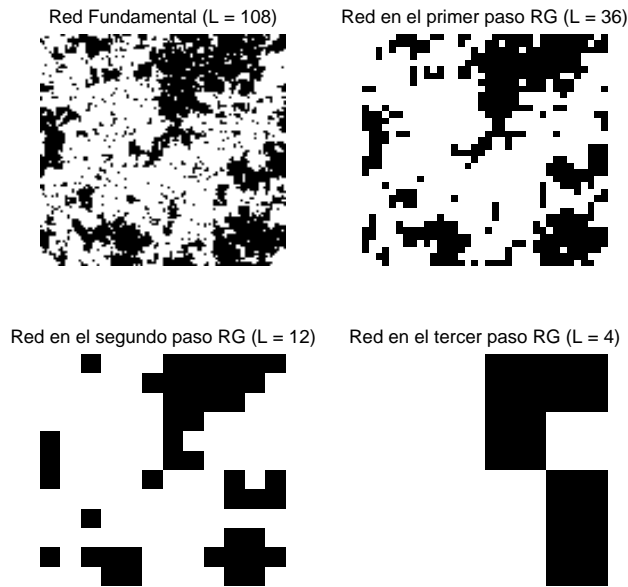


Figura 2.2: Configuraciones típicas para el modelo de Ising en dimensión  $d = 2$  en una red cuadrada de tamaño  $L = 108$  con condiciones de borde periódicas, la configuración corresponde se obtuvo para la temperatura crítica y sus respectivas renormalizaciones de tamaños  $L = 36, 12, 4$ .

Los valores de expectación que aparecen en las Ecuaciones (2.21) y (2.22) deben ser calculados usando una simulación vía algoritmos de clusters en la red fundamental. Luego estos valores numéricos son insertados en la Ecuación (2.19) llevando a un sistema de ecuaciones algebraicas acopladas, las cuales a medida que la transformación de renormalización es iterada hacia el punto fijo del Hamiltoniano  $H^*$  permiten obtener una secuencia de aproximaciones a la matriz linearizada de RG.  $H^*$  está definido por la relación

$$K_{\alpha}^{(n+1)} - K_{\alpha}^* = \sum_{\beta} T_{\alpha\beta}^* (K_{\beta}^{(n)} - K_{\beta}^*), \quad (2.24)$$

donde la matriz  $T_{\alpha\beta}^*$  se define como

$$T_{\alpha\beta}^* = \left[ \frac{\partial K_{\alpha}^{(n)}}{\partial K_{\beta}^{(n-1)}} \right]_{H^*}. \quad (2.25)$$

Para evaluar  $T_{\alpha\beta}^*$ , en principio se necesita una “región lineal” cerca de la temperatura crítica, de esta manera las derivadas son esencialmente constantes. Esta región se puede encontrar usando un estudio de escalamiento de tamaño finito o FSS –“Finite Size Scaling”– de la temperatura crítica  $T^*[L]$  [10]. La temperatura crítica exacta  $T_c$  se puede encontrar de manera numérica usando una cantidad que sea independiente del tamaño de red en el punto crítico, como por ejemplo, el cumulante de Binder [11]. Estos aspectos se desarrollan con mayor profundidad en la Sección 2.4.

Finalmente, los exponentes críticos se obtienen de los autovalores de  $T_{\alpha\beta}^*$ , Ecuación (2.25). Para el modelo de Ising en dos dimensiones los exponentes críticos están dados por las relaciones fundamentales  $\nu = \ln s / \ln \lambda_1^e$  y  $\eta = d + 2 - 2 \ln \lambda_1^o / \ln b$ , donde  $\lambda_1^{e(o)}$  es el autovalor mayor par (impar).

Las Tablas 2.1, 2.2 y 2.3 presentan resultados de exponentes críticos calculados con este método y comparados con los resultados originales de Swendsen [12].

Tabla 2.1: Exponentes críticos para el modelo de Ising en una red cuadrada de tamaño  $L = 45$  obtenidos por el método CARG [PZ][10, 11] y por el método de Swendsen [S][12] en una vecindad del punto crítico.

Paso RG	$\lambda_1^e$	$\lambda_1^o$	$\nu$	$\eta$
1 <sub>[S]</sub>	2,887	7,712	1,036	0,2812
1 <sub>[PZ]</sub>	2,8900	7,7408	1,0352	0,2744
2 <sub>[S]</sub>	3,006	7,835	0,998	0,2524
2 <sub>[PZ]</sub>	3,0083	7,8508	0,9975	0,2487
Exacto	3	7,8452	1	0,250

Todas las simulaciones se realizaron en una “región lineal” en la vecindad de  $T^*[L]$  obtenida por medio de la Ecuación (2.26). En las Tablas 2.1 y 2.2 se realizaron sólo 2 pasos RG. A medida que se iteran los pasos de RG, los resultados se van aproximando al valor exacto. Para la Tabla 2.3 se realizaron 3 pasos de renormalización; se aprecia claramente como los

Tabla 2.2: Exponentes críticos para el modelo de Ising en una red cuadrada de tamaño para  $L = 64$  a temperatura  $T = 2,259$  obtenidos mediante el método CARG.

Paso RG	$\lambda_1^e$	$\lambda_1^o$	$\nu$	$\eta$
1	1,9586	3,6856	1,0311	0,2362
2	1,9986	3,6676	1,0010	0,2503
Exacto	2	3,6680	1	0,250

Tabla 2.3: Exponentes críticos para el modelo de Ising en una red cuadrada de tamaño  $L = 108$  obtenidos por el método CARG [PZ][10, 11] y por el método de Swendsen [S][12] en una vecindad del punto crítico.

Paso RG	$\lambda_1^e$	$\lambda_1^o$	$\nu$	$\eta$
1 <sub>[S]</sub>	2,852	7,705	1,048	0,2828
1 <sub>[PZ]</sub>	2,8635	7,7062	1,0443	0,2825
2 <sub>[S]</sub>	3,021	7,828	0,994	0,2540
2 <sub>[PZ]</sub>	3,0027	7,8269	0,9992	0,2542
3 <sub>[S]</sub>	3,007	7,831	0,998	0,2534
3 <sub>[PZ]</sub>	3,0013	7,8361	0,9996	0,2521
Exacto	3	7,8452	1	0,250

exponentes obtenidos por el método CARG [10, 11] se acercan más al valor exacto que los obtenidos por Swendsen [12], lo cual representa una mejora del método debido al uso de algoritmos de cluster.

Para los exponentes que aparecen en la Tabla 2.2 se calculó el error relativo, resultado que se puede apreciar en la Figura 2.3, la cual muestra como en una vecindad de  $T^*[L]$  correspondiente a  $L = 64$  se minimiza el error relativo.

## 2.4. Escalamiento de tamaño Finito y Cumulante de Binder

Como fue mencionado antes, es necesario encontrar una “región lineal” de las ecuaciones de RG donde las derivadas sean esencialmente constantes para poder aplicar el método CARG,

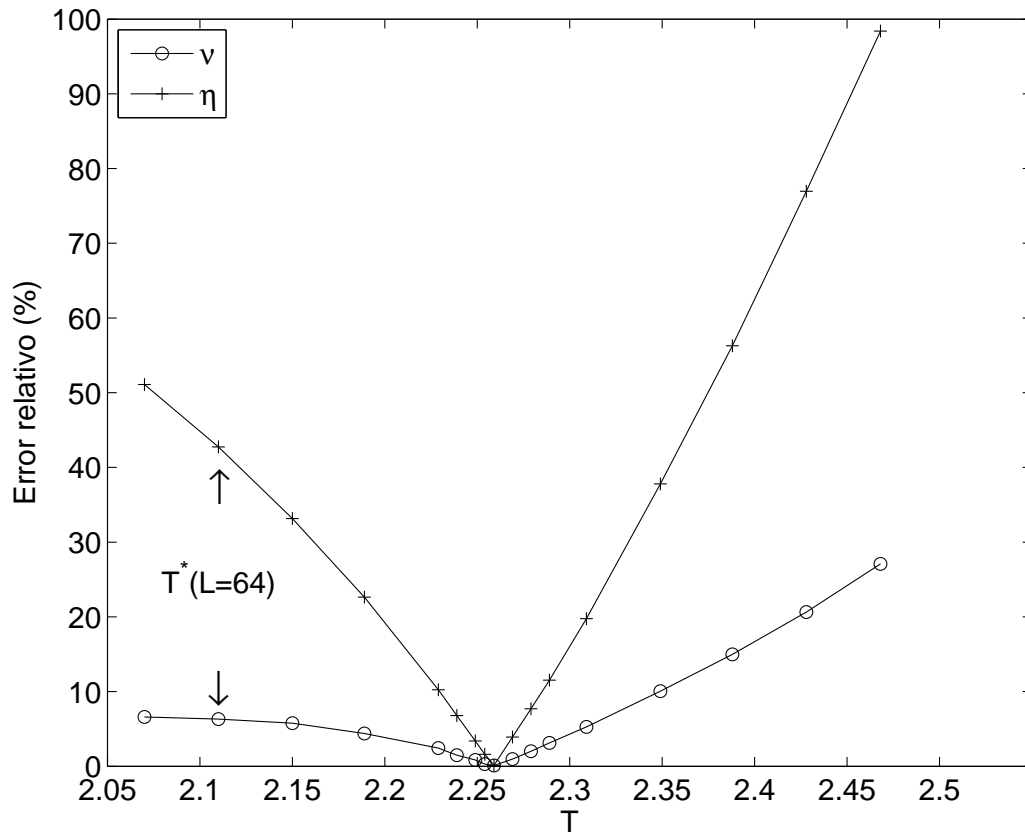


Figura 2.3: Error relativo para los exponentes críticos  $\eta$  y  $\nu$  obtenidos en el segundo paso de RG para un tamaño de red  $L = 64$ . El mínimo ocurre para  $T = 2,259$  la cual está en la vecindad de  $T^*[L = 64]$ . Los exponentes críticos para esta temperatura se pueden encontrar en la Tabla 2.2.

para ello se deben encontrar dos valores importantes, la temperatura crítica en función del tamaño de red  $T^*[L]$  y la temperatura crítica en el límite de volumen infinito  $T_c$  del modelo.

Para el estudio de escalamiento de tamaño finito o FSS, es necesario calcular la temperatura “crítica” en una red de tamaño finito. Esta temperatura, por efectos de tamaño finito, no será la temperatura crítica en volumen infinito. Por ejemplo, para el modelo de Ising en dos dimensiones, ésta no corresponderá a la temperatura de Onsager. Por lo tanto, para obtener dicha temperatura usamos el hecho que ciertos observables divergen en la transición de fase en el límite termodinámico, como es el caso de la susceptibilidad magnética. Si se calcula la susceptibilidad  $\chi_m(T)$  para varios tamaños de red y se obtiene la temperatura a la cual ésta es máxima, entonces de aquí se puede encontrar una ley de escalamiento para la temperatura crítica en la red  $T^*[L]$ .

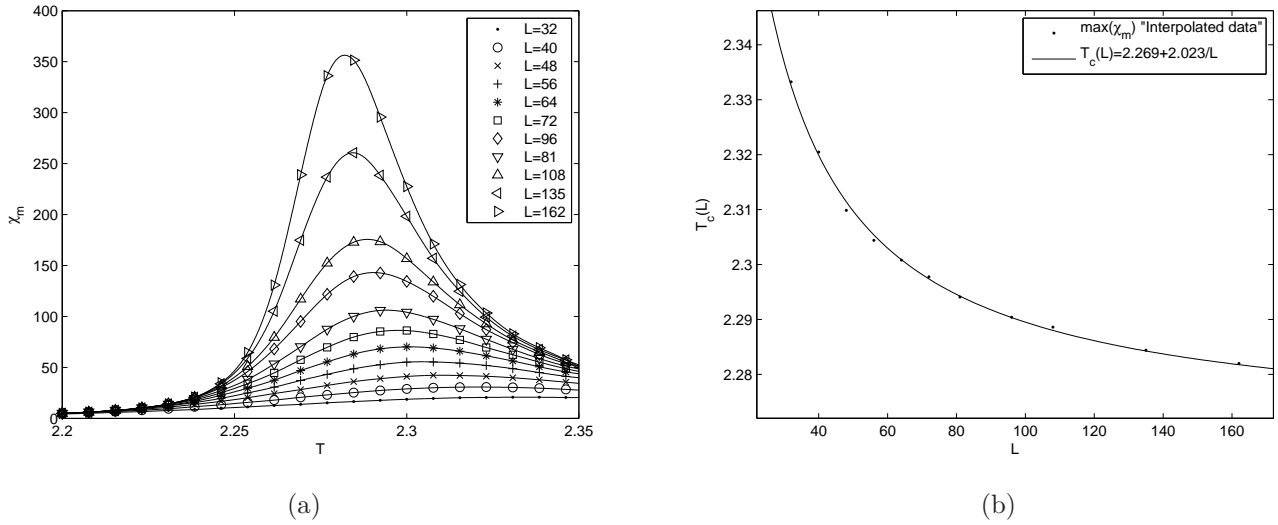


Figura 2.4: Datos numéricos del modelo de Ising en dos dimensiones. Se consideraron  $10^6$  configuraciones para los promedios luego que el sistema alcanzara el equilibrio térmico. **(a)** Susceptibilidad magnética para distintos tamaños de red. **(b)** Ajuste numérico a los máximos de la susceptibilidad magnética. Se infiere que  $T^*[L]$  es inversamente proporcional a  $L$  y cuando  $L$  es grande tiende a  $T_c$ .

En la Figura 2.4(b) vemos los datos obtenidos de una simulación del modelo de Ising en dos dimensiones usando el algoritmo de Wolff [9] para una red cuadrada con tamaños de red entre  $162a$  y  $32a$  con  $a = 1$ . Para cada una de las susceptibilidades, Figura 2.4(a), se calculó el máximo, el cual se usó para obtener la ley de escalamiento, Figura 2.4(b). Para hacer el ajuste a los puntos de la Figura 2.4(b) se usó una ecuación del tipo (proveniente de resultados analíticos rigurosos de RG)

$$T^*[L] = a_1 + a_2/L, \quad (2.26)$$

encontrando que  $a_1$  coincide perfectamente con  $T_c$  y  $a_2$  es aproximadamente 2.

Otra manera de obtener  $T_c$  es usar una cantidad que no dependa de  $L$  durante la transición de fase. El cumulante de Binder se caracteriza justamente por ser independiente de  $L$  en el punto crítico [34].

$$U(L, T) = 1 - \frac{1}{3} \frac{\langle M^4 \rangle}{\langle M^2 \rangle^2} \quad (2.27)$$

Luego basta realizar simulaciones para distintos tamaños de red, haciendo un barrido de temperatura para calcular la intersección de las curvas, obteniendo  $T_c = 2,26903 \pm 0,00059$ .

Este resultado –Figura 2.5– difiere sólo en un 1 % del resultado de exacto debido a Onsager.

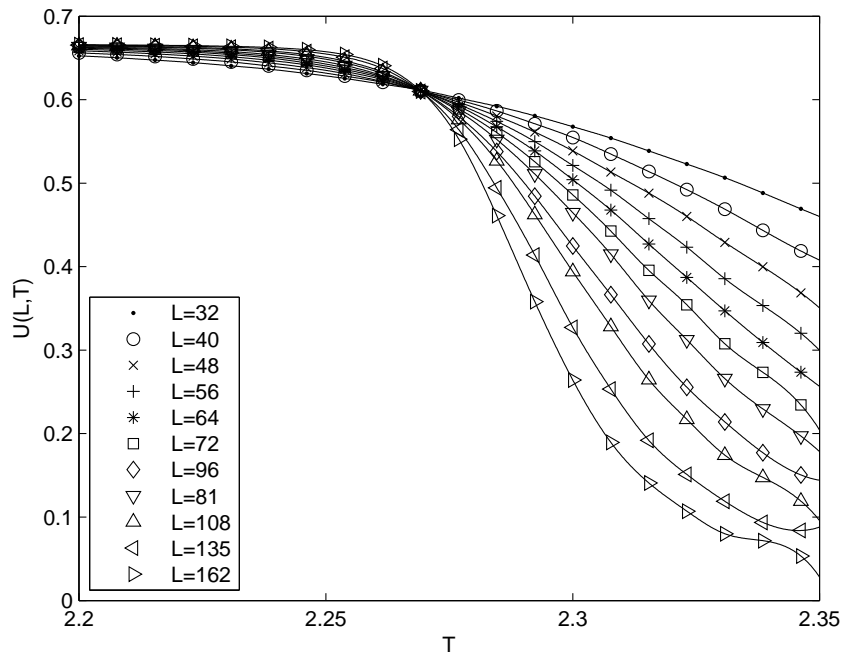


Figura 2.5: Cumulante de Binder para distintos tamaños de red. Al calcular la intersección de todas las curvas se obtiene  $T_c = 2,26903 \pm 0,00059$ , resultado que difiere en un 1 % del resultado de exacto debido a Onsager.

## 2.5. Flujo de la PDF bajo RGT y su trayectoria renormalizada

Dado que la PDF o Función Densidad de Probabilidad está intrínsecamente relacionada con la función partición del sistema, uno esperaría que sus propiedades no se vean alteradas si se obtiene de la red original o de una renormalizada, dado que la función partición es invariante bajo las transformaciones de RG.

Otra manera de entender esto es que la PDF no es más que un histograma del parámetro de orden. En el caso del modelo de Ising, es un histograma de la magnetización, y como se discutió en la Sección 2.3, algunos observables calculados en la red original o la red renormalizada son iguales, Ecuaciones 2.20 y 2.23, por lo tanto es de esperar que las PDFs obtenidas en las

redes originales y sus subsecuentes renormalizaciones deben mostrar el mismo comportamiento funcional. Esto se ilustra en la Figura 2.6 con gran precisión.

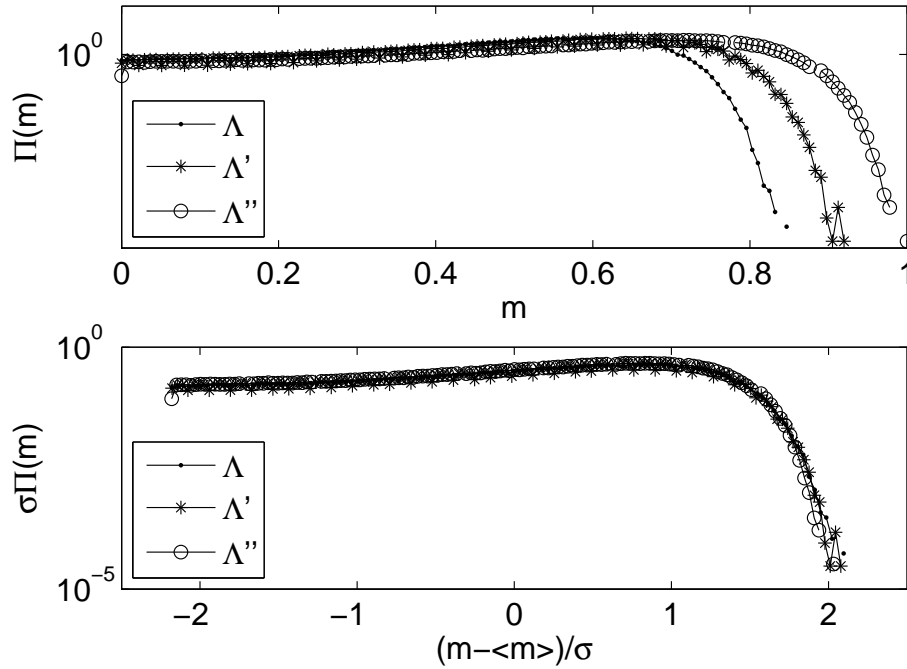


Figura 2.6: Función Densidad de Probabilidad  $\Pi$  para la magnetización  $m$  del modelo de Ising en dos dimensiones para  $L = 64$  a una temperatura  $T_c(L) = 2,3008$ . La red fundamental esta denotado por  $\Lambda$  mientras que las subsecuentes renormalizaciones están denotadas por  $\Lambda'$  y  $\Lambda''$ ,  $\sigma$  es la desviación estándar. La subfigura superior muestra las PDFs de la red original y sus subsecuentes renormalizaciones mientras que la inferior muestra los mismos datos normalizados. Se aprecia claramente la misma forma funcional en las 3 curvas, confirmando la forma invariante de la PDF bajo una transformación de RG.

## 2.6. Colapso de la PDF

El estudio de la PDF en una región cercana a la temperatura crítica muestra que dicha curva exhibe un colapso a la curva universal descrita en [2–6] para una temperatura distinta a la cual se obtienen los exponentes crítico, Figura 2.7. Dado que a la temperatura para la cual ocurre este colapso para el modelo de Ising en dimensión  $d = 2$  [4], no es posible obtener exponentes críticos representativos de la clase de equivalencia a la cual pertenece el modelo de Ising concluimos no que existe invarianza de escala a esa temperatura, razón por



la cual entendemos el colapso de la PDF por una restricción en el parámetro de orden –La magnetización no puede ser mayor a 1–, lo cual es consistente con estadística extrema junto con efectos de red finita [11], en vez que un fenómeno de universalidad como es conjeturado en [4].

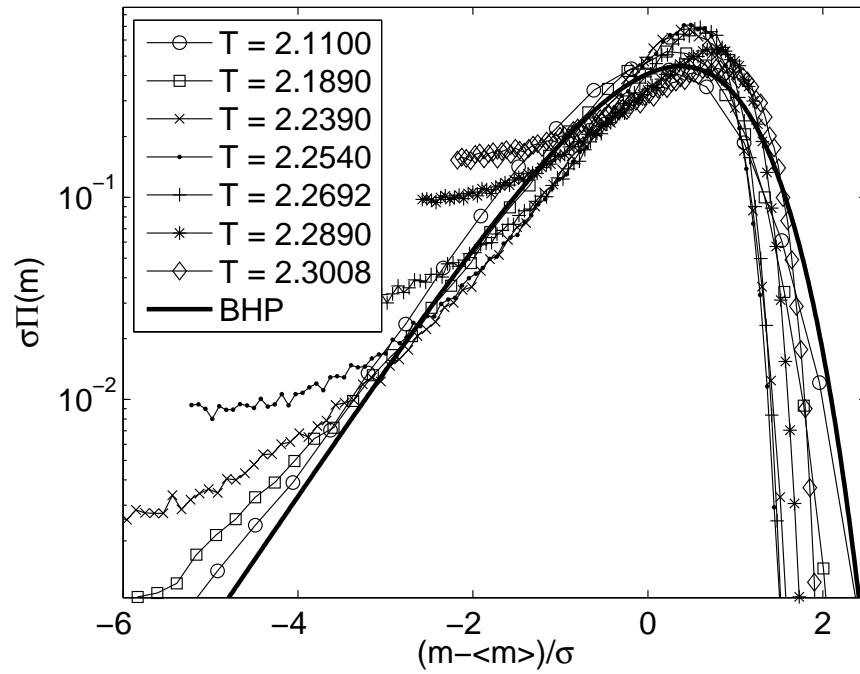


Figura 2.7: Función Densidad de Probabilidad para la magnetización del modelo de Ising en dos dimensiones para  $L = 64$  en el rango de temperaturas desde  $T = 2,11$  hasta  $T = 2,3008$ . En línea continua se muestra la curva universal propuesta en [4].



## Capítulo 3

# Simulación de modelos Magnéticos de espín cuántico

Para estudiar la fenomenología descrita en la introducción de esta tesis, en particular, fenómenos de crossover en materiales magnéticos, es necesario estudiar modelos de espín cuántico. Dado que el modelo de Ising solo presenta invarianza de escala en las cercanías de la temperatura crítica  $T_c$  no es un buen candidato para el estudio de fenómenos de crossover. Es por ello que es necesario simular numéricamente modelos que tengan dos puntos críticos. Uno de los casos más interesantes está representado por el modelo de Heisenberg (1928). En su versión cuántica las variables de espín pueden tomar  $2s + 1$  valores, siendo  $s$  el valor del espín total.

La simulación de dicho modelo requiere de herramientas más sofisticadas que las descritas en el capítulo anterior. Por razones que serán evidentes durante el desarrollo del presente capítulo, algoritmos de update local no son capaces de recorrer todo el espacio de configuraciones –espacio de fase– del modelo, por ello se utilizara el método propuesto por Wiese & Ying llamado “Loop Cluster Algorithm (LCA)”. A continuación se presenta el desarrollo de esta técnica para el modelo de Heisenberg, descrito de manera conveniente para que también permita estudiar el modelo  $XY$ .

Los detalles de como abordar un algoritmo usando esta técnica están descritos en el Apéndice A.

### 3.1. Modelo de Heisenberg de espín $1/2$ anisotrópico en $d = 2$

El modelo de Heisenberg de espín  $1/2$  anisotrópico se define a través del siguiente Hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{\hat{\mu}=\hat{1},\hat{2}} \sum_{x \in \Lambda} J \left( \hat{S}_x^1 \hat{S}_{x+\hat{\mu}}^1 + \hat{S}_x^2 \hat{S}_{x+\hat{\mu}}^2 \right) + J_3 \left( \hat{S}_x^3 \hat{S}_{x+\hat{\mu}}^3 \right), \quad (3.1)$$

donde  $\hat{S}_x^i = \sigma_x^i/2$  es el operador de espín  $1/2$  en el sitio  $x$  de una red cuadrada  $\Lambda$  de longitud  $L$  par, las condiciones de borde para esta red son periódicas.  $\sigma_x^i$  es la  $i$ -ésima matriz de Pauli con  $i = 1, 2, 3$ . La interacción es a primeros vecinos con constante de acoplamiento  $J$  en el plano  $1 - 2$  y  $J_3$  en la dirección  $\hat{3}$ ,  $\hat{\mu}$  es el vector unitario en la dirección  $\hat{1}$  o  $\hat{2}$  dependiendo de la ubicación del vecino. Para  $J < 0$  los espines paralelos se ven energéticamente favorecidos lo cual implica un modelo ferromagnético mientras que para  $J > 0$  el modelo es anti-ferromagnético.

El espín total  $\hat{S}_T = \sum_{x \in \Lambda} \hat{S}_x$  del sistema para este modelo es una cantidad conservada en el caso que  $J_3 = J$  (Heisenberg isotrópico), es decir

$$\left[ \hat{H}, \hat{S}_T \right]_{J_3=J} = 0. \quad (3.2)$$

El hecho que el modelo de Heisenberg isotrópico en dimensión  $d \leq 2$  no tenga una transición de fase a temperatura finita se explica a través del teorema de Mermin-Wagner<sup>1</sup> [21]. Sin embargo, esto no se aplica a temperatura cero, es decir, para una transición de fase cuántica.

#### 3.1.1. Simulación vía algoritmos de cluster

Basándonos en el método desarrollado en [18], se escribieron códigos en C++ para implementar algoritmos de cluster para simular modelos de espín cuántico o QSS. Este método está basado en el hecho que un modelo de espín cuántico en dimensión  $d$  puede ser mapeado a un modelo con variables de espín clásico tipo Ising en dimensión  $d+1$  usando la representación de integral de camino para la función partición y una generalización de la fórmula de Trotter [20].

<sup>1</sup>Este teorema esta explicado en el Apéndice B.

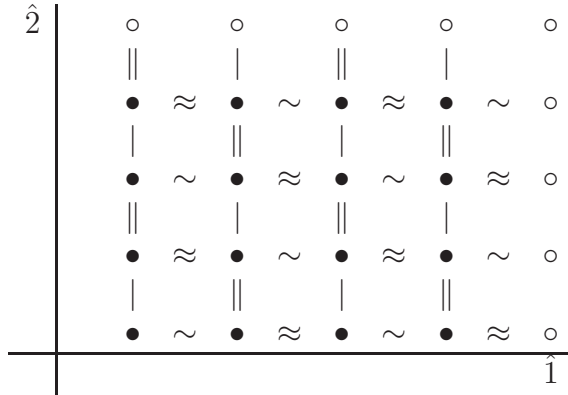


Figura 3.1: Descomposición del Hamiltoniano de la Ecuación (3.1) según la Ecuación (3.3) para una red cuadrada con  $L = 4$  y con condiciones de borde periódicas. Cada parte del Hamiltoniano original está representado por símbolos según la siguiente nomenclatura:  $\hat{H}_1$  es  $|$ ,  $\hat{H}_2$  es  $\sim$ ,  $\hat{H}_3$  es  $||$  y  $\hat{H}_4$  es  $\approx$ . Los espines correspondientes a las condiciones de borde periódicas están representados por  $\circ$ .

Primero debemos escoger una realización de la fórmula de Trotter<sup>2</sup> [19] o Suzuki<sup>3</sup> [20] para el Hamiltoniano. La manera de descomponer  $\hat{H}$  no es única, basta con asegurar que la descomposición contenga todas las interacciones descritas en el Hamiltoniano original. Para este modelo hemos escogido la siguiente descomposición:  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 + \hat{H}_4$  con

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_1 &= \sum_{x=(m,n) / m+n \text{ par}} J \left( \hat{S}_x^1 \hat{S}_{x+\hat{2}}^1 + \hat{S}_x^2 \hat{S}_{x+\hat{2}}^2 \right) + J_3 \hat{S}_x^3 \hat{S}_{x+\hat{2}}^3 \\
 \hat{H}_2 &= \sum_{x=(m,n) / m+n \text{ par}} J \left( \hat{S}_x^1 \hat{S}_{x+\hat{1}}^1 + \hat{S}_x^2 \hat{S}_{x+\hat{1}}^2 \right) + J_3 \hat{S}_x^3 \hat{S}_{x+\hat{1}}^3 \\
 \hat{H}_3 &= \sum_{x=(m,n) / m+n \text{ impar}} J \left( \hat{S}_x^1 \hat{S}_{x+\hat{2}}^1 + \hat{S}_x^2 \hat{S}_{x+\hat{2}}^2 \right) + J_3 \hat{S}_x^3 \hat{S}_{x+\hat{2}}^3 \\
 \hat{H}_4 &= \sum_{x=(m,n) / m+n \text{ impar}} J \left( \hat{S}_x^1 \hat{S}_{x+\hat{1}}^1 + \hat{S}_x^2 \hat{S}_{x+\hat{1}}^2 \right) + J_3 \hat{S}_x^3 \hat{S}_{x+\hat{1}}^3,
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

donde  $m$  corre en la dirección  $\hat{1}$  y  $n$  en la dirección  $\hat{2}$ . Una representación gráfica de esta descomposición se encuentra en la figura 3.1.

Esta descomposición tiene la particularidad que los términos de  $\hat{H}_i$  conmutan entre sí.

<sup>2</sup>Para un modelo en dimensión  $d = 1$ .

<sup>3</sup>Para un modelo en dimensión  $d \geq 2$ .

Usando la formula de Suzuki [20] obtenemos

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} Tr \left[ e^{-\epsilon\beta\hat{H}_1} e^{-\epsilon\beta\hat{H}_2} e^{-\epsilon\beta\hat{H}_3} e^{-\epsilon\beta\hat{H}_4} \right]^N, \quad (3.4)$$

donde  $\epsilon = 1/N$  es el espaciamento en la dirección temporal euclidiana y  $\beta$  es el inverso de la temperatura. Al hacer tender  $\epsilon \rightarrow 0$  (límite continuo) se recupera el modelo original.

Para expresar la función partición como una integral de camino con variables tipo Ising se insertan conjuntos completos de autoestados de  $\sigma_x^3$ -cuantización en la base de  $\sigma^3$ - entre los factores  $exp(-\epsilon\beta\hat{H}_i)$ . En este proceso se introduce una dimensión extra, representada por el tiempo euclidiano. Todas las interacciones descritas en el Hamiltoniano original se realizarán en 4 pasos elementales ( $\epsilon/4$ ), cada uno de ellos en un tiempo euclidiano distinto.

Luego la función partición toma la forma

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n_0} \cdots \sum_{n_{4N-1}} \langle n_0 | e^{-\beta\epsilon\hat{H}_1} | n_1 \rangle \langle n_1 | e^{-\beta\epsilon\hat{H}_2} | n_2 \rangle \langle n_2 | e^{-\beta\epsilon\hat{H}_3} | n_3 \rangle \langle n_3 | e^{-\beta\epsilon\hat{H}_4} | n_4 \rangle \cdots \langle n_{4N-2} | e^{-\beta\epsilon\hat{H}_3} | n_{4N-1} \rangle \langle n_{4N-1} | e^{-\beta\epsilon\hat{H}_4} | n_0 \rangle, \quad (3.5)$$

con

$$\langle n_t | e^{-\beta\epsilon\hat{H}_i} | n_{t+1} \rangle = \langle n_t | \exp \left( -\epsilon \sum_{\langle x, \hat{\mu} \rangle \in \Lambda_i} \hat{h}_{x, \hat{\mu}} \right) | n_{t+1} \rangle = \prod_{\langle x, \hat{\mu} \rangle \in \Lambda_i} \mathcal{T}_{x \hat{\mu}}^t \quad (3.6)$$

donde  $\mathcal{T}_{x \hat{\mu}}^{t t+1}$  son los elementos de la matriz de transferencia:

$$\mathcal{T}_{x \hat{\mu}}^t = \langle s(x, t) \ s(x + \hat{\mu}, t) | e^{-\beta\epsilon\hat{h}_{x, \hat{\mu}}} | s(x, t+1) \ s(x + \hat{\mu}, t+1) \rangle \quad (3.7)$$

y

$$\hat{h}_{x, \hat{\mu}} = J \left( \hat{S}_x^1 \hat{S}_{x+\hat{\mu}}^1 + \hat{S}_x^2 \hat{S}_{x+\hat{\mu}}^2 \right) + J_3 \hat{S}_x^3 \hat{S}_{x+\hat{\mu}}^3. \quad (3.8)$$

En representación matricial en base  $\sigma^3$  la matriz de transferencia queda representada por:

$$\mathcal{T} = \begin{array}{c|cccc|cc} & ++ & +- & -+ & -- & & \\ \hline & A & 0 & 0 & 0 & ++ & \\ & 0 & B & C & 0 & +- & \\ & 0 & C & B & 0 & -+ & \\ & 0 & 0 & 0 & A & -- & \end{array} \quad (3.9)$$

con

$$\begin{aligned}
 A &= e^{-\beta\epsilon J_3/4}, \\
 B &= e^{\beta\epsilon J_3/4} \cosh(\beta\epsilon J/2) \quad \text{y} \\
 C &= -e^{\beta\epsilon J_3/4} \sinh(\beta\epsilon J/2).
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

De la Ecuación (3.7) se aprecia que los elementos de matriz representan transiciones entre cuatro espines clásicos, denominada interacción de plaqueta. Esta interacción tipo plaqueta vincula dos espines vecinos (dirección horizontal/espacial) a un tiempo  $t$  con dos espines vecinos a un tiempo  $t + 1$  (dirección vertical/temporal). De la matriz de transferencia se desprenden 3 tipos de transiciones o plaquetas permitidas:

$$\begin{aligned}
 \text{Plaqueta tipo } A &: \begin{array}{cc|cc} + & + & \acute{o} & - & - \\ + & + & & - & - \end{array} \\
 \text{Plaqueta tipo } B &: \begin{array}{cc|cc} + & - & \acute{o} & - & + \\ + & - & & - & + \end{array} \\
 \text{Plaqueta tipo } C &: \begin{array}{cc|cc} - & + & \acute{o} & + & - \\ + & - & & - & + \end{array}
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

luego la red original en  $2D$  es transformada a una serie de planos temporales (time slices) donde cuatro de estos planos representan una posible evolución temporal de una configuración de la red original. El conjunto de cuatro planos temporales conforma un paso  $\epsilon$  completo; en cada uno de estos 4 pasos elementales se activa sólo un término de la descomposición del Hamiltoniano, Ecuación (3.2.3). El conjunto completo de  $N$  planos temporales forma la nueva red en  $3D$ , dos dimensiones espaciales en el plano de cada plano temporal y una dimensión temporal perpendicular a la red original.

Para el caso ferromagnético ( $J < 0$ ) todos los elementos de matriz son positivos, por lo tanto, pueden ser interpretados como factores de Boltzmann de configuraciones de espín  $s = \pm 1$  con una acción euclidiana clásica  $S$ :

$$\langle s_1 \ s_2 | e^{-\beta\epsilon\hat{h}_{x,x+\hat{\mu}}} | s_3 \ s_4 \rangle = \exp(-S[s_1, s_2, s_3, s_4]). \tag{3.12}$$

Para el caso anti-ferromagnético ( $J > 0$ )  $C$  –Ecuación (3.10)– es negativo, y por ende no puede ser interpretado como un factor de Boltzmann. Sin embargo, podemos rotar cada

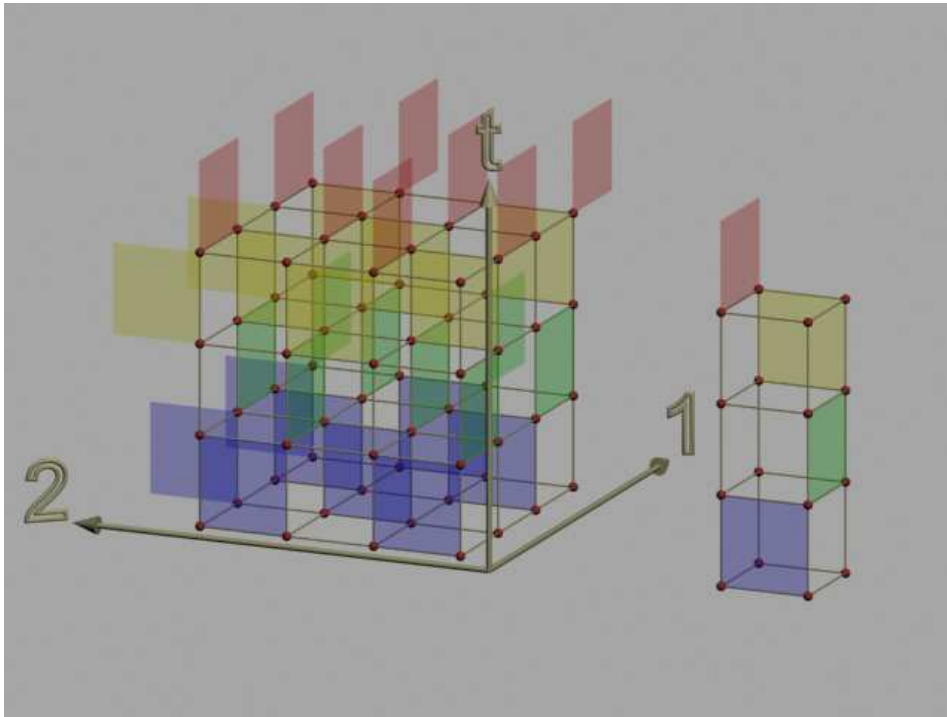


Figura 3.2: Evolución temporal helicoidal de cada  $\hat{H}_i$  descrito en la descomposición del Hamiltoniano. Cada  $\hat{H}_i$  se activa sólo en uno de los 4 pasos elementales  $\epsilon/4$ .

segundo espín en un ángulo  $\pi$ , logrando con esta transformación unitaria corregir el problema del signo en el factor  $C$ . Cabe destacar que esta transformación unitaria no hace más que redefinir el signo de la constante de acoplamiento  $J$ , lo cual lleva a concluir que la física de la fase ferro- y anti-ferromagnética coinciden para este modelo. Sólo una red bipartita –ver Figura 3.3– admite este tipo de transformación unitaria. Una red bipartita es aquella que puede ser separada en dos subredes, de tal manera que un espín de la subred  $A$  sólo puede interactuar con espines de la subred  $B$ .

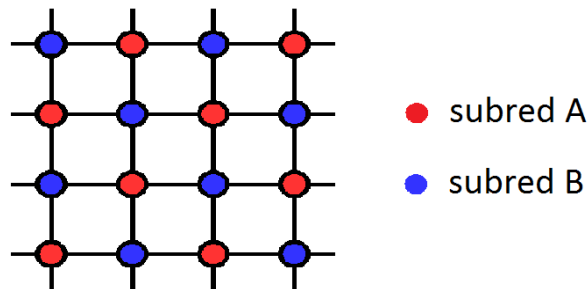


Figura 3.3: Red cuadrada bipartita. Considerando interacción a primeros vecinos un espín de la subred  $A$  (rojo) sólo puede interactuar con sus 4 vecinos pertenecientes a la subred  $B$  (azul). Para el caso de una red triangular esta condición no se cumple.



De los elementos de la matriz de transferencia, Ecuación (3.9), se concluye que muy pocas transiciones entre configuraciones son permitidas. Estas restricciones hacen que algoritmos de update local no resulten viables para simulaciones de este tipo de sistemas. Es sabido que los algoritmos de cluster son capaces de generar clusters de tamaño arbitrario y generar cambios en estos dominios completos, lo cual es una buena representación de la situación física que el sistema muestra muy cerca de una transición de fase. Además, estos algoritmos de cluster satisfacen condiciones de accesibilidad y micro reversibilidad, lo cual garantiza que las configuraciones generadas converjan a configuraciones distribuidas de acuerdo a la probabilidad de Gibbs.

Para construir un algoritmo de cluster para este modelo se definen break ups para cada tipo de plaqueta, eventualmente estos se convertirán en bonds, los cuales formarán los cluster que serán invertidos con probabilidad  $1/2$ . Para los tres tipos de plaquetas se forman bonds que unen espines clásicos de igual signo en la dirección temporal y espines de distinto signo en la dirección espacial, Figura 3.4. Esto es necesario para que se cumpla la conservación de la componente 3 del espín total.

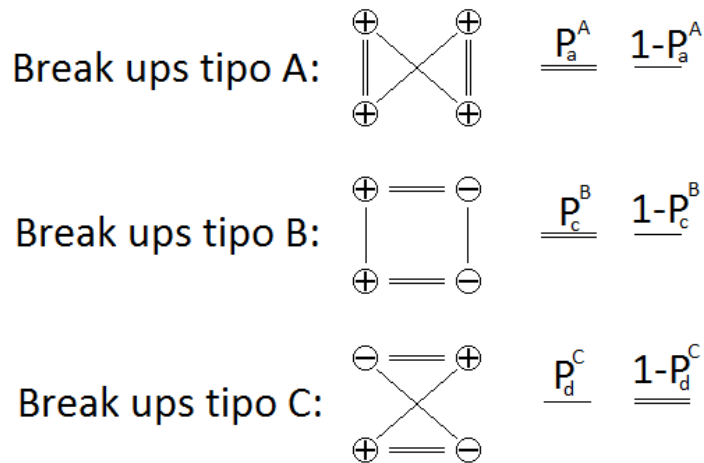


Figura 3.4: El eje temporal es vertical, cada tipo de plaqueta puede tener dos tipos de break ups, los cuales poseen probabilidades  $P_a^A$ ,  $P_c^B$ ,  $P_d^C$  y sus complementos  $P_d^A = 1 - P_a^A$ ,  $P_a^B = 1 - P_c^B$  y  $P_c^C = 1 - P_d^C$ . Al cambiar espines positivos ( $+1/2$ ) por negativos ( $-1/2$ ) y viceversa, los distintos tipos de break ups poseen las mismas probabilidades para cada tipo de plaqueta respectivamente.

Imponiendo micro reversibilidad a las probabilidades para los break ups de la figura 3.4 se

obtiene

$$\begin{aligned}
P_a^A &= \frac{1}{2} (1 + e^{\epsilon\beta(J+J_3)/2}) \\
P_c^B &= \frac{1}{2} \frac{e^{\epsilon\beta J/2} - e^{\epsilon\beta J_3/2}}{\cosh(\epsilon\beta J/2)} \\
P_d^C &= \frac{1}{2} \frac{e^{\epsilon\beta J/2} - e^{-\epsilon\beta J_3/2}}{\sinh(\epsilon\beta J/2)}.
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Para asegurar que los errores sistemáticos que introduce la discretización del Hamiltoniano en la dirección temporal sean menores que los errores estadísticos debemos usar un  $\epsilon$  pequeño, de esta manera aseguramos que se cumpla el límite  $N \rightarrow \infty$  en la Ecuación (3.4).

De la interpretación de integral de camino sabemos que la discretización se introduce en el intervalo  $[0, \beta]$  por lo que se puede identificar con el inverso de la temperatura  $\beta$ . Luego el número  $N$  que aparece en la Ecuación (3.4) lo podemos asociar con  $L_t/4\beta$  donde  $L_t$  es la dimensión temporal euclidiana, la cual representa el número de copias de la red espacial fundamental, de esta manera

$$L_t = \frac{4\beta}{\epsilon}, \tag{3.14}$$

por lo que para temperaturas bajas el volumen sobre el cual se realiza la simulación es grande.

Para todos los resultados que se presentarán en este capítulo se usará  $\epsilon = 0,025$ . De la Ecuación (3.14) vemos que  $L_t$  crecerá lineal con  $\beta$  lo cual es un problema cuando queremos estudiar transiciones de fase cuánticas, esto es a temperatura cero. Esto introduce una cierta restricción, dado que se requieren tiempos de simulación relativamente cortos (meses). Para los rangos de temperatura usados  $T = 0,01$  y  $T = 1,0$  se usarán valores entre  $L_t = 16000$  y  $L_t = 160$ , respectivamente. De esta manera, el volumen o número de espines  $M = L_x L_y L_t$  involucrados en las simulaciones puede llegar a ser del orden de  $10^7$  para  $L_x = L_y = 32$  y  $10^6$  para  $L_x = L_y = 16$ , si realizamos las simulaciones a temperatura  $T = 0,01$ .

La Figura 3.5 muestra configuraciones típicas de cluster obtenidas mediante este método para diferentes regímenes de temperaturas en una red de dimensiones  $L_x = L_y = 4$  y  $L_t = 4$ , con  $J_3 = 0$  y  $J = -1$ . A medida que aumenta la temperatura, los bonds que en su totalidad conectan espines del mismo signo a tiempos distintos en la discretización temporal –Figura 3.5(a)–, empiezan a ser remplazados por bonds horizontales o a un mismo tiempo en la discretización que sólo conectan espines de signo distinto –Figura 3.5(b)– para terminar con

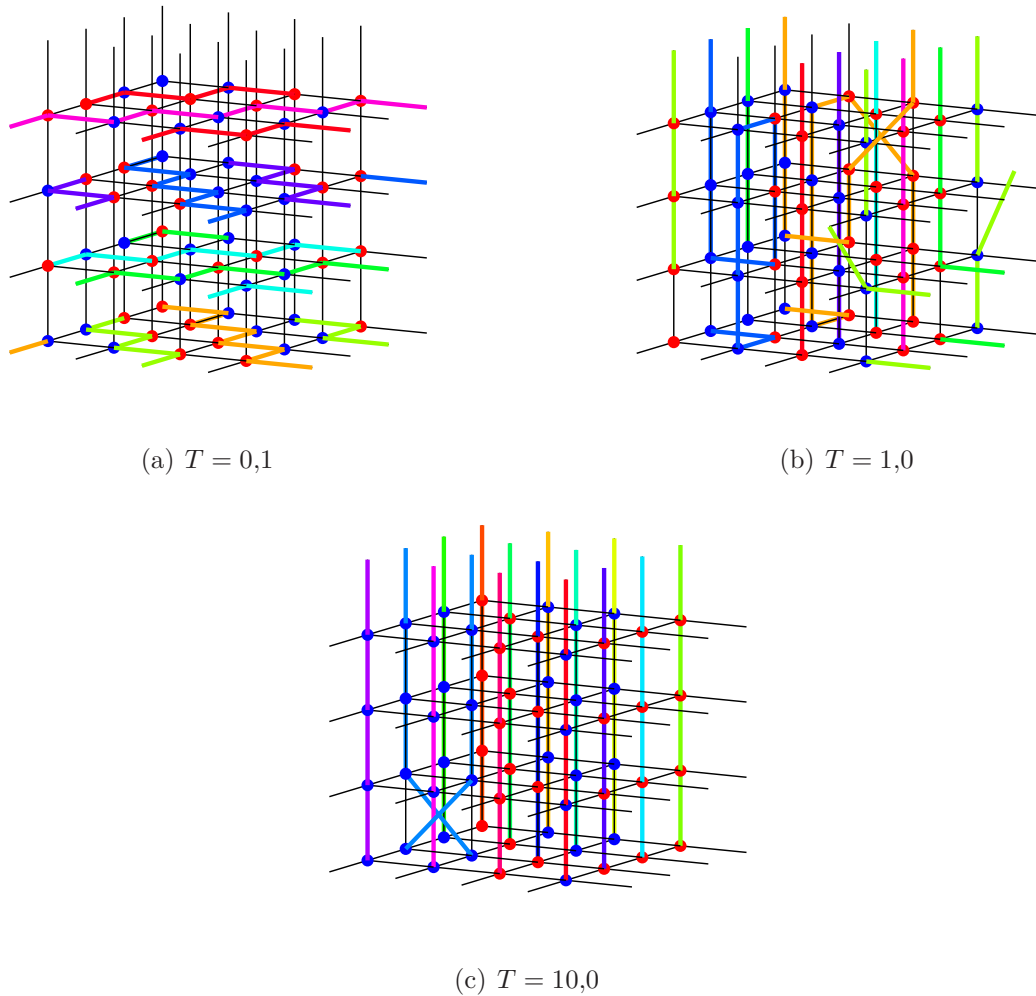


Figura 3.5: Configuraciones típicas de bonds para el modelo de XY ( $J_3 = 0$ ) en una red cuadrada  $L_x = L_y = 4$  y con una dimensión temporal euclidiana  $L_t = 4$ , con condiciones de borde periódicas en las 3 direcciones. Tres temperaturas distintas se muestran, **(a)**  $T = 0,1$ . **(a)**  $T = 1,0$ . **(a)**  $T = 10,0$ . Cada color representa un cluster distinto, el signo de la variable de espín en la red está representado por esferas rojas y azules para espines con valor  $+1$  y  $-1$ , respectivamente.

una red con todos sus bonds completamente horizontales –Figura 3.5(c)–. De aquí se concluye que clusters que se cierran a lo largo de la condición de borde temporal –vertical– tienen una magnetización distinta de cero, mientras que cualquier cluster que no cruce dicha frontera tendrá una magnetización nula.

### 3.2. Modelo de Heisenberg de espín 1/2 isotrópico

Como aplicación del método presentado para simular un sistema de espines cuánticos usaremos el modelo de Heisenberg isotrópico de espín 1/2. En la práctica, sólo bastará reemplazar  $J_3$  por el valor que tenga  $J$ . El Hamiltoniano que se obtiene en este caso es

$$\hat{H} = \sum_{\hat{\mu}=\hat{1},\hat{2}} \sum_{x \in \Lambda} J \left( \hat{S}_x^1 \hat{S}_{x+\hat{\mu}}^1 + \hat{S}_x^2 \hat{S}_{x+\hat{\mu}}^2 + \hat{S}_x^3 \hat{S}_{x+\hat{\mu}}^3 \right). \quad (3.15)$$

Cabe destacar que hacer este cambio no afecta la factorización de Trotter efectuada previamente y por ende, la estructura de la matriz de transferencia tampoco se ve alterada. Sólo cambian sus términos y a su vez las probabilidades asociadas a las transiciones elementales

$$\mathcal{T} = \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} + + & + - & - + & - - \end{array} \\ \left| \begin{array}{cccc|cc} A & 0 & 0 & 0 & + + \\ 0 & B & C & 0 & + - \\ 0 & C & B & 0 & - + \\ 0 & 0 & 0 & A & - - \end{array} \right. \end{array} \quad (3.16)$$

con

$$\begin{aligned} A &= e^{-\beta\varepsilon J/4}, \\ B &= e^{\beta\varepsilon J/4} \cosh(\beta\varepsilon J/2) \quad \text{y} \\ C &= -e^{\beta\varepsilon J/4} \sinh(\beta\varepsilon J/2). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Las probabilidades que se obtienen para la realización de cada tipo de plaqueta son:

$$\begin{aligned} P_a^A &= \frac{1}{2} (1 + e^{\beta J}) \\ P_c^B &= 0 \\ P_d^C &= 1. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Las probabilidades  $P_d^A$ ,  $P_a^B$  y  $P_c^C$  están dadas por su complemento según la Figura 3.4.

### 3.2.1. Magnetización y Winding number temporal

El Winding number  $W$  es un número topológico que indica cuantas veces y en que sentido puede una línea dar vueltas en los bordes de una superficie antes de volver donde partió. La dinámica introducida en el capítulo anterior produce bonds entre espines para eventualmente generar clusters, estos cluster serán líneas cerradas de tamaño par que pueden cerrarse o no cruzando cualquiera de las fronteras con condiciones de borde periódicas, Figura 3.5. Cuando un cluster  $C_i$  se cierra a lo largo de la condición de borde periódica temporal (vertical) decimos que tiene un Winding number  $W_t(C_i)$ . De la Figura 3.4 y Figura 3.5 vemos que bonds en la dirección horizontal (plano  $XY$ ) sólo vinculan espines de signo opuesto mientras que bonds verticales u oblicuos vinculan espines del mismo signo. Luego si un cluster no cruza la barrera periódica temporal su magnetización –uniforme– será nula.

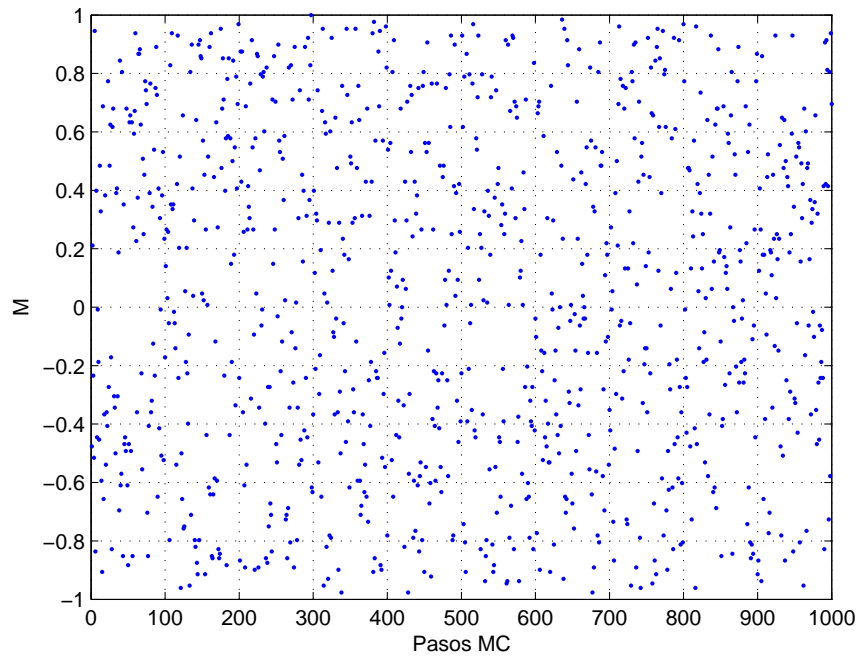


Figura 3.6: Magnetización obtenida a través del winding number temporal para los 1000 primeros pasos de MC, luego de la termalización.

El winding number multiplicado por la longitud temporal introducida en la discretización nos dará la magnetización del cluster correspondiente.

$$m_{C_i} = L_t W_t(C_i), \quad (3.19)$$

donde  $W_t(C_i)$  es el winding number temporal del cluster  $i$ . La suma de todos los  $m_{C_i}$  dividido

por el volumen  $M$  nos dará la magnetización de dicha configuración,

$$m = \frac{1}{M} \sum m_{C_i} \quad (3.20)$$

La Figura 3.6 muestra la magnetización obtenida de esta manera para los  $10^3$  primeros pasos de MC de la simulación ( $T = 0,1$ ). Luego de la termalización se puede apreciar como prácticamente todos los valores en el rango  $[-1, 1]$  se ven representados igualmente, lo cual es consistente con una magnetización nula de acuerdo al teorema de Mermin-Wagner [21]. La Figura 3.7 muestra la magnetización promedio para 15 simulaciones a temperaturas entre 0,01 y  $T = 0,35$ .

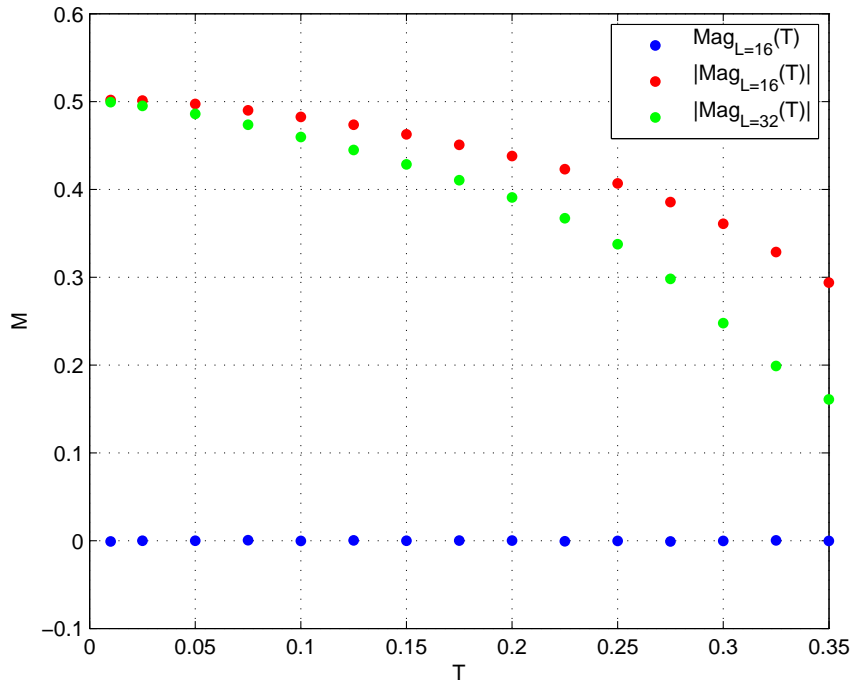


Figura 3.7: Magnetización obtenida mediante el Winding number temporal para simulaciones del modelo de Heisenberg isotrópico en redes cuadradas, con  $L = 16$  y  $L = 32$ , y para temperaturas entre  $T = 0,01$  y  $T = 0,35$ . Se usaron  $10^6$  configuraciones para estimar los promedios, la curva azul muestra el promedio de la magnetización, lo cual es consistente con el teorema de M-W mientras que la curva roja y verde muestran el promedio del valor absoluto de la magnetización. Cabe destacar la semejanza a la Figura 3.11 en el mismo rango de temperaturas, la cual se analiza en la Figura 3.12.

### 3.2.2. Observables mejorados

Una de las principales ventajas de los algoritmos de clusters es la posibilidad de estimar cantidades físicas durante el proceso de creación de los cluster. Esto se traduce en un ahorro de tiempo de cálculo y una mejora en la estadística de los promedios obtenidos. Una de estas cantidades es la susceptibilidad magnética [35, 36], definida por

$$\chi_{s,u} = \frac{1}{L^2} \int_0^\beta dt \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ \hat{M}_{s,u}^3(0) \hat{M}_{s,u}^3(t) e^{-\beta H} \right] \quad (3.21)$$

donde

$$\hat{M}_s^3 = \sum_{x \in \Lambda} (-1)^x \hat{S}_x^3 \quad (3.22)$$

$$\hat{M}_u^3 = \sum_{x \in \Lambda} \hat{S}_x^3. \quad (3.23)$$

Discretizando esta integral e interpretando  $\hat{M}^3(0)$  como una magnetización de referencia, obtenemos

$$\chi_{s,u} = \frac{1}{L^2} \frac{\beta}{L_t} \left\langle \sum_{i=1}^{L_t} M_{s,u}^3(\text{ref}) M_{s,u}^3(i) \right\rangle = \frac{1}{L^2} \left( \frac{\beta}{L_t} \right)^2 \frac{1}{\beta} \left\langle \sum_{i=1}^{L_t} \sum_{j=1}^{L_t} M_{s,u}^3(j) M_{s,u}^3(i) \right\rangle \quad (3.24)$$

$$= \frac{\beta}{L^2 L_t^2} \left\langle \left( \sum_{i=1}^{L_t} M_{s,u}^3(i) \right)^2 \right\rangle = \frac{\beta}{L^2 L_t^2} \langle (M_{s,u})^2 \rangle \quad (3.25)$$

donde  $L^2 = L_x L_y$  es el volumen de la red original. Mientras  $M_{s,u}^3(i)$  es la componente 3 de la magnetización –staggered y uniforme– del plano temporal  $i$ ,  $M_{s,u}^3 = \sum_{i=1}^{L_t} M_{s,u}^3(i)$  es la magnetizador sumada sobre todo el tiempo euclidiano. Las magnetizaciones  $M_{s,u}$  se entienden como staggered y uniforme, la primera se asocia a la magnetización de un sistema antiferromagnético y la segunda a la magnetización de un sistema ferromagnético.

Finalmente las magnetizaciones  $M_{s,u}$  se pueden escribir en términos de los tamaños de los clusters  $|C_i|$  y del winding number temporal  $W_t(|C_i|)$  asociado a cada cluster [35]. Para la magnetización sataggered cada cluster  $C_i$  posee una magnetización staggered  $M_s^{C_i} = \pm C_i$ ,

luego  $M_s = \sum_i M_s^{C_i}$  para todos los cluster en la configuración.

$$\chi_s = \frac{\beta}{L_t^2 L^2} \left\langle \sum_{C_i} |C_i|^2 \right\rangle \quad (3.26)$$

De manera similar la magnetización uniforme es  $M_u = \sum_i M_u^{C_i}$  donde  $M_u^{C_i} = L_t W_t(|C_i|)$

$$\chi_u = \frac{\beta}{L^2} \left\langle \sum_{C_i} [W_t(|C_i|)]^2 \right\rangle \quad (3.27)$$

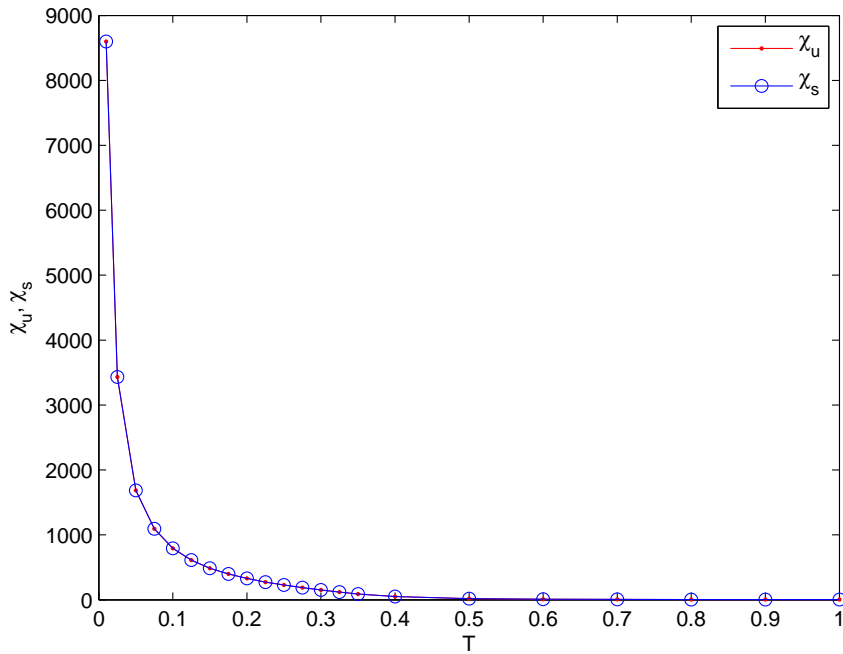


Figura 3.8: Susceptibilidades magnéticas obtenidas a través de las Ecuaciones (3.26) y (3.27) para el modelo de Heisenberg isotrópico en una red cuadrada con  $L = 16$ , a temperaturas entre  $T = 0,01$  y  $T = 1,0$ . Se consideraron en ambos casos  $10^6$  configuraciones para calcular los observables.

Dado que los break ups definidos en la Figura 3.4 sólo vinculan espines del mismo signo cuando se encuentran en planos temporales distintos, mientras que si se encuentra en el mismo plano temporal siempre serán del mismo signo, junto con el hecho que para bajas temperaturas todos los clusters son loops que se cierran a través de la dimensión temporal euclidiana, es de esperar que estas dos cantidades  $\chi_{11}$  y  $\chi_{33}$  –Figura 3.8 – coincidan a bajas temperaturas.



### 3.2.3. Función densidad de probabilidad mejorada para la magnetización

Otra cantidad física de importancia que se puede obtener de estas simulaciones es la función densidad de probabilidad o PDF de la magnetización o parámetro de orden. Dada la estructura de los clusters, la magnetización de un cluster queda representada por su longitud, independientemente de la cuantización utilizada. Para describir la PDF de la magnetización usamos la expresión introducida en [36–38],

$$\begin{aligned}
 p_1(m) &= \frac{1}{2} [\delta_{m,|C_1|} + \delta_{m,-|C_1|}] & (3.28) \\
 p_2(m) &= \frac{1}{2} [P_1(m + |C_2|) + P_1(m - |C_2|)] \\
 &\vdots \\
 p_i(m) &= \frac{1}{2} [P_{i-1}(m + |C_i|) + P_{i-1}(m - |C_i|)] & (3.29)
 \end{aligned}$$

la cual nos muestra una manera recursiva de construir el histograma de la magnetización, donde  $C_i$  representa el tamaño del cluster  $i$  y toma los valores  $m = -M, -M + 1, \dots, 0, \dots, M - 1, M$ . Aquí  $M = L_x L_y L_t$  es el número de puntos o volumen en la red. Las dos entradas del primer término corresponden a las dos posibles orientaciones del primer cluster, donde cada una aparece con probabilidad 1/2. En el  $i$ -ésimo paso un nuevo histograma  $p_i(m)$  se construye en función del anterior. Finalmente para  $i = N_c$ , donde  $N_c$  es el número de clusters generados en dicha configuración, obtenemos

$$p(m) = \langle p_{N_c}(m) \rangle \quad (3.30)$$

donde el promedio se calcula sobre todos los histogramas obtenidos para cada configuración generada por el algoritmo. Luego la cantidad  $p(m)$  es la función distribución de probabilidad de la tercera componente de la magnetización  $\Phi_3$ <sup>4</sup>.

La mejora está basada en el hecho que un cluster puede cambiar su magnetización en 180° sin que signifique un cambio energético, de hecho, el algoritmo lo hace con probabilidad 1/2 de manera independiente de los clusters que lo rodean. Luego si tenemos una configuración con  $N_c$  clusters, podemos generar  $2^{N_c}$  nuevas configuraciones independientes considerando todas las combinaciones de las posibles orientaciones de dichos clusters. Esto lleva a introducir un factor  $M^2$  de costo computacional del cálculo del observable mejorado, pero además introduce

---

<sup>4</sup>Los grados internos de libertad de los espines para el modelo de Heisenberg isotrópico considera 3 direcciones.

un factor  $2^{N_c}$  de ganancia estadística, lo cual permite obtener resultados de alta calidad con pocos pasos –actualizaciones completas de la red– MC. Dicha mejora se puede apreciar en la Figura 3.9.

Por construcción la distribución  $p(m)$  está correctamente normalizada, es decir,

$$\sum_{m=-M}^M p(m) = 1 \quad (3.31)$$

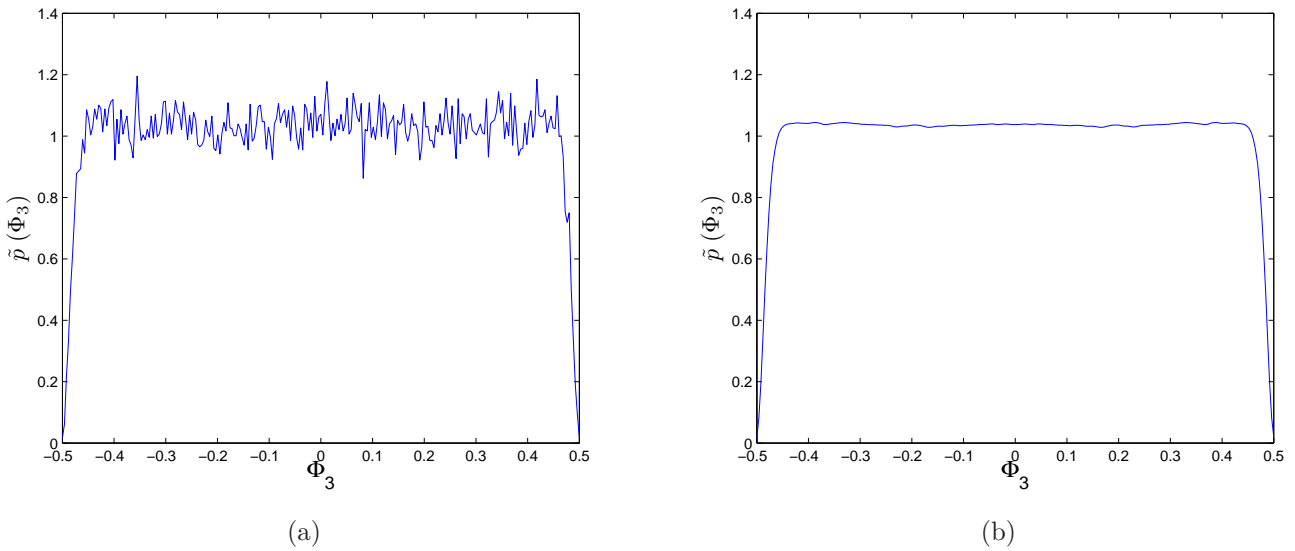


Figura 3.9: Función distribución de probabilidad  $\tilde{p}(\Phi_3)$  de la magnetización de la componente  $\hat{\mathbb{3}} \Phi_3$  para el modelo de Heisenberg isotrópico en una red cuadrada con  $L = 16$  a temperatura  $T = 0,1$ . Se consideraron en ambos casos  $10^5$  configuraciones para estimar el observable. **(a)** Función distribución de probabilidad de la magnetización usando la magnetización –obtenida a través del winding number– para cada configuración. **(b)** Función distribución de probabilidad mejorada usando el método descrito en 3.2.4. Se observa una clara disminución del ruido estadístico al utilizar el observable mejorado.

Luego si deseamos conocer la PDF para el módulo de la magnetización  $\Phi$  debemos usar la transformación [37]

$$4\pi\Phi^2 p(\Phi) = -2\Phi_3 \frac{d\tilde{p}(\Phi_3)}{d\Phi_3} \quad (3.32)$$

donde

$$\tilde{p}(\Phi_3) = \frac{p(m)}{d\Phi_3} = \frac{M}{4} p(m), \quad d\Phi_3 = \frac{4}{M} \quad \text{y} \quad \Phi_3 = \frac{m}{2M}. \quad (3.33)$$

El factor 2 en el denominador de  $\Phi_3$  corresponde al hecho que el modelo en cuestión es de

espín 1/2. Por otro lado, como una consecuencia directa de la forma en la cual se separó el Hamiltoniano para realizar la discretización temporal – Fórmula de Trotter-Suzuki en 4 pasos –, todos los clusters son un múltiplos de 8, luego las entradas distintas de cero en el histograma  $p(m)$  también corresponden a múltiplos de 8, de donde se concluye que  $d\Phi_3 = 4/M$ .

La Ecuación (3.32) asegura la correcta normalización [37] del histograma, en efecto

$$4\pi \int_0^\infty d\Phi \Phi^2 p(\Phi) = -2 \int_0^\infty d\Phi_3 \Phi_3 \frac{d\tilde{p}(\Phi_3)}{d\Phi_3} = 2 \int_0^\infty d\Phi_3 \tilde{p}(\Phi_3) = \int_{-\infty}^\infty d\Phi_3 \tilde{p}(\Phi_3) = 1. \quad (3.34)$$

Se realizaron una serie de simulaciones usando el algoritmo propuesto en [18] para el modelo de Heisenberg isotrópico ferromagnético ( $J = -1$ ) en una red cuadrada de  $L = 16$  para 22 temperaturas entre  $T = 0,01$  y  $T = 1,0$ . La Figura (3.10) muestra  $\tilde{p}(\Phi_3)$  y  $p(\Phi)$  para 5 valores diferentes de temperatura en el rango dicho previamente.

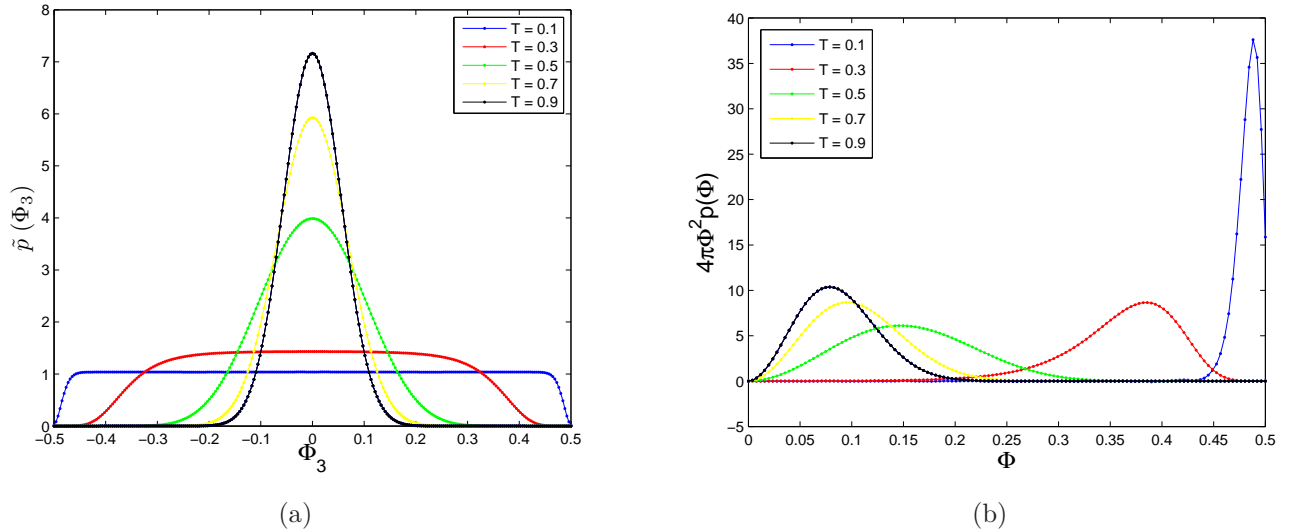


Figura 3.10: Función distribución de probabilidad para el modelo de Heisenberg isotrópico en una red cuadrada con  $L = 16$  para temperaturas entre  $T = 0,1$  y  $T = 0,9$ . Se consideraron en ambos casos  $10^6$  configuraciones para calcular el observable. **(a)** Función distribución de probabilidad de la magnetización para la magnetización de la componente 3  $\tilde{p}(\Phi_3)$ , Ecuación (3.33) –primera expresión–. **(b)** Función distribución de probabilidad de la magnetización para la magnetización  $p(\Phi)$ , dada por la Ecuación (3.32).

Para las 22 curvas ( $p(\Phi)$ ) obtenidas en la simulación, se calcularon sus máximos para obtener así el promedio de la magnetización para cada temperatura. Con esto se obtiene una curva de magnetización la cual se ve en la Figura 3.11.

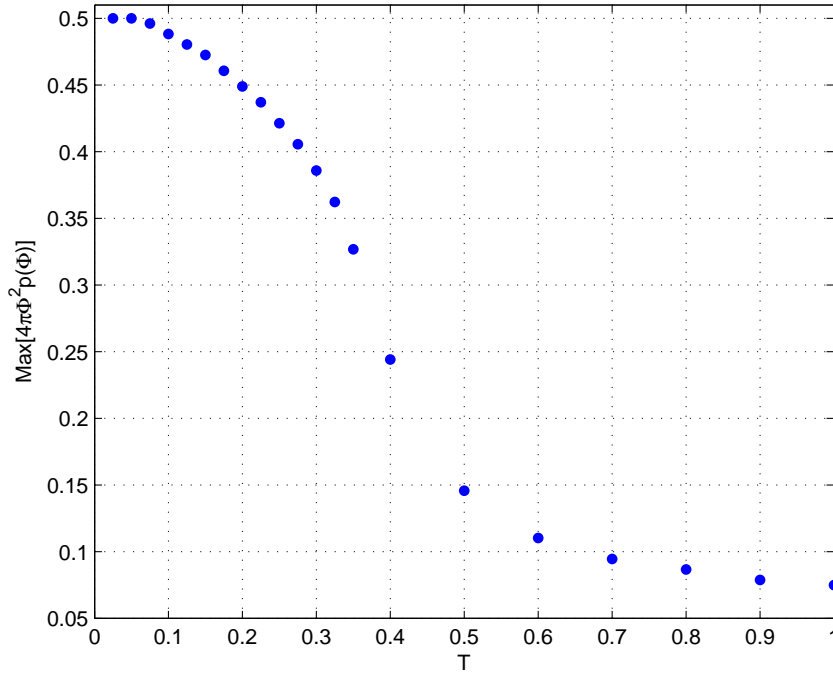


Figura 3.11: Magnetización en función de la temperatura obtenida a través de los máximos de la PDF, obtenida como se describe en la Sección 3.2.4. 3.2.4.

### 3.2.4. Comportamiento a bajas temperaturas del parámetro de orden

En la literatura podemos encontrar expresiones perturbativas para el parámetro de orden en modelos de espín cuántico [39, 40], en ellas se propone una serie de exponentes críticos de la forma

$$\langle \Phi \rangle = c - a_0 T^{b_0} - a_1 T^{b_1} - a_2 T^{b_2} - a_3 T^{b_3} \quad (3.35)$$

Sin embargo, datos experimentales obtenidos en materiales magnéticos [15] sugieren la existencia de una expansión del tipo

$$\langle \Phi \rangle = c - a_0 T^{b_0}, \quad (3.36)$$

más aún, en dichos resultados el exponente crítico experimenta un cambio en la región entre  $T = 0$  y  $T = T_c$  llamada región de crossover.

En las secciones anteriores se obtuvo la PDF del valor absoluto<sup>5</sup> de la magnetización para el modelo de Heisenberg 2D de espín 1/2, calculado a partir del winding number temporal multiplicado por la longitud  $L_t$  y mediante los máximos de la PDF obtenida mediante un método mejorado el cual introduce una ganancia  $2^{N_c}$ , siendo  $N_c$  el número de cluster creados por la simulación en un paso de Montecarlo. La Figura 3.12 muestra la PDF del parámetro de orden en ambos casos y además un ajuste a ambas curvas según la Ecuación (3.35).

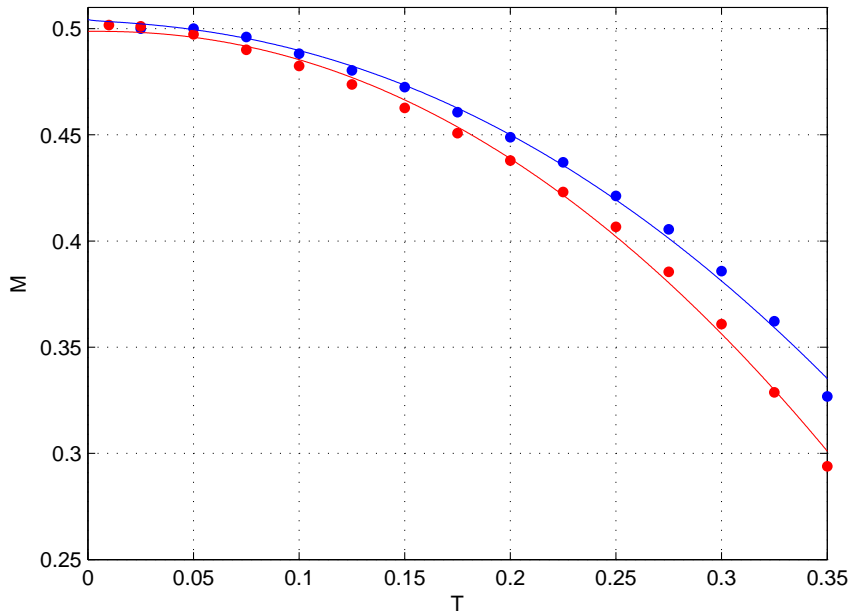


Figura 3.12: Magnetización del modelo de Heisenberg 2D isotrópico de espín 1/2 para  $L = 16$ . Los puntos azules corresponde a la magnetización obtenida mediante el cálculo de los máximos de la PDF –Figura 3.11–, mientras que los puntos rojos corresponden a la magnetización obtenida como el valor absoluto del winding number temporal por  $L_t$  –Figura 3.7–. Las líneas continuas corresponden a ajustes del tipo  $c - a_0T^{b_0} - a_1T^{b_1} - a_2T^{b_2} - a_3T^{b_3}$  los valores de los coeficientes aparecen en la Tabla 3.1. El coeficiente de calidad del ajuste en ambos casos es  $R^2 = 0,99$ .

La Figura 3.13 muestra ambos tipos de expansión, Ecuaciones (3.35) y (3.36) para la magnetización del parámetro de orden del modelo de Heisenberg 2D isotrópico en una red de tamaño  $L = 32$ . En ambos casos vemos un ajuste de buena calidad ( $R^2 = 0,99$ ) y una coincidencia en el exponente crítico principal (mayor para el caso de 4 exponentes).

Analizando la Figura 3.13 junto con la tablas 3.2, podemos apreciar que el exponente

<sup>5</sup>Debido al teorema de Mermin-Wagner se espera un valor nulo, razón por la cual se consideró el valor absoluto.

Tabla 3.1: Exponentes críticos y coeficientes de la expansión tipo  $c - a_0T^{b_0} - a_1T^{b_1} - a_2T^{b_2} - a_3T^{b_3}$  obtenidos mediante el observable mejorado de la PDF (mejorada) y mediante el winding number temporal (no mejorada) para las curvas de la figura 3.12.

Método/Coef.	$a_0$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$b_0$	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$c$
mejorada	1,315	0,05671	0,004209	0,1622	2,177	1,341	0,2729	2,061	0,5047
no mejorada	1,334	-0,6327	-0,179	1,291	2,182	1,932	1,469	1,855	0,4987

Tabla 3.2: Exponentes críticos y coeficientes para las expansiones del tipo  $c - a_0T^{b_0} - a_1T^{b_1} - a_2T^{b_2} - a_3T^{b_3}$  (Ajuste 1) y  $c - a_0T^{b_0}$  (Ajuste 2). Ambos tipos de ajuste fueron aplicados a la curva de magnetización obtenida a través del winding number temporal para el modelo de Heisenberg 2D isotrópico para  $L = 32$  figura 3.13.

Ajuste/Coef.	$a_0$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$b_0$	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$c$
Ajuste 1	2,579	-0,03245	0,2779	-0,2331	1,98	1,365	0,7435	0,6916	0,4953
Ajuste 2	3,007	-	-	-	2,101	-	-	-	0,4909

crítico  $\beta$  se acerca al valor 2 obtenido de manera experimental por Köbler [15] con un error porcentual de 0,01 y 0,0505 respectivamente para los dos tipos de ajuste que aparecen en la Tabla 3.2.

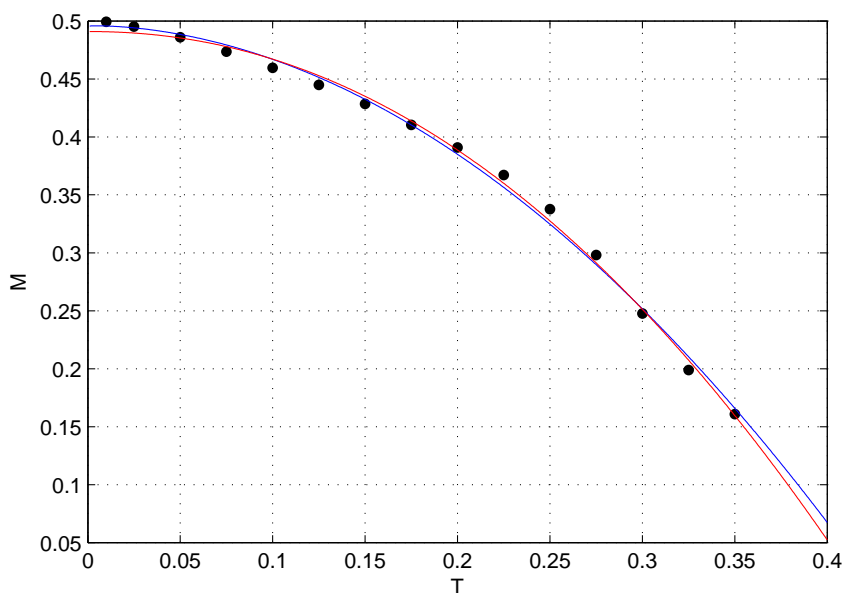


Figura 3.13: Magnetización del modelo de Heisenberg 2D isotrópico de espín 1/2 para  $L = 32$  (puntos negros), la línea azul corresponde a un ajuste del tipo  $c - a_0T^{b_0} - a_1T^{b_1} - a_2T^{b_2} - a_3T^{b_3}$  mientras que los de la línea roja corresponde a un ajuste del tipo  $c - a_0T^{b_0}$ . Los valores de los coeficientes aparecen en la Tabla 3.2. El coeficiente de calidad del ajuste en ambos casos es  $R^2 = 0,99$ .





# Capítulo 4

## Conclusiones generales y problemas abiertos

Respecto a las técnicas para simular modelos de espín clásico podemos concluir que:

- Gracias a la autoconsistencia proporcionada por el estudio de tamaño finito –descrito en la Sección 2.4–, no es necesario conocimiento previo del modelo a estudiar. Sin embargo, esta ventaja no es representada por el modelo de Ising, cuyo comportamiento está ampliamente estudiado en dimensión  $d \leq 2$ , aún así se escogió este modelo para poder comparar los resultados obtenidos con los resultados de Swendsen [12] y para el posterior estudio de la PDF de la magnetización, estudio que permitirá discutir la hipótesis de “universalidad generalizada” que aparece en [3, 4].
- El método CARG ha demostrado ser de gran utilidad a la hora de obtener exponentes críticos con gran precisión para modelos de espín clásico como el modelo de Ising en dimensión 2, obteniendo resultados que a lo más difieren de los exactos en un 1 % gracias al uso de algoritmos de cluster.
- La función distribución de la probabilidad (PDF) de la magnetización o parámetro de orden resulta invariante bajo las transformaciones del grupo de renormalización, lo cual muestra la gran estabilidad numérica del método propuesto.
- El estudio de la PDF en una región cercana a la temperatura crítica muestra que dicha curva exhibe un colapso a la curva universal descrita en [2–6] para una temperatura

distinta a la cual se obtienen los exponentes crítico, Figura 2.7. Dado que a la temperatura para la cual ocurre este colapso para el modelo de Ising en dimensión  $d = 2$  [4], no es posible obtener exponentes críticos representativos de la clase de equivalencia a la cual pertenece el modelo de Ising concluimos no que existe invarianza de escala a esa temperatura, razón por la cual entendemos el colapso de la PDF por una restricción en el parámetro de orden –La magnetización no puede ser mayor a 1–, lo cual es consistente con estadística extrema junto con efectos de red finita [11], en vez que un fenómeno de universalidad como es conjeturado en [4].

Tras familiarizarnos con el método propuesto por Wiese [18] se ha escrito un código en C++ para simular el modelo de Heisenberg anisotrópico en dimensión  $d = 2$ , observables mejorados se han usado para el cálculo de las susceptibilidades y de la PDF [35–38], los cuales han permitido calcular las curvas de magnetización a bajas temperaturas para estudiar el fenómeno de crossover descritos en [15] y también transiciones de fase cuántica a temperatura cero.

Debido a este estudio podemos concluir que:

- Resultados preliminares concuerdan con gran precisión con los resultados de la literatura para los modelos considerados [37] y [38]. Esto abre la posibilidad de utilizar algoritmos de cluster para el estudio de modelos de espín cuántico en la región de crossover para analizar las conjeturas propuestas en [15] basadas en resultados experimentales [41].
- Mediante el uso de observables mejorados para construir la PDF de la magnetización se ha logrado obtener alta precisión numérica con un numero menor de pasos de Montecarlo, en particular con  $10^5$  se han logrado suprimir todas las fluctuaciones en la PDF de la magnetización, Figura 3.9.
- La divergencia de la susceptibilidad magnética –Figura 3.8– para bajas temperatura es evidencia de la existencia de una transición de fase cuántica a temperatura cero.
- Las expansiones para el comportamiento del parámetro de orden a bajas temperaturas en sistemas de espín cuántico debido a la interacción de magnones en la red, por lo general son una suma de coeficientes con una dependencia de la temperatura elevado a exponente crítico [40], como la ec. (3.35) [39, 40]. Sin embargo, la figura 3.13 muestra que dicho comportamiento está principalmente gobernado por el exponente crítico principal

–mayor– siendo el resto de los términos en la expansión correcciones cuánticas debidas a las interacciones entre ondas de espín para temperaturas cercanas a cero.

- Para el modelo de Heisenberg isotrópico se ha obtenido el exponente crítico  $\beta$  con un valor aproximado a 2, Tablas 3.1 y 3.2, lo cual concuerda con los resultados experimentales obtenidos por Köbler [15] en la región de bajas temperaturas.

## *Algunos problemas abiertos*

A continuación un listado de problemas que pueden extender el trabajo de esta tesis, y de problemas abiertos relacionados

- El método CARG –por construcción– es capaz de calcular sólo un exponente crítico, por lo que, si se realiza una renormalización de la red durante la simulación del sistema cuántico y se calculan las correlaciones entre espines de las distintas redes renormalizadas –ecs. (2.21) y (2.22)– se podría obtener el exponente crítico principal del modelo. También resulta de gran interés verificar el comportamiento a bajas temperaturas de diferentes cantidades físicas obtenidas analíticamente por Dyson [39] y más recientemente por Hofmann [40].
- El método descrito en la sección 3.2.4 para calcular la PDF mediante observables mejorados, se puede implementar para cualquier algoritmo que use dinámica de cluster para simular un sistema de espín clásico o cuántico, en particular permite para el modelo de Ising calcular la PDF en todo el rango de magnetización  $[-M, M]$  sin las fluctuaciones características que presenta este modelo luego de 3 a 4 desviaciones estandar lejos del promedio [11]. La implementación de esta técnica al modelo de Ising en dimensión  $d = 3$ , por ejemplo, puede permitir obtener resultados numéricos de alta precisión para un modelo que aún no posee una solución exacta.
- Cambios en la geometría de la red junto con el valor del espín pueden llevar a simular una serie de sistemas distintos, geometrías tipo panal de abeja (honeycomb) se han implementado por Wiese [42] permitiendo el estudio numérico de materiales magnéticos con diferentes estructuras atómicas.

El estudio de modelos de espín cuántico en la región de crossover, que incluye desde una transición de fase cuántica para  $T = 0$ , hasta una a temperatura finita es de gran

relevancia. En efecto, en [16, 23, 24] se muestra un ejemplo de una transición tipo líquido cuántico a través de un modelo de espín  $1/2$  cuántico con interacción tipo XY definido en una red con geometría tipo panal de abeja (honeycomb). En esta transición exótica compiten dos fases ordenadas y su estudio numérico es posible gracias a algoritmos de cluster desarrollados originalmente por [37] e implementados en el presente trabajo de tesis.

- Implementar algoritmos para modelos de espín distintos de  $1/2$ , como por ejemplo Heisenberg de espín  $S = 1$ . La construcción del algoritmo permite representar sistemas con distintos valores de espín. Probar con  $S = 1$  para tratar de obtener exponentes críticos para las curvas de magnetización obtenidas en [15] de manera experimental o [40] por métodos de teoría de perturbación quiral.
- Expandir el método para simular modelos tridimensionales donde el teorema de Mermin-Wagner [21] permite una magnetización espontánea a temperatura diferente de cero, para el modelo de Heisenberg de espín  $1/2$ . Esto implicaría construir una nueva descomposición mediante la fórmula de Trotter-Suzuki y una nueva interpretación de la dimensión temporal euclidiana introducida al usar la integral de camino, en vez de conectar  $L_t$  planos temporales (matrices cuadradas en dos dimensiones de largo  $L$ ) será necesario conectar  $L_t$  matrices temporales en 3 dimensiones a través de los break ups que describa la matriz de transferencia del modelo.

# Apéndice A

## Loop Cluster Algorithm

Este apéndice tiene por objetivo ilustrar de manera concreta la realización del Loop Cluster Algorithm [18] desarrollada para la simulación de los sistemas presentados en esta tesis.

Para asegurar la correcta convergencia del algoritmo a configuraciones representativas se debe partir de una configuración inicial que sea una combinación de las transiciones elementales definidas en la matriz de transferencia mostrada en la Ecuación (3.9). La configuración inicial para empezar la simulación estará constituida solo por plaquetas del tipo  $A$ , es decir, solo espines clásicos de signo positivo (+1). Luego la dinámica del algoritmo se puede resumir en los siguientes pasos:

1. Definir plaquetas activas según la descomposición de Trotter escogida.
2. Clasificar las plaquetas activas como tipo:  $A$ ,  $B$  o  $C$ .
3. Para cada una de estas plaquetas se debe definir que tipo de Break ups presentara: Verticales, Horizontales o tipo Cruz.
4. Identificar los cluster y actualizarlos con probabilidad  $1/2$ , se debe tener en cuenta que los clusters siempre son líneas cerradas y de tamaño par.
5. Eliminar todos los bonds presentes que definen los cluster para obtener una nueva configuración de espines. Volver al paso 1.

A continuación se procederá a explicar estos pasos en detalle.

## A.1. Plaquetas activas

Sea  $S$  una matriz bidimensional de tamaños  $L_x$  y  $L_y$  en las direcciones  $\hat{1}$  y  $\hat{2}$  respectivamente. Esta matriz esta caracterizada por los indices  $m$  en la dirección  $\hat{1}$  y  $n$  en la dirección  $\hat{2}$ . Si analizamos la Figura 3.1 en conjunto con la descomposición de Trotter escogida, Ecuación (3.3), entendemos que:

- $\hat{H}_1$  considera un espín cuyos indices cumplen con que  $m+n$  sea par y lo hace interactuar con un espín en la dirección  $\hat{2}$  de indices  $(m, n+1)$ .
- $\hat{H}_2$  considera un espín cuyos indices cumplen con que  $m+n$  sea par y lo hace interactuar con un espín en la dirección  $\hat{1}$  de indices  $(m+1, n)$ .
- $\hat{H}_3$  considera un espín cuyos indices cumplen con que  $m+n$  sea impar y lo hace interactuar con un espín en la dirección  $\hat{2}$  de indices  $(m, n+1)$ .
- $\hat{H}_4$  considera un espín cuyos indices cumplen con que  $m+n$  sea impar y lo hace interactuar con un espín en la dirección  $\hat{1}$  de indices  $(m+1, n)$ .

Luego, mediante la interpretación de integral de camino se introduce una discretización en el intervalo  $[0, \beta]$ , esto introduce una dimensión extra a la matriz  $S$  que estará caracterizada por una longitud  $L_t$  definida en la Ecuación (3.14). A esta nueva dimensión le asignaremos el indice  $t$ . Por ello, la matriz  $S$  pasa a ser un objeto de tres dimensiones caracterizada por los indices  $(m, n, t)$ <sup>1</sup>. Condiciones de borde periódicas se considerarán en las 3 direcciones.

La dinámica definida en el Hamiltoniano –Ecuación (3.1)– sera realizada en 4 pasos cada uno de ellos a un tiempo distinto, por lo tanto,  $\hat{H}_1$  solo estará activo a un tiempo  $t$ ,  $\hat{H}_2$  a un tiempo  $t+1$ ,  $\hat{H}_3$  a un tiempo  $t+2$ , y  $\hat{H}_4$  a un tiempo  $t+3$ . La realizacion de estos 4 pasos se entendera como un paso  $\epsilon$ . Por otro lado, la Ecuación (3.7) nos dice que que las transiciones elementales definidas en la matriz de transferencia vincula dos espines vecinos a un tiempo  $t$  con dos espines vecinos a un tiempo  $t+1$ . Esto no lleva a definir plaquetas activas en la matriz  $S$ , esto se ilustra en la Figura 3.2.

En la practica el algoritmo debe ser capaz de reconocer la estructura de plaquetas activas en cada uno de los 4 cortes temporales que conforman un paso epsilon completo. Por ejemplo,

<sup>1</sup>Las longitudes  $L_x$  y  $L_y$  deben ser pares mientras que  $L_t$  debe ser un múltiplo de 4.

si el sistema tiene dimensiones  $L_x = L_y = 4$  y  $L_t = 8$  se estarán considerando 2 pasos epsilon, donde la estructura de plaquetas activas se repite en el segundo paso  $\epsilon$ . Para esto se deben considerar la siguiente pregunta. ¿En que corte temporal (caracterizado por el indice  $t$ ) se encuentra la plaqueta?. Para ello separamos el conjunto de valores del indice  $t$  en 4 conjuntos:

- Si  $t = 1, 5, 9, \dots, L_t - 3$  estará activo  $\hat{H}_1$ , por lo tanto, la plaqueta estará conformada por:  $S(m, n, t), S(m, n + 1, t), S(m, n, t + 1), S(m, n + 1, t + 1)$ , tal que  $m + n$  sea par.
- Si  $t = 2, 6, 10, \dots, L_t - 2$  estará activo  $\hat{H}_2$ , por lo tanto, la plaqueta estará conformada por:  $S(m, n, t), S(m + 1, n, t), S(m, n, t + 1), S(m + 1, n, t + 1)$ , tal que  $m + n$  sea par.
- Si  $t = 3, 7, 11, \dots, L_t - 1$  estará activo  $\hat{H}_3$ , por lo tanto, la plaqueta estará conformada por:  $S(m, n, t), S(m, n + 1, t), S(m, n, t + 1), S(m, n + 1, t + 1)$ , tal que  $m + n$  sea impar.
- Si  $t = 4, 8, 12, \dots, L_t$  estará activo  $\hat{H}_4$ , por lo tanto, la plaqueta estará conformada por:  $S(m, n, t), S(m + 1, n, t), S(m, n, t + 1), S(m + 1, n, t + 1)$ , tal que  $m + n$  sea impar.

## A.2. Clasificar las plaquetas activas

Para ello hacemos la siguiente pregunta. ¿Que valores tienen los 4 espines que conforman la plaqueta?, esto determinara si es tipo  $A$ ,  $B$  o  $C$ .

- Si  $S(m, n, t) = S(m, n + 1, t) = S(m, n, t + 1) = S(m, n + 1, t + 1)$ , la plaqueta es tipo  $A$ .
- Si  $S(m, n, t) = S(m, n, t + 1) \neq S(m, n + 1, t) = S(m, n + 1, t + 1)$ , la plaqueta es tipo  $B$ .
- Si  $S(m, n, t) = S(m, n + 1, t + 1) \neq S(m, n + 1, t) = S(m, n, t + 1)$ , la plaqueta es tipo  $C$ .

## A.3. Definir Break ups

Cada plaqueta activa puede tener 2 tipos de Break ups distintos, ver Figura 3.4, dependiendo si es una plaqueta tipo  $A$ ,  $B$  o  $C$ . La realización de uno u otro viene dada por las probabilidades descritas en la Ecuación (3.13). Una vez que se ha escogido uno de los dos

posibles tipos de Break ups, estos pasan a ser bonds que eventualmente formaran clusters. Sea  $r$  un número aleatorio entre 0 y 1.

- Sí la plaqueta es tipo  $A$  puede tener Break ups del tipo: Verticales o en cruz.
  - Si  $P_a^A > r$ , se vinculan los espines  $S(m, n, t)$  con  $S(m, n, t + 1)$  y  $S(m, n + 1, t)$  con  $S(m, n + 1, t + 1)$  mediante bonds verticales.
  - Si no, se vinculan los espines  $S(m, n, t)$  con  $S(m, n + 1, t + 1)$  y  $S(m, n + 1, t)$  con  $S(m, n, t + 1)$  mediante bonds en cruz.
- Sí la plaqueta es tipo  $B$  puede tener Break ups del tipo: Horizontales o verticales.
  - Si  $P_c^B > r$ , se vinculan los espines  $S(m, n, t)$  con  $S(m, n + 1, t)$  y  $S(m, n, t + 1)$  con  $S(m, n + 1, t + 1)$  mediante bonds horizontales.
  - Si no, se vinculan los espines  $S(m, n, t)$  con  $S(m, n, t + 1)$  y  $S(m, n + 1, t)$  con  $S(m, n + 1, t + 1)$  mediante bonds verticales.
- Sí la plaqueta es tipo  $C$  puede tener Break ups del tipo: En cruz o horizontales.
  - Si  $P_d^C > r$ , se vinculan los espines  $S(m, n, t)$  con  $S(m, n + 1, t + 1)$  y  $S(m, n + 1, t)$  con  $S(m, n, t + 1)$  mediante bonds en cruz.
  - Si no, se vinculan los espines  $S(m, n, t)$  con  $S(m, n + 1, t)$  y  $S(m, n, t + 1)$  con  $S(m, n + 1, t + 1)$  mediante bonds horizontales.

En este punto la red esta llena de bonds que definen cluster de tamaño par. Todos los cluster son líneas cerradas.

## A.4. Identificar y actualizar los Clusters

En el paso anterior se han establecido todos los posibles bonds en la red estos ya han formado los clusters, por lo que solo falta identificarlos y actualizarlos con probabilidad  $1/2$ . Para optimizar el algoritmo, los clusters serán actualizados durante el proceso de identificación. Sea  $CL$  una matriz de las mismas dimensiones que  $S$



- Sea  $CL(m, n, t) = 0$  para todo  $\{m, n, t\} \leq \{L_x, L_y, L_t\}$ . Esta matriz sera usada para identificar si un espín pertenece a un cluster o no.
- Sea  $label = 1$ , esta variable sera la etiqueta del cluster.
- Se recorre la matriz  $S$  de manera ordenada preguntando,
  - Si  $CL(m, n, t) = 0$ , esto implica que el espín en cuestión no pertenece a ningún cluster, por lo tanto, empezamos a crecer un cluster a partir de él.
    1. Sea  $r$  un número aleatorio entre 0 y 1. Este número se mantendra constante para todos los espines dentro del cluster de etiqueta  $label$ .
    2.  $CL(m, n, t) = label$ , marca el espín con el valor de la variable  $label$ .
    3. Si  $r > 1/2$ ,  $S(m, n, t) = -S(m, n, t)$ , hace el update del cluster.
    4. Le preguntamos a los vecinos si  $CL(m', n', t') = 0$  y si tienen un bond con el espín  $S(m, n, t)$ , los indices  $(m', n', t')$  corresponden a uno de sus vecinos. Si ambas preguntas son positivas procedemos a repetir este proceso desde el paso 2 en el sitio  $(m', n', t')$ . Esto se puede realizar mediante funciones recursivas o usando el comando *goto* dependiendo del lenguaje escogido para escribir el código del programa.
    5. El proceso se detiene una vez que el cluster esta cerrado.
  - Sea  $label = label + 1$ , aumenta en 1 la etiqueta que sera usada en el próximo cluster.
- Al terminar de recorrer la red se han identificado todos los clusters y se han actualizado con probabilidad  $1/2$ .
- Se eliminan todos los bonds para obtener una nueva configuración de espines.



# Apéndice B

## Teorema de Mermin-Wagner

En 1966 Mermin y Wagner demostraron [21] que fluctuaciones del sistema destruyen por completo el orden generado por las interacciones de corto alcance mostrando que el parámetro de orden en un modelo simétrico en dimensión  $d \leq 2$  es proporcional, con una constante de proporcionalidad finita al campo externo aplicado. Por ello, el parámetro de orden muestra un valor nulo de magnetización espontánea para bajas temperaturas en la ausencia de un campo externo.

Como una conclusión directa de lo anterior, modelos con parámetros de orden que poseen una simetría, por ejemplo rotacional, no presentan estados ordenados debidos a interacciones de corto alcance para  $d \leq 2$  a temperatura distinta de cero.

Otro forma presentar este teorema es debida a Goldstone, el cual considera que cuando un Hamiltoniano que posee una cierta simetría continua generada por un grupo  $\mathcal{G}$ , la cual es parcialmente rota por el sistema debido a una disminución de la energía, de modo que el hamiltoniano solo posee un subgrupo de simetría  $\mathcal{H} \subseteq \mathcal{G}$ , entonces aparecen tantos bosones de Goldstone sin masa como generadores del grupo  $\mathcal{H}$  generadores del grupo  $\mathcal{G}/\mathcal{H}$ . Cada uno de estos bosones produciría una divergencia infraroja presente en su función de correlación asociada [43].



# Apéndice C

## Papers de interes



# Bibliografía

- [1] J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher, and M.E.J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group* (Clarendon Press, Oxford, 1992).
- [2] G. Mack, G. Palma and L. Vergara, Phys. Rev. E **72**, 026119 (2005).
- [3] S.T. Bramwell, P.C.W. Holdsworth and J.-F. Pinton, Nature **396**, 552 (1998).
- [4] S.T. Bramwell, K. Christensen, J.-Y. Fortin, P.C.W. Holdsworth, H.J. Jensen, S. Lise, J. M. Lopez, M. Nicodemi, J.-F. Pinton, M. Sellitto, Phys. Rev. Lett. **84**, 3744 (2000).
- [5] R. Labbe, P.C.W. Holdsworth and J.-F. Pinton, Phys. Rev. E **60**, R2452 (1999).
- [6] G. Palma, T. Meyer and R. Labbe, Phys. Rev. E **66**, 026108 (2002).
- [7] K. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3174–3183 (1971); Phys. Rev. B **4**, 3184–3205 (1971).
- [8] R. H. Swendsen and J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
- [9] U. Wolff, Phys. Rev. Lett., **62**, 361 (1989).

- 
- [10] G. Palma and D. Zambrano, talk published in the Proceedings of “The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory”, July 14–19, 2008 Williamsburg, Virginia, USA. PoS **43** (2008).
- [11] G. Palma, D. Zambrano, Phys. Rev. E. **78**, 061134 (2008).
- [12] R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **42**, 859 (1979); Phys. Rev. B **20**, N° 5 2080 (1979).
- [13] M. Clusel, Jean-Yves Fortin and Peter C.W. Holdsworth, Phys. Rev. E **70**, 046112 (2004); Europhys. Lett. **76**, N°6 1008 (2006).
- [14] S. C. Chapman, G. Rowlands, and N. W. Watkins, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, 2289 (2005).
- [15] U. Köbler and A. Hoser, Physica B **362**, 295?305 (2005);  
Solid State Communications **142**, 600?604 (2007);  
Eur. Phys. J. B **60**, 151–159 (2007);  
*Renormalization Group Theory: Impact on Experimental Magnetism*, Springer (2010).
- [16] S. Sachdev, *Quantum Phase Transition*, (Cambridge University Press, Cambridge 2011).
- [17] C. Itzykson, J.-M. Drouffe, *Statistical Field Theory: From Brownian motion to renormalization and lattice gauge theory*, (Cambridge University Press, 1991).
- [18] U.-J. Wiese and H.-P. Ying, Nuclear Physics B - Proceedings Supplements **30**, 151–159 (1993).
- [19] H. F. Trotter, Proc. Amer. Math. Soc. **10**, 545–551 (1959).



- 
- [20] M. Suzuki, Commun. math. Phys. **51**, 183-190 (1976).
- [21] N.D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133–1136 (1966).
- [22] U. Gerber, C. P. Hormann, G. Palma, U.-J. Wiese, en preparación.
- [23] C. N. Varney, K. Sun, V. Galitsky, and M. Rigol, Phys. Rev. Lett. **107**, 077201 (2011).
- [24] T. Albash and S. Haas, Physics **4**, 62 (2011).
- [25] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117–149 (1944).
- [26] L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*. A Wiley-Interscience Publication (2nd ed. John Wiley & Sons Inc., New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore, 1998).
- [27] K. Huang, *Statistical Mechanics*. (2nd ed. John Wiley & Sons Inc., New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore, 1987).
- [28] J. Du, B. Zheng, J.-S. Wang, J. Stat. Mech. **0605**, 05004 (2006).
- [29] J. Hoshen, R. Kopleman, Phys. Rev. B **14**, 3438 (1976).
- [30] B. Zheng and S. Trimper, Phys. Rev. Lett. **87**, 188901 (2001).
- [31] V. Aji and N. Goldenfeld, Phys. Rev. Lett. **86**, 1007 (2001); S. C. Chapman, G. Rowlands and N. W. Watkins, NPG **9**, 409 (2002).
- [32] S.T. Banks and S.T. Bramwell, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, 5603 (2005).

- [33] G. Palma, Phys. Rev. E **73**, 046130 (2006).
- [34] K. Binder, Z. Physik B **43**, 119 (1981); Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981).
- [35] M. Nyfeler, PhD thesis, Bern University (2009).
- [36] U. Gerber, PhD thesis, Bern University (2011).
- [37] U. Gerber, C. P. Hofmann, F.-J. Jiang, M. Nyfeler, and U.-J. Wiese, J. Stat. Mech. **30**, P03021 (2009).
- [38] U. Gerber, C. P. Hofmann, F.-J. Jiang, G. Palma, P. Stebler and U.-J. Wiese, J. Stat. Mech. **1106**, P06002 (2011).
- [39] F. J. Dyson, Phys. Rev. **102** N°5, 1217 (1956); Phys. Rev. **102** N°5, 1230 (1956).
- [40] C. P. Hofmann, Phys. Rev. B **65**, 094430 (2002).
- [41] G. Palma and D. Zambrano, en preparación.
- [42] F. Kämpfer, B. Bessire, M. Wirz, C. P. Hofmann, F.-J. Jiang, U.-J. Wiese, arXiv:1109.1419v2 [cond-mat.str-el], (2011).
- [43] J. Goldstone, A. Salam, S. Weinberg, Phys. Rev. **127**, 965–970 (1962).