



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

FACULTAD DE CIENCIAS

ENFRIAMIENTOS RAPIDOS DEL MODELO 2D  $O(3)$

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIATURA EN FÍSICA

P R E S E N T A :

MARCO ISRAEL RODRÍGUEZ CORNEJO

TUTOR

WOLFGANG PETER BIETENHOLZ



CIUDAD UNIVERSITARIA, CDMX, 2024

# Índice general

<b>1. Motivación al estudio de sistemas fuera del equilibrio</b>	<b>2</b>
<b>2. Función de partición e integral de trayectorias</b>	<b>3</b>
2.1. Propagador de evolución . . . . .	3
2.2. Rotación de Wick . . . . .	6
<b>3. Modelos de espín</b>	<b>8</b>
3.1. Estructura de una red . . . . .	8
3.2. Modelo 2d $O(3)$ . . . . .	9
3.3. Observables . . . . .	12
3.3.1. Energía . . . . .	12
3.3.2. Magnetización . . . . .	13
3.3.3. Carga topológica . . . . .	13
<b>4. Fenómenos críticos</b>	<b>17</b>
4.1. Parametro de orden . . . . .	17
4.2. Transiciones de fase . . . . .	18
4.3. Función de correlación . . . . .	20
4.4. Universalidad . . . . .	21
4.5. Escalamiento . . . . .	21
<b>5. Mecanismo de Kibble-Zurek</b>	<b>23</b>
5.1. Relacionado al universo temprano . . . . .	23
5.2. Experimentos en helio superfluido . . . . .	24
5.3. Tiempo de auto-correlación . . . . .	25
<b>6. Métodos de Monte Carlo</b>	<b>27</b>
6.1. Algoritmo de Metropolis . . . . .	28
6.2. Algoritmo de Glauber . . . . .	29
6.3. Algoritmo clúster . . . . .	30
<b>7. Simulaciones en equilibrio</b>	<b>32</b>
7.1. Tiempo de autocorrelación . . . . .	32
7.2. Longitud de correlación . . . . .	37
7.3. Exponente crítico dinámico . . . . .	40
<b>8. Simulación de enfriamientos</b>	<b>44</b>
8.1. Enfriamientos rápidos . . . . .	44
<b>9. Resumen y conclusiones</b>	<b>53</b>
<b>A. Distribución aleatoria de vectores en la esfera <math>S^2</math></b>	<b>55</b>
<b>B. Algoritmo Hoshen-Kopelman</b>	<b>58</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>60</b>

# Capítulo 1

## Motivación al estudio de sistemas fuera del equilibrio

La investigación es un proceso largo y requiere gran esfuerzo. En el proceso, los modelos se desechan o se replantean. En la búsqueda de la comprensión de los fenómenos físicos, se han implementado herramientas matemáticas como el cálculo, la estadística y la geometría. La forma de probar los modelos teóricos es por medio de experimentos. Siempre se busca realizar mejores experimentos y obtener mejores mediciones. Las investigaciones continúan de generación en generación, refinando la teoría como la experimentación. De esta forma, el progreso e las investigaciones se encamina en la dirección correcta.

Los estados de la materia y sus transiciones de fase son temas de gran interés en física. Tom W. Kibble y Wojciech H. Zurek se interesaron en el estudio de las clases de universalidad y la formación de defectos topológicos en sistemas al traicionar de fase. Como muchos sistemas presentan ruptura de simetría al pasar por una temperatura crítica, propusieron que la supervivencia de defectos topológicos, se relaciona con el ratio de enfriamiento al que un sistema pasa por la temperatura crítica.

Entre los años 1949 y 1952, Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, y Edward Teller [1], trabajaban en Los Álamos en el desarrollo de la bomba atómica. Su trabajo se centró en comprender la física de las interacciones entre la radiación y la materia bajo condiciones extremas, tales como explosiones, implosiones y la evolución de reacciones nucleares fuera del equilibrio.

En estas circunstancias, los experimentos se vuelven complejos, y la teoría detrás de procesos que involucran interacciones entre un vasto número de partículas resulta demasiado intrincada. Para superar estas limitaciones, desarrollaron una serie de métodos basados en procesos estocásticos, conocidos como métodos de Monte Carlo.

Con el posterior desarrollo de los ordenadores, los métodos de Monte Carlo se volvieron herramientas fundamentales en el estudio de sistemas con incontables grados de libertad.

En este trabajo, se aplicaron los métodos de Monte Carlo al estudio de enfriamientos rápidos de en el modelo 2d  $O(3)$ . Se realizaron simulaciones en equilibrio y fuera del equilibrio. En los experimentos fuera del equilibrio se midieron los defectos topológicos remanentes para diferentes ratios de enfriamiento, esperando resultados compatibles con la ley de escalamiento de Zurek.

## Capítulo 2

# Función de partición e integral de trayectorias

En sistemas físicos que consisten en un gran número de grados de libertad, plantear y resolver las ecuaciones de movimiento para cada variable, en la mayoría de los casos es técnicamente imposible. Si queremos estudiar estos sistemas, es necesario un enfoque diferente.

En mecánica estadística, se renuncia a conocer la trayectoria exacta de cada elemento. A cambio el problema se resuelve con una función de partición. La función de partición contiene toda la información necesaria sobre el sistema que modela. Se define como la suma de las configuraciones  $\sigma$  con energía  $\mathcal{H}[\sigma]$ . En un sistema que depende de la temperatura  $T$ , la función de partición es de la forma

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}[\sigma]}, \quad (2.1)$$

dónde  $k$  es la constante de Boltzmann y  $\beta = 1/kT$ . Usando la función de partición es posible derivar funciones de estado de un sistema como la entropía, el valor esperado de la energía interna etc. Por lo tanto resolver la función de partición es una forma de acceder a las funciones de estado del sistema. Afortunadamente los métodos de Monte Carlo son una forma práctica de resolver numéricamente la función de partición de muchos sistemas.

### 2.1. Propagador de evolución

Erwin Schrödinger introdujo una ecuación que describe la dinámica de un sistema cuántico

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \mathcal{H}|\psi(t)\rangle, \quad (2.2)$$

dónde  $t$  es el tiempo,  $i$  es la unidad imaginaria,  $\hbar$  es la constante de Planck,  $\mathcal{H}$  es el hamiltoniano del sistema y  $|\psi(t)\rangle$  es la función de onda en notación de Dirac.

Cuando Richard Feynman desarrolló su propia formulación de integral de trayectorias, se preguntó si existía un camino para conectar la mecánica estadística con la mecánica cuántica.

R. Feynman encontró una función análoga a la función de partición para sistemas cuánticos y uno de los modelos que se pueden estudiar es el modelo de interés para este trabajo, el modelo 2d  $O(3)$ .

Es de interés describir la evolución de una observable  $O$  de un sistema físico descrito por el Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum p_i^2 + V. \quad (2.3)$$

En la formulación hamiltoniana, se definen los corchetes de Poisson como invariantes respecto a cualquier transformación canónica. La dinámica de la observable se describe por la ecuación

$$\frac{dO}{dt} = \{\mathcal{H}, O\}. \quad (2.4)$$

Paul Dirac formulo una relación entre la formulación hamiltoniana y la mecánica cuántica

$$\{\mathcal{H}, O\} \rightarrow -i\hbar[\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}], \quad (2.5)$$

donde  $\hat{\mathcal{H}}$  y  $\hat{O}$  son operadores en el espacio de Hilbert.

La dinámica del operador  $\hat{O}$  sin dependencia temporal explícita, sigue la ecuación formulada por Heisenberg

$$\frac{d\hat{O}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}]. \quad (2.6)$$

Para pasar de la formulación de Heisenberg a la formulación de Schrödinger aplica la transformación

$$\hat{O}(t) = e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} \hat{O} e^{it\hat{\mathcal{H}}/\hbar}, \quad |\psi(t)\rangle = e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} |\psi\rangle, \quad (2.7)$$

dónde  $|\psi\rangle$  es el vector de estado sin dependencia temporal en la formulación de Heisenberg y  $|\psi(t)\rangle$  es la función de onda en la formulación de Schrödinger.

Los valores esperados se mantienen invariantes a la transformación

$$\langle \psi | \hat{O}(t) | \psi \rangle = \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle. \quad (2.8)$$

Un vector de estado  $|\psi(t)\rangle$  en la formulación de Schrödinger sigue la ecuación

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle. \quad (2.9)$$

Consideremos el caso mas simple dónde  $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ , en el espacio de posiciones el vector de estado es  $|q\rangle$ , la solución a la ecuación de Schrödinger es de la forma

$$\langle q' | \psi(t) \rangle = \int \langle q' | e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} | q \rangle \langle q | \psi \rangle dq. \quad (2.10)$$

Definimos al propagador como la solución a la ecuación de Schrödinger

$$K(q, q'; t) := \langle q' | e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} | q \rangle. \quad (2.11)$$

El propagador, describe la evolución de la función de onda desde el estado  $q$  hasta  $q'$  en tiempo  $t$

$$K(q, q'; t) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{d/2} e^{iS(q, q'; t)/\hbar}. \quad (2.12)$$

dónde  $S(q, q'; t)$  es la acción de la trayectoria desde  $q$  a  $q'$  y  $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ .

$$S(q, q'; t) = \int_0^t \frac{m}{2} \dot{q}^2 = \frac{m}{2t} (q' - q)^2 dt. \quad (2.13)$$

$$K(q, q'; t) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{d/2} \exp \left( i \frac{m}{2t} (q' - q)^2 \right). \quad (2.14)$$

**Teorema. Trotter**

Sean  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$  operadores auto-adjuntos y  $\hat{A} + \hat{B}$  es auto-adjunto en la intersección de sus dominios, además  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$  tienen cota inferior y  $\tau \in \mathbb{R}$  entonces

$$e^{-\tau(\hat{A}+\hat{B})} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( e^{-\tau \hat{A}/n} e^{-\tau \hat{B}/n} \right)^n.$$

En un caso mas general se tiene un hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \sum \hat{p}_i^2 + \hat{V}$  entonces se tiene

$$i\hbar \frac{d}{dt} K(q, q'; t) = \hat{H} K(q, q'; t), \quad (2.15)$$

dónde  $K(q, q'; t)$  es el propagador y la solución a la ecuación de Schrödinger.

Partiendo de la forma general del propagador se tiene

$$K(q, q'; t) = \left\langle q' \left| e^{-i\hbar t(\hat{H}_0 + \hat{V})} \right| q \right\rangle. \quad (2.16)$$

Aplicando el teorema de Trotter

$$K(q, q'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\langle q' \left| \left( e^{-i\hbar t \hat{\mathcal{H}}_0/n} e^{-i\hbar t \hat{V}/n} \right)^n \right| q \right\rangle, \quad (2.17)$$

$$K(q, q'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=0}^{n-1} \left\langle q_{j+1} \left| e^{-i\hbar t \hat{\mathcal{H}}_0/n} e^{-i\hbar t \hat{V}/n} \right| q_j \right\rangle dq_1 \dots dq_{n-1}, \quad (2.18)$$

En cada factor del producto se tiene el hamiltoniano para una partícula libre, aplicando la ec. (2.12) a la ec. (2.18) se llega a

$$K(q, q'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \left( \frac{m}{2\pi i a} \right)^{n/2} \times \exp \left\{ i a \sum_{j=0}^{n-1} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{q_{j+1} - q_j}{a} \right)^2 - V(q_j) \right] \right\} dq_1 \dots dq_{n-1}, \quad (2.19)$$

dónde  $a = t/n$  y  $\hbar = 1$ . Observado que la suma corresponde la integral de Riemann de la acción en el límite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{n-1} a \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{q_{j+1} - q_j}{a} \right)^2 - V(q_j) \right] = \int_0^t \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dq}{dt'} \right)^2 - V(q(t')) \right] dt'. \quad (2.20)$$

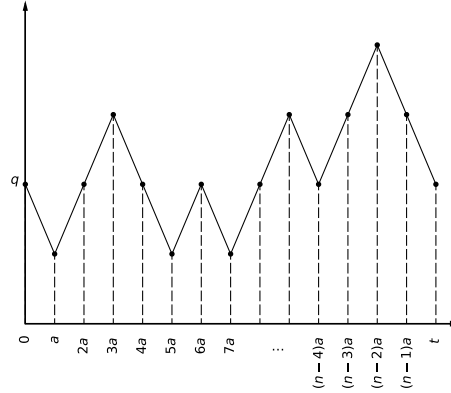


Figura 2.1: En esta imagen, se muestra una trayectoria que parte de  $q$  hasta  $q'$  en el tiempo  $t$  en  $n$  pasos de tamaño  $a$ . La función de partición es la suma de todas las posibles trayectorias que van de  $q$  hasta  $q'$  en el tiempo  $t$ .

El propagador se puede expresar como la suma infinita

$$K(q, q'; t) = \sum_{\sigma \in \Omega} e^{-itS[\sigma]}, \quad (2.21)$$

dónde  $\sigma$  corresponde a una trayectoria en  $\Omega$ , y este es el conjunto de todas las posibles trayectorias que inician en  $q$  y terminan en  $q'$  en el tiempo  $t$ .

## 2.2. Rotación de Wick

Comparando el propagador de evolución ec. (2.21) con la función de partición ec. (2.1), se vuelve clara la relación entre la mecánica cuántica y la física estadística. La única diferencia es la unidad imaginaria presente en el propagador de evolución que no aparece en la función de partición.

La rotación de Wick implica cambiar el eje temporal en el espacio hiperbólico descrito por la métrica de Minkowski por un eje imaginario en el espacio de Hilbert.

El tensor métrico del espacio de Minkowski es de la forma

$$g_M = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

dónde  $-1$  corresponde a la coordenada temporal.

G. Wick propone la transformación al espacio euclidiano, cambiando el eje real de la coordenada temporal por un eje imaginario resultando en el tensor euclidiano

$$g_E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

La métrica del espacio de Minkoski es

$$ds^2 = -dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2, \quad (2.24)$$

y la métrica del espacio euclidiano con el eje temporal imaginario es

$$ds^2 = dt_E^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2. \quad (2.25)$$

Por conveniencia pasemos la ec. (2.21) del espacio euclidiano al espacio de Minkowski, tenemos que hacer el cambio  $t = it_M$ , donde  $t_M$  es el tiempo en el espacio de Minkoski y  $t$  en el espacio euclidiano.

La forma del propagador en el espacio de Minkowski es equivalente a la función de partición definida en mecánica estadística, la forma discreta del propagador está dada por la ecuación

$$K(q, q'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \left( \frac{m}{2\pi i a} \right)^{n/2} \times \exp \left\{ a \sum_{j=0}^{n-1} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{q_{j+1} - q_j}{a} \right)^2 + V(q_j) \right] \right\} dq_1 \dots dq_{n-1}, \quad (2.26)$$

dónde  $\beta = t/n$ , en el límite cuando  $n \rightarrow \infty$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{n-1} \beta \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{q_{j+1} - q_j}{\beta} \right)^2 + V(q_j) \right] = \int_0^t \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dq}{dt'} \right) + V(q(t')) \right] dt'. \quad (2.27)$$

El equivalente a la función de partición es

$$K(q, q'; t) = \sum_{\sigma \in \Omega} e^{-\beta S[\sigma]}, \quad (2.28)$$

dónde  $\Omega$  es el conjunto de todas las posibles configuraciones de  $q$  a  $q'$  [2-4].



## Capítulo 3

# Modelos de espín

**Definición:** Espín clásico en los modelos  $O(n)$ .

En el contexto de un sistema clásico, un espín es un vector unitario definido en un espacio abstracto de dimensión  $n$ . Es decir, es un elemento de la esfera  $\mathcal{S}^{n-1}$ .

Las propiedades macroscópicas de una amplia gama de materiales pueden describirse mediante modelos de espines. En estos modelos, propiedades como la energía, la magnetización y la carga topológica son observables y pueden medirse a partir de las configuraciones de espines.

### 3.1. Estructura de una retícula

**Definición: Retícula.**

Definimos una retícula como un subgrupo discreto del espacio continuo  $\mathbb{R}^d$  que es isomorfo al espacio discreto de  $\mathbb{Z}^d$ , donde  $d$  es el número de dimensiones.

Los modelos de retícula son ampliamente usados para describir efectos colectivos. En la mayoría de los casos se usan retículas compuestas por repeticiones de estructuras geométricas simples. Algunos ejemplos en dos dimensiones son estructuras cuadradas, triangulares, hexagonales, etc. En trabajo se hace uso de retículas formadas por hipercubos de dimensión  $d$ , en ese contexto, una retícula se define como el conjunto de sitios en el espacio de dimensión  $d$  cuyas posiciones son coordenadas enteras

$$\mathcal{R}^d = \{x \in \mathbb{R}^d | x = (x_1 \dots, x_d) \wedge x_i \in \mathbb{Z}\}. \quad (3.1)$$

En cada sitio  $x \in \mathcal{R}^d$  hay  $2d$  sitios ubicados a una unidad de distancia (dos por cada dimensión). El resto de sitios se ubican a una distancia mayor, por lo que a esos  $2d$  sitios son los vecinos más cercanos a  $x$ .

Fuera de la teoría no es posible computar en retículas infinitas, por lo que se considera un trozo finito  $L^d$ . De esta restricción se obtiene la retícula finita de dimensión  $d$  y tamaño  $L$  descrita como

$$\mathcal{R}_L^d = \{x \in \mathcal{R}^d | 0 < x_i \leq L, i \in \{1, \dots, d\}\}. \quad (3.2)$$

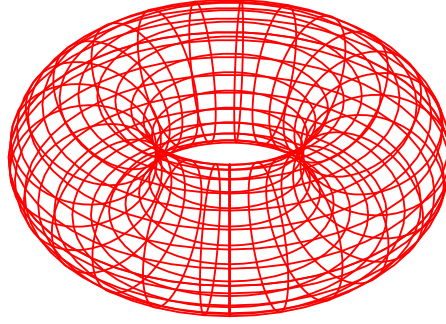


Figura 3.1: En dos dimensiones la topología de una retícula finita cuadrada con condiciones de frontera periódicas es un toroide bidimensional.

Habiendo superado el problema con la retícula infinita, queda el problema de simetría en la estructura, una retícula cortada pierde simetría en los límites de la estructura. Para recuperar la simetría, se establecen condiciones de frontera periódicas definiendo la retícula con estructura toroidal

$$\mathcal{T}_L^d = \{x \in \mathcal{R}_L^d | x_i = x_i + nL, i \in \{1, \dots, L\}, n \in \mathbb{Z}\}. \quad (3.3)$$

### 3.2. Modelo 2d O(3)

Antes que nada, es importante definir una notación clara y simple para referir los sitios y los espines.

Un sitio está dado por su posición en la retícula en dos dimensiones se representa por pares ordenados  $x = (x_1, x_2)$  dónde  $x_1, x_2 \in (1, \dots, L)$ .

Un espín  $\vec{s}_x$  de dimensión 3 restringido a la esfera  $\mathcal{S}^2$  se define por sus tres coordenadas cartesianas

$$\vec{s}_x = (\sin \theta_x \cos \phi_x, \sin \theta_x \sin \phi_x, \cos \theta_x), \quad (3.4)$$

en dónde  $\theta_x \in [0, \pi)$ ,  $\phi_x \in [0, 2\pi)$  y  $x$  indica el sitio en la retícula que ocupa el espín. La notación para dar explícitamente las componentes de espín es  $\vec{s}_x = (s_x^{(1)}, s_x^{(2)}, s_x^{(3)})$ . El estado de un espín se puede describir de manera equivalente con sus coordenadas esféricas  $(\theta_x, \phi_x)$ .

El modelo 2d O(3) consiste en un arreglo de espines clásicos en  $\mathcal{S}^2$  acomodados en los sitios de una retícula  $x \in \mathcal{T}_L^2$ . Cada espín es una fuente de magnetización e interactúa con el resto de espines siguiendo un potencial de interacción.

La interacción magnética decae proporcionalmente al inverso del cuadrado de la distancia, resultando en una contribución órdenes de magnitud mayor entre los vecinos más cercanos respecto a espines más alejados. Como la contribución de los espines lejanos es órdenes de magnitud inferior a la de los vecinos más cercanos, se opta por despreciar esas interacciones.

En el modelo 2d O(3) una configuración  $[s]$  es el conjunto de estados de los espines en la retícula en el mismo instante  $t$ . Por ejemplo, las configuraciones en las que todos los espines apuntan a

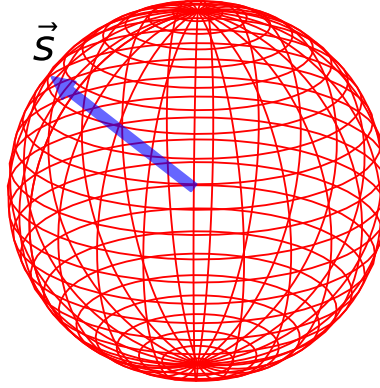


Figura 3.2: Representación de un espín clásico  $\vec{s}$  en el modelo O(3). Cada espín es representado por vector en la esfera  $S^2$  y su estado está dado por sus coordenadas.

la misma dirección o la configuración en la que todos los espines apuntan en direcciones perpendiculares a sus vecinos. Cualquier combinación de estados de espines es una configuración. Dada una configuración  $[s]$ , la energía del sistema depende del potencial de interacción magnética espín a espín descrita por la función hamiltoniana

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{\langle x,y \rangle} \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y \quad (3.5)$$

dónde  $J$  es una constante de acoplamiento y  $\langle x,y \rangle$  son los espines vecinos más cercanos. En el caso de una configuración uniforme se deduce de la ec. (3.5) que si todos los espines son paralelos, la suma sobre el producto escalar se maximiza, el resultado es que la configuración uniforme tiene la menor energía permitida por el modelo.

Otra forma de expresar el hamiltoniano de interacción del modelo es mediante una suma doble, resultando en la ecuación

$$\mathcal{H}[s] = -\frac{J}{2} \sum_{x_1} \sum_{x_2} \vec{s}_{x_1, x_2} \cdot (\vec{s}_{(x_1+1, x_2)} + \vec{s}_{(x_1, x_2+1)} + \vec{s}_{(x_1-1, x_2)} + \vec{s}_{(x_1, x_2-1)}) \quad (3.6)$$

La ecuación (3.5) se puede simplificar considerando las condiciones de frontera.

Si se intercambia y se recorren los índices en el tercer termino de la ec. (3.6), se tiene

$$\begin{aligned} \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{(x_1, x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1-1, x_2)} &= \sum_{x_2=1}^L \sum_{x_1=1}^L \vec{s}_{(x_1, x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1-1, x_2)} \\ &= \sum_{x_2=1}^L \sum_{x_1=0}^{L-1} \vec{s}_{(x_1+1, x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1, x_2)}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Separando el primer y el ultimo elemento de la suma sobre  $x_1$  se tiene

$$\begin{aligned} \sum_{x_2=1}^L \sum_{x_1=0}^{L-1} \vec{s}_{(x_1+1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1,x_2)} &= \sum_{x_2=1}^L \left( \vec{s}_{(1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(0,x_2)} - \vec{s}_{(L+1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(L,x_2)} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{x_1=1}^L \vec{s}_{(x_1+1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1,x_2)} \right). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Por las condiciones de frontera  $\vec{s}_{(1,x_2)} = \vec{s}_{(L+1,x_2)}$  y  $\vec{s}_{(0,x_2)} = \vec{s}_{(L,x_2)}$ , entonces

$$\vec{s}_{(1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(0,x_2)} - \vec{s}_{(L+1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(L,x_2)} = 0. \quad (3.9)$$

Resultando en el término

$$\sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{(x_1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1-1,x_2)} = \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{(x_1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1+1,x_2)}. \quad (3.10)$$

De forma análoga para el cuarto termino de la ec. (3.6)

Intercambiando y recorriendo índices en el tercer termino de la ec. (3.6) se tiene

$$\sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{(x_1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1,x_2-1)} = \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=0}^{L-1} \vec{s}_{(x_1,x_2+1)} \cdot \vec{s}_{(x_1,x_2)}. \quad (3.11)$$

Separando el primer y el ultimo elemento de la suma sobre  $x_2$  se tiene

$$\begin{aligned} \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=0}^{L-1} \vec{s}_{(x_1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1,x_2+1)} &= \sum_{x_1=1}^L \left( \vec{s}_{(x_1,0)} \cdot \vec{s}_{(x_1,1)} - \vec{s}_{(x_1,L)} \cdot \vec{s}_{(x_1,L+1)} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{(x_1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1,x_2+1)} \right). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Por las condiciones de frontera  $\vec{s}_{(x_1,0)} = \vec{s}_{(x_1,L)}$  y  $\vec{s}_{(x_1,1)} = \vec{s}_{(x_1,L+1)}$ , por lo que se tiene

$$\vec{s}_{(x_1,0)} \cdot \vec{s}_{(x_1,1)} - \vec{s}_{(x_1,L)} \cdot \vec{s}_{(x_1,L+1)} = 0. \quad (3.13)$$

Entonces

$$\sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{(x_1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1,x_2-1)} = \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{(x_1,x_2)} \cdot \vec{s}_{(x_1,x_2+1)}. \quad (3.14)$$

Remplazando los términos (3.10), (3.14) en la ec. (3.6) y simplificando términos se llega a la forma compacta del hamiltoniano

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{(x_1,x_2)} \cdot (\vec{s}_{(x_1+1,x_2)} + \vec{s}_{(x_1,x_2+1)}). \quad (3.15)$$

La suma recorre todos los sitios en la retícula, por cada sitio, se considera el producto escalar con espín en el sitio a la derecha y arriba en la retícula. Definiendo  $\hat{1} = (1, 0)$  y  $\hat{2} = (0, 1)$  y  $J = 1$  se tiene

$$\mathcal{H}[s] = - \sum_x \vec{s}_x \cdot (\vec{s}_{x+\hat{1}} + \vec{s}_{x+\hat{2}}) \quad (3.16)$$

Es conveniente ubicar la energía mínima en el valor cero, si se tiene una configuración uniforme en una retícula de  $V$  sitios, la energía es  $\mathcal{H}[s]_{\min} = -2V$ , por lo que el mínimo se puede recorrer sumando al hamiltoniano el factor  $2V$ , resultando en la ecuación

$$\mathcal{H}[s] = - \sum_x \vec{s}_x \cdot (\vec{s}_{x+\hat{1}} + \vec{s}_{x+\hat{2}}) + 2V. \quad (3.17)$$

### 3.3. Observables

Describir las propiedades macroscópicas de un material, requiere de observables medibles como, masa  $m$ , la energía  $\mathcal{H}$ , la magnetización  $m$ , etc. Si una observable, como la energía se divide por volumen  $V$  del sistema, se convierte en una densidad independiente de tamaño del sistema, a estas observables se les conoce como variables mecánicas.

Hay otro tipo de cantidades como la presión  $P$ , la temperatura  $T$ , el campo magnético  $B$ , etc. Estas variables caracterizan el ambiente en el que el sistema está inmerso. En la mayoría de los sistemas, las variables mecánicas están bien definidas solo cuando el valor de estas variables se fija.

Desde un punto de vista microscópico, las variables mecánicas dependen de la configuración del sistema en un instante fijo. A lo largo de un intervalo temporal, se espera que un sistema físico pase por múltiples configuraciones.

Cuando se perturba un sistema en equilibrio, las variables mecánicas del sistema cambian. El tiempo que el sistema tarda en alcanzar nuevamente el equilibrio termodinámico es conocido como tiempo de relajación.

Se busca calcular el promedio de un observable en un sistema en equilibrio termodinámico por un intervalo temporal suficientemente amplio como para reducir las fluctuaciones por debajo de un umbral de error deseado. El valor medible de la observable, es el promedio de los valores obtenidos por las configuraciones en el tiempo.

#### 3.3.1. Energía

La energía de una configuración depende de las diferencias relativas entre espines. Consideremos en una configuración  $[s]$  a la que se aplica una rotación por un ángulo  $\phi$  en la misma dirección a todos los espines. La transformación mantiene las diferencias relativas entre espines, por lo tanto, la nueva configuración  $[s']$  es equivalente y está asociada a la misma energía que la configuración  $[s]$ .

**Definición:** Tiempo de Markov.

En un sistema estocástico, un conjunto de eventos sucesivos forman una cadena de Markov. El tiempo de Markov es un parámetro que indica en que evento se encuentra el sistema.

Una configuración es un evento en el sentido estadístico. El tiempo de Markov  $t_i$  indica la configuración del sistema en el ese instante. Un conjunto de configuraciones es una cadena de Markov.

Como cada configuración tiene una energía asociada, la energía asociada a las configuraciones es diferente en cada instante  $t_i$ . La energía promedio en un intervalo temporal  $(t_1, \dots, t_N)$ , es de la forma

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i. \quad (3.18)$$

La energía real asociada a ese intervalo es el promedio aproximado más la incertidumbre asociada

$$\langle \mathcal{H} \rangle \simeq \langle \mathcal{H} \rangle_{\text{aprox}} \pm \text{error}(\mathcal{H}). \quad (3.19)$$

La energía es una propiedad extensiva, para comparar resultados en retículas de diferentes tamaños es importante considerar la densidad de energía. Está se define como el valor esperado de la energía dividida por el volumen

$$h = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{V}. \quad (3.20)$$

### 3.3.2. Magnetización

En el modelo 2d O(3), la temperatura es un parámetro que añade ruido (fluctuaciones que cambian las direcciones de los espines).

La magnetización  $M$  es un escalar que depende de la alineación de los espines de una configuración. Se define como la magnitud de la suma de los espines de una configuración dividida por el volumen.

$$M = \frac{1}{V} \left| \sum_x \vec{s}_x \right| \quad (3.21)$$

La magnetización máxima se alcanza en una configuración de espines alineados

$$M_{\text{max}} = \frac{1}{V} \left| \sum_x \vec{s}_x \right| = \frac{1}{V} |V \vec{s}| = |\vec{s}| = 1, \quad (3.22)$$

Igual que con la energía, un conjunto de configuraciones tiene un conjunto de configuraciones, es una cadena de Markov y se puede medir la magnetización de aproximada en un intervalo temporal calculando el promedio de las magnetizaciones en ese intervalo

El promedio aproximado de la magnetización es

$$\langle M \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i. \quad (3.23)$$

El promedio de la magnetización es el valor aproximado con una incertidumbre asociada

$$\langle M \rangle \simeq \langle M \rangle \pm \text{error}(M) \quad (3.24)$$

### 3.3.3. Carga topológica

El índice de una curva en un plano al rededor de un punto, es un número entero que describe el número de vueltas que la curva da alrededor del punto, es una cantidad invariante asociada a los defectos topológicos del sistema.

Las soluciones del modelo, son los defectos topológicos del sistema y están relacionados a la carga topológica, de ahí su importancia.

El índice es la carga topológica neta de un sistema. En los modelos  $O(3)$ , el índice mide las vueltas de una curva alrededor de un punto sobre la esfera  $\mathcal{S}^2$ .

En el modelo hay dos simetrías importantes: la primera es la invariancia de la energía interna por la rotación de un grupo de espines. La segunda es la invariancia bajo transformaciones conformes del espacio-tiempo. En el segundo caso, las condiciones de frontera garantizan la invariante topológica [5, 6]

$$Q[s] = \frac{1}{8\pi} \int \varepsilon_{\mu\nu} \vec{s}(x) \cdot (\partial_\mu \vec{s}(x) \times \partial_\nu \vec{s}(x)) d^2x \in \mathbb{Z}. \quad (3.25)$$

B. Breg y M. Lüscher introdujeron la definición geométrica de carga topológica reticular para estudiar la susceptibilidad topológica del modelo 2d  $O(3)$ . Para definir la carga topológica de una configuración se usa un acercamiento geométrico, la retícula se divide en plaquetas formadas por cuatro espines, esto a su vez se subdividen en dos triángulos, alternando la orientación de la diagonal que divide cada cuadrado para replicar isotropía esperada en el modelo de espines.

Sean  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \in \mathbb{R}^3$  y  $\Omega$  el ángulo solido generado por  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  [7]

$$\tan\left(\frac{\Omega}{2}\right) = \frac{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}{abc - (\vec{a} \cdot \vec{b})c + (\vec{c} \cdot \vec{a})b + (\vec{b} \cdot \vec{c})a}. \quad (3.26)$$

En la figura (3.3) las plaquetas se dividen en triángulos  $a, b$ . Para los triángulos  $a$ , los espines  $\vec{s}_1, \vec{s}_2, \vec{s}_3$  definen las esquinas de un triángulo esférico en  $\mathcal{S}^2$ . Se calculan las variables para los triángulos tipo 1 se definen las variables

$$\begin{aligned} x_1 &= 1 + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_1 \\ y_1 &= \vec{s}_1 \cdot (\vec{s}_2 \times \vec{s}_3). \end{aligned} \quad (3.27)$$

Al ser una esfera unitaria, el área del triángulo esférico esta dada por el ángulo solido generado por los espines, definiendo el número complejo  $z_a = x_a + iy_a$ , aplicando la formula para obtener el área del triángulo esférico, se obtiene

$$\Omega_1 = 2\arg(z_1). \quad (3.28)$$

Para los triángulos tipo 2 se definen las variables

$$\begin{aligned} x_2 &= 1 + \vec{s}_4 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_4 \\ y_2 &= \vec{s}_4 \cdot (\vec{s}_3 \times \vec{s}_2). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Resultando en una área

$$\Omega_2 = 2\arg(z_2). \quad (3.30)$$

Sumando el área para cada par de triángulos se obtiene

$$A_x = \Omega_1 + \Omega_2 \quad (3.31)$$

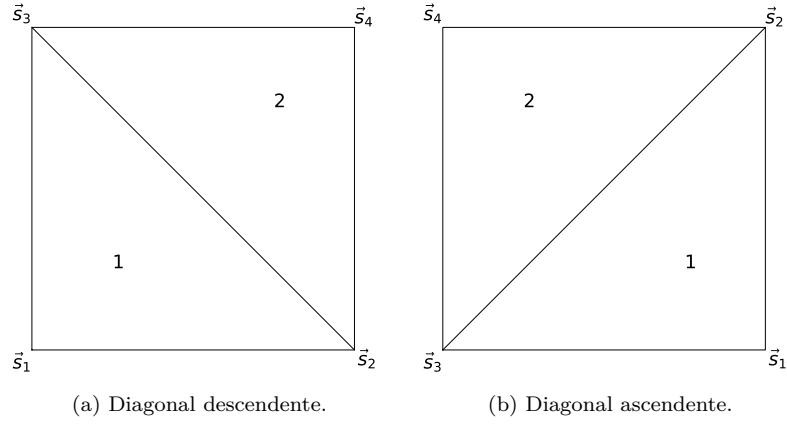


Figura 3.3: Orientaciones de los triángulos formados en la retícula. Cada plaqueta se puede dividir en dos triángulos con diagonales descendentes o ascendentes.

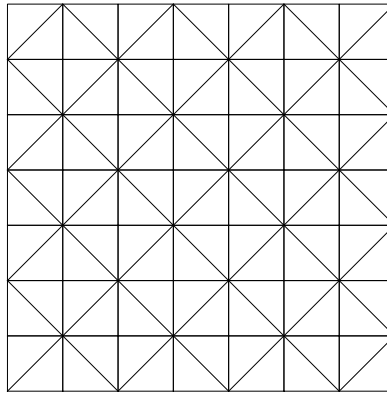


Figura 3.4: Descomposición de la retícula cuadrada bidimensional en triángulos, alternando la dirección de la diagonal. Esta descomposición se usa para medir la carga topológica. Se puede apreciar cómo el cambio en la orientación de la diagonal evita que la predominancia de una dirección preferencial.

La carga topológica se define como

$$Q[s] = \frac{1}{4\pi} \sum_x A_x \in \mathbb{Z}. \quad (3.32)$$

La simetría del sistema implica

$$\langle Q \rangle = 0, \quad (3.33)$$

por lo que medir los defectos topológicos remanentes requiere de otra cantidad.



La susceptibilidad topológica  $\chi_t$  describe la respuesta de la carga topológica a una perturbación externa. Se define siguiendo la ecuación

$$\frac{1}{V} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \int e^{-S[\phi]} e^{iQ[\phi]\theta} d\phi \Big|_{\theta=0} = \frac{1}{V} \langle Q^2 \rangle |_{\theta=0}. \quad (3.34)$$

El valor esperado del cuadrado de la carga topológica es

$$\langle Q^2 \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i^2. \quad (3.35)$$

El cuadrado de la carga dividido por el volumen es la susceptibilidad topológica

$$\chi_t = \frac{\langle Q^2 \rangle}{V}. \quad (3.36)$$

Una pregunta crucial respecto a la susceptibilidad topológica es, si es un valor finito en el límite al continuo.

El modelo 2d  $O(3)$  presenta libertad asintótica, por lo que los sectores topológicos están bien definidos.

Definiendo una densidad topológica  $q_x$  se puede definir la susceptibilidad topológica como

$$\chi_t = \sum_x \langle q_0 q_x \rangle. \quad (3.37)$$

Hay una divergencia en el término  $x = 0$ . Por otro lado conforme la longitud de correlación aumenta el parámetro de escala  $L/\xi$  aumenta lentamente normalizando la susceptibilidad como

$$\langle Q^2 \rangle = L^2 \chi_t. \quad (3.38)$$

El consenso respecto a esta pregunta indica que la susceptibilidad topológica diverge cuando la longitud de correlación diverge en diferentes sistemas con la misma clase de universalidad [8].

## Capítulo 4

# Fenómenos críticos

### 4.1. Parametro de orden

Un parámetro de orden es una cantidad que caracteriza el estado de un sistema físico durante una transición de fase. Por ejemplo, la magnetización es un parámetro de orden para un ferromagnético que pase del estado diamagnético al paramagnético.

Los parámetros de orden se pueden derivar de la función de partición del sistema.

La relación entre la termodinámica y la física estadística viene determinada por la energía libre de Helmholtz  $\mathcal{F}$  en el colectivo canónico

$$\mathcal{F} = -kT \ln Z, \quad (4.1)$$

donde  $Z$  es la función de partición.

El hamiltoniano de un sistema de espines es de la forma

$$\mathcal{H}[\sigma] = -J \sum_{\langle xy \rangle} \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y - B \sum_x \vec{s}_x, \quad (4.2)$$

dónde  $B$  es el campo magnético y  $J$  una constante de interacción.

A partir de la función de partición la magnetización  $M$  se define como

$$M = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} = \frac{\sum_{\sigma} m_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}[\sigma]}}{Z}. \quad (4.3)$$

La susceptibilidad magnética  $\chi_m$  se define

$$\begin{aligned} \chi_m &= \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial B^2} = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial M}{\partial B} \right) = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial B} \frac{\sum_{\sigma} M_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}_{\sigma}}}{Z} \\ &= \frac{1}{V} \frac{1}{kT} \left[ \frac{\sum_{\sigma} M_{\sigma}^2 e^{-\beta \mathcal{H}_{\sigma}}}{Z} - \left( \frac{\sum_{\sigma} M_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}_{\sigma}}}{Z} \right)^2 \right], \\ &= \frac{1}{V} \frac{1}{k^2 T^2} \left( \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

A partir de la función de partición, la energía promedio se calcula como

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{\sum_{\sigma} \mathcal{H}[\sigma] e^{-\beta \mathcal{H}[\sigma]}}{Z} = \frac{\partial \beta \mathcal{F}}{\partial \beta}. \quad (4.5)$$

El calor específico a volumen constante se define como

$$\begin{aligned} c_V &= \frac{1}{V} \left( \frac{\partial \beta \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial T} \right) = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\sum_{\sigma} \mathcal{H}_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}_{\sigma}}}{Z} \\ &= \frac{1}{V} \frac{1}{kT} \left[ \frac{\sum_{\sigma} \mathcal{H}_{\sigma}^2 e^{-\beta \mathcal{H}_{\sigma}}}{Z} - \left( \frac{\sum_{\sigma} \mathcal{H}_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}_{\sigma}}}{Z} \right)^2 \right], \\ &= \frac{1}{V} \frac{1}{k^2 T^2} \left( \langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2 \right). \end{aligned} \quad (4.6)$$

## 4.2. Transiciones de fase

En la naturaleza hay fenómenos conocidos como transiciones de fase, en los que las propiedades de un material cambian bajo ciertas condiciones.

Describir estos fenómenos es uno de los grandes desafíos de la física moderna, un par de ejemplos son:

1. El cambio de estado líquido a gas de un fluido.
2. El cambio del estado paramagnético al ferromagnético en un imán

A nivel macroscópico, en una transición de fase cambian las propiedades físicas de los materiales. A nivel microscópico, una transición de fase ocurre cuando hay una discontinuidad en la energía libre o en una de sus derivadas.

El primer ejemplo es una transición de fase de primer orden. En el diagrama de la imagen 4.1, las líneas punteadas delimitan las regiones en las que el fluido es estable. El fluido puede existir en estado sólido líquido o gaseoso, en función de la presión y la temperatura. La variación de las variables en una región estable no cambia el estado del fluido, en cambio, cruzar las fronteras implica un salto en la densidad y el calor latente, como consecuencia de una discontinuidad de primer orden en la energía libre.

Una transición de fase de segundo orden, implica una discontinuidad en la segunda derivada de la energía libre del sistema. A nivel microscópico un sistema puede pasar de un estado simétrico y con alta energía a otro asimétrico y menor energía al pasar por debajo de una temperatura crítica  $T_c$  [9-11].

A nivel microscópico, a temperatura  $T = 0$ , no hay fluctuaciones y el sistema alcanza en el equilibrio una configuración de energía mínima.

Cuando la temperatura está en la región  $T_c > T > 0$ , se forman grupos de espines alineados, el vector de magnetización de cada grupo apunta en una dirección diferente. En esta región de temperatura hay baja simetría inducida por la estructura de diferentes regiones de espines alineados.

Por encima de la temperatura crítica, es mayor el número de espines apuntando en direcciones aleatorias. Pasando la temperatura crítica, la intensidad de las fluctuaciones evita la formación de grupos considerables de espines alineados, por consecuencia, en el sistema predomina el ruido termodinámico.

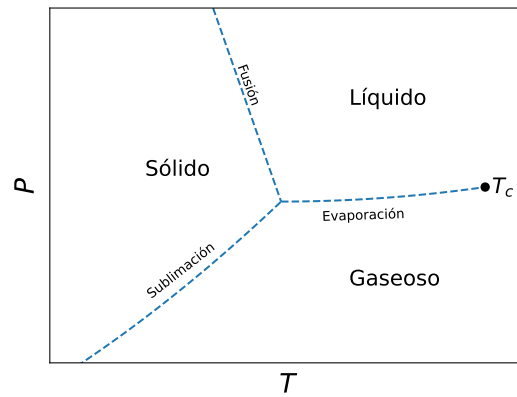


Figura 4.1: Se muestra el diagrama fase de un fluido y se delimitan las fronteras entre tres estados sólido, líquido y gaseoso. Cuando se pasa por una frontera en el espacio fase, hay una transición de fase que percibe como un cambio visible a nivel macroscópico. La curva de evaporación tiene una temperatura crítica donde la transición de fase es de segundo orden.

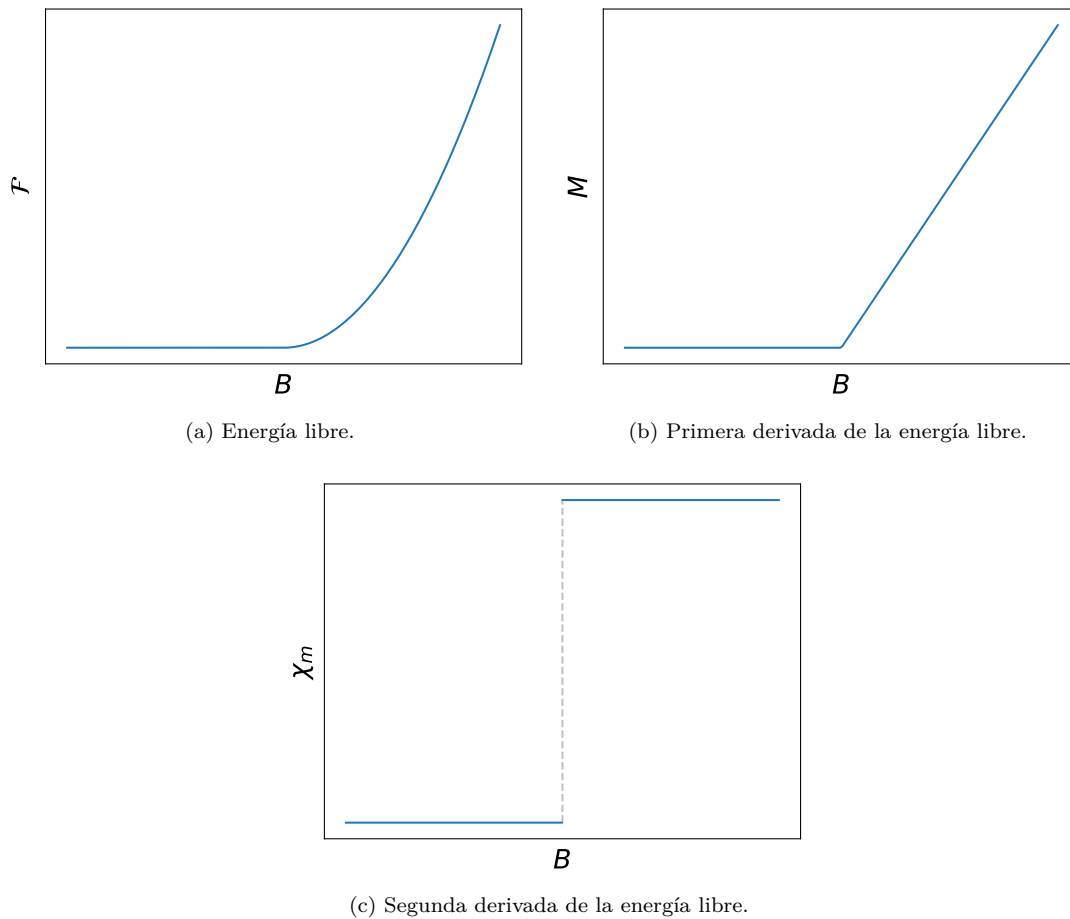


Figura 4.2: Se muestra la primera y segundas derivada de la energía libre. Hay una discontinuidad en la segunda derivada por lo que se trata de una transición de fase de segundo orden.

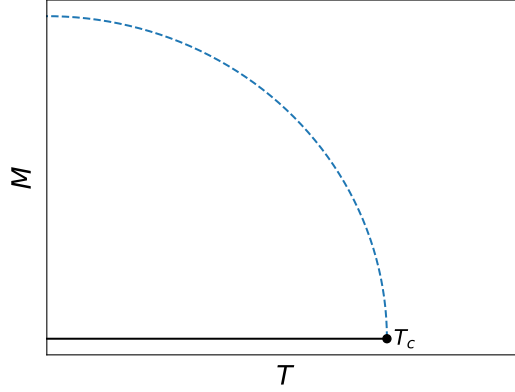


Figura 4.3: Diagrama fase de un ferro-magneto, por debajo de la temperatura crítica  $T_c$ , el sistema adquiere un estado de magnetización espontánea  $M(T)$ .

### 4.3. Función de correlación

La escala natural de un sistema está determinada por la longitud de correlación  $\xi$ .

En los modelos de espín la función de correlación mide que tan fuertemente se afectan dos espines  $\vec{s}_x, \vec{s}_y \in \mathcal{S}^{n-1}$ .

La función de correlación se define como

$$\langle \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y \rangle_c = \langle \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y \rangle - \langle \vec{s}_x \rangle \cdot \langle \vec{s}_y \rangle. \quad (4.7)$$

En la práctica, para determinar la longitud de correlación se mapea a una línea

$$\vec{\sigma}_i = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \vec{s}_{i,k}, \quad (4.8)$$

$$\langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_1 \rangle_c = A \cosh \left( \frac{i - L/2}{\xi} \right), \quad (4.9)$$

dónde  $\xi$  es la longitud de correlación. La longitud de correlación  $\xi$  diverge a la temperatura crítica  $T_c$ . Conforme  $T$  se acerca a la temperatura crítica desde arriba, la divergencia de  $\xi$  define el exponente crítico  $\nu$

$$\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}, \quad (4.10)$$

En el modelo 2d O(3) la fórmula se simplifica

$$\xi \propto T^{-\nu}, \quad (4.11)$$

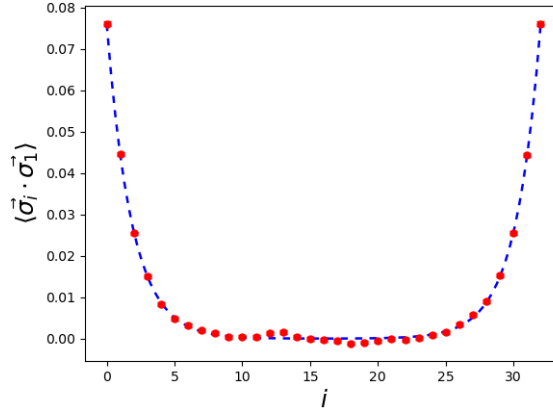


Figura 4.4: Función de correlación en una retícula de tamaño  $L \times L$  donde  $L = 32$ .

#### 4.4. Universalidad

Debido a el número de elementos que interactúan en un modelo microscópico realista, no es posible hacer predicciones exactas sobre todas las cantidades relevantes. El concepto de clases de universalidad fue señalado primeramente por Kadanoff, posteriormente en 1970 E. Fermi se baso en el trabajo de Grriffiths, Jasnow y otros investigadores. Se estudiaron datos experimentales de diversos materiales cerca de sus respectivos puntos críticos, y se encontró que los datos de los diversos sistemas son descritos por la misma función de escalamiento. El aparente comportamiento universal motivo a buscar una respuesta para la siguiente cuestión.

¿Que características de las interacciones microscópicas son importantes para determinar puntos críticos, exponentes críticos y funciones de escalamiento y que características son irrelevantes?

En general la clase de universalidad y el valor de los exponentes críticos no depende de la estructura local de los acoplamientos. O dicho de otra forma. Aunque las interacciones son a nivel local, los exponentes críticos dependen solo de la dimensión espacial y las simetrías del sistema.

#### 4.5. Escalamiento

Existe una gran cantidad de sistemas físicos en diferentes escalas. En sistemas con la misma clase de universalidad, se pueden encontrar transformaciones que relacionan un sistema con otro a una escala diferente.

Consideremos un potencial termodinámico

$$G(H, T) = G(H, \epsilon). \quad (4.12)$$

Cerca de el punto crítico existen exponentes  $a_H$  y  $a_T$  tales que se cumple la ecuación

$$G(\lambda^{a_H} H, \lambda^{a_T} \epsilon) = \lambda G(H, \epsilon), \quad (4.13)$$

dónde  $\lambda \in \mathbb{R}^+$ .

$$M = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} \Big|_{T, B=0} \propto (T_c - T)^\beta, \quad (4.14)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \Big|_{T, B=0} \propto (T_c - T)^\gamma, \quad (4.15)$$

$$M|_{T=T_c} \propto B^{1/\delta}, \quad (4.16)$$

$$C = -T \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2} \propto (T - T_c)^{-\alpha}, \quad (4.17)$$

$$\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}. \quad (4.18)$$

## Capítulo 5

# Mecanismo de Kibble-Zurek

La ruptura de simetría en un sistema, es un fenómeno en el que este pasa de un estado desordenado y simétrico a un estado ordenado con menos simetrías. Algunos ejemplos son:

- Cuando el agua se congela, la simetría rotacional se rompe por la elección de una orientación en los cristales de hielo.
- En el universo temprano, la ruptura de la simetría puede haber conducido a la formación de defectos topológicos como monopolos cuasipuntuales, cuerdas cósmicas lineales o paredes de dominio planares.
- En el helio  $^4\text{He}$  en estado superfluidico, la condensación de Bose-Einstein ocurre alrededor de  $2K$ . La ruptura de la simetría favorece la formación de vórtices.

En estos sistemas, los defectos topológicos remanentes son objetos inherentemente estables que pueden proporcionar pistas observacionales sobre cómo era el sistema en el momento en que se formaron.

La esencia del mecanismo de Kibble-Zurek esta en la aleatoriedad en la ruptura de la simetría de dominios en un sistema. Estos dominios están determinados por el tiempo de relajación  $\tau$ , la longitud de correlación  $\xi$  y la carga topológica  $\chi_t$ . La ley de escalamiento describe en la relación entre los defectos topológicos remanentes respecto a la tasa de enfriamiento en un sistema que pasa por la temperatura crítica. En estas transiciones el comportamiento es universal, la clase de universalidad está determinada por propiedades fundamentales como la simetría de un parámetro de orden, el rango de interacciones o la dimensionalidad por lo que de gran interés clasificar los diferentes modelos en sus respectivas clases de universalidad [12].

### 5.1. Relacionado al universo temprano

Consideremos el universo temprano en expansión. En modelos de interacción débil y electromagnetismo, la temperatura crítica es del orden  $\sqrt{G_F}$ , donde  $G_F$  es la constante de Fermi. Siguiendo dicha suposición, el universo paso por la temperatura crítica entre  $10^{-10}s$  y  $10^{-12}s$ .

Consideremos un campo multi-escalar  $\phi \in \mathbb{R}^n$  con un lagrangiano invariante bajo el grupo ortogonal  $O(n)$ ,



$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \frac{1}{2} \left( D_\mu \vec{\phi} \right)^2 - \frac{1}{8} g^2 (\phi^2 - \eta^2)^2 + \frac{1}{8} \text{Tr} (B_{\mu\nu} B^{\mu\nu}) \\
D_\mu \left( \vec{\phi} \right) &= (\partial_\mu - q B_\mu) \vec{\phi} \\
B_{\mu\nu} &= O_{\mu\nu} B_{\mu\nu} - D_\nu B_\mu + q [B_\mu, B_\nu].
\end{aligned} \tag{5.1}$$

dónde  $g, \nu$  son constantes de acoplamiento. A temperatura  $T$  cero hay una ruptura espontánea de la simetría a  $O(n-1)$ , por lo que la variedad del estado de menor energía es la esfera  $\mathcal{S}^{n-1}$

Para  $T$  cerca de la temperatura crítica, aparecen fluctuaciones fuertes en el campo  $\vec{\phi}$ . por debajo de la temperatura crítica, el valor esperado es algún punto en  $\mathcal{S}^{n-1}$ .

Ningún punto de la esfera tiene preferencia, y la elección es independiente entre las diferentes regiones del espacio. Por lo tanto, se espera la formación de dominios con distinto valor esperado de  $\vec{\phi}$ , variando entre regiones de una manera más o menos aleatoria. Al llegar al equilibrio, muchas de estas variaciones dejarán de fluctuar, acercando el valor esperado de los diferentes dominios al valor constante  $\langle \vec{\phi} \rangle$ . La cuestión es, si luego del enfriamiento del universo, las fronteras entre dominios pueden formar defectos topológicos.

Una posibilidad es la neutralidad del universo respecto a las cargas del campo  $\vec{\phi}$ , en cuyo caso no hay problema con la formación de dominios, ya que no hay una dirección preferencial hacia algún punto en  $\mathcal{S}^{n-1}$ . La otra posibilidad es que el universo podría tener una carga  $q_{t_0}$  asociada al campo  $\vec{\phi}$ . En este caso, la ruptura de la simetría sería fijado a las condiciones iniciales, impidiendo el surgimiento de estructuras de dominio. Consideremos el primer caso, que permite la formación de dominios. El tamaño de estos dominios está determinado por la longitud de correlación

$$\xi^{-1} \approx g^2 T. \tag{5.2}$$

Es interesante revisar las posibles configuraciones geométricas de estos dominios. Las transiciones de fase de ruptura de simetría en el universo temprano podrían haber formado estructuras topológicamente estables.

Un problema que surgió al intentar hacer predicciones sobre las cuerdas cósmicas fue estimar cuántas habría. Una elección aleatoria de fases debería conducir a una maraña aleatoria de cuerdas, caracterizada por una escala de longitud típica  $\xi$ .

Desafortunadamente, esa idea no funcionó. Las observaciones realizadas por COBE y más recientemente por WMAP [13] de la pequeña anisotropía en el fondo cósmico de microondas revelan una escala de distancia preferencial que las cuerdas cósmicas no pueden explicar. Afortunadamente, existen análogos de cuerdas cósmicas en muchos sistemas de materia condensada, incluidos las líneas de vórtice en superfluidos[14-16].

## 5.2. Experimentos en helio superflúidico

En 1985, W. Zurek, en Los Álamos, sugirió que las ideas sobre cómo calcular  $\xi$  podrían probarse aplicándolas al problema de la formación de defectos en una transición de fase de baja temperatura, en particular la transición de normal a superfluido en helio líquido. Zurek demostró que en una transición de segundo orden, se podía obtener una relación de ley de potencia entre  $\xi$  y  $\tau_{\text{cool}}$ . El parámetro  $\tau_{\text{cool}}$  se define de modo que la tasa de cambio de temperatura en el punto crítico sea  $dT/dt = -T_c/\tau_{\text{cool}}$  y el exponente  $\zeta$  se pueda calcular en términos de índices críticos conocidos de la transición de fase.

$$\xi \propto \tau_{\text{cool}}^{-\frac{\nu}{1+\nu\zeta}} \tag{5.3}$$

Existe una analogía entre cuerdas cósmicas y líneas de vórtice. En un superfluido, tras un súbito decaimiento de presión, la fase de la función de onda en el condensado de helio es análoga a la ruptura de simetría del campo de multi-escalar  $\vec{\phi} \in \mathbb{R}^2$ .

Cerca de la transición de fase, el potencial es de la forma

$$V = \alpha |\psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2} \beta |\psi(\vec{r})|^4, \quad (5.4)$$

dónde  $\alpha = \alpha'(T - T_c)$  y  $\alpha', \beta$  son constantes que se deducen a partir del calor específico. Por debajo de la temperatura crítica, tras la ruptura de la simetría en el superfluido  $\alpha$  es un valor negativo y el potencial  $V$  tiene la forma de sombrero.

El parámetro de orden de un superfluido puede pensarse como la función de onda del condensado de Bose. En este sistema se pueden formar líneas de vórtice cuando el parámetro de orden es un valor complejo

$$\psi = |\psi| e^{i\theta}. \quad (5.5)$$

Es una situación análoga al modelo cosmológico y una buena aproximación al superfluido  $^4\text{He}$ . En particular para un superfluido cerca de la temperatura crítica  $T_c$ ,

Una fracción considerable de los átomos de  $^4\text{He}$  ocupa un solo estado cuántico a esa temperatura. Entonces  $\psi$  es proporcional a la función de onda de ese estado, y  $|\psi|^2$  representa la densidad de la fracción superfluida. Una cuerda, o cualquiera de sus defectos análogos, es un tubo delgado alrededor del cual la fase de  $\psi$  cambia en  $2\pi$ . En He, la velocidad superfluida es proporcional al gradiente de la fase[17-19].

### 5.3. Tiempo de auto-correlación

La evolución de un sistema se caracteriza por el tiempo de autocorrelación, que mide la velocidad a la que un sistema pasa a un estado estadísticamente independiente.

En general, la dinámica de las simulaciones desacelera considerablemente cerca de un punto crítico. La desaceleración crítica es una barrera inevitable, ya que en la realidad se dispone de un tiempo de cómputo finito, por lo que es de gran interés entender cómo cambia el tiempo de autocorrelación para las diferentes observables del sistema.

Consideremos una observable  $A$  y  $A_t$  el valor de  $A$  en el instante  $t$ . Definimos la auto-correlación como

$$C_{AA}(t) = \langle A_s A_{s+t} \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (5.6)$$

Si la cadena de Markov cumple la condición de balance detallado, los valores propios de la matriz de transferencia son reales, se tiene que

$$C_{AA}(t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} e^{-t/\tau_{\text{exp},\alpha}}. \quad (5.7)$$

El tiempo de autocorrelación se estima como

$$\tau_{\text{exp}} = \text{máx}(\tau_{\text{exp},\alpha}) \quad (5.8)$$

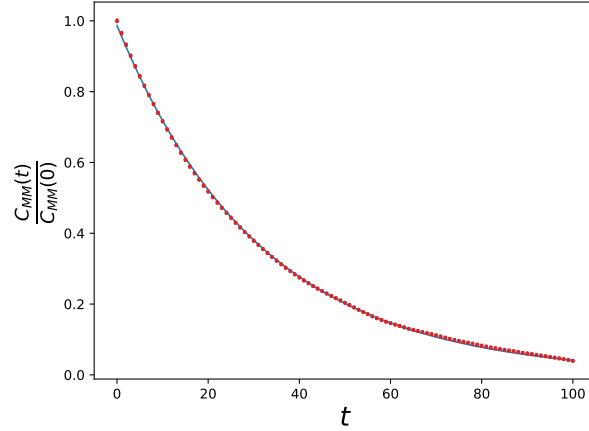


Figura 5.1: Evolución de la autocorrelación de la magnetización en 100 barridos de actualización para el algoritmo de Metropolis lexicográfico a temperatura  $T = 0.9$  en una retícula de tamaño  $L = 64$ .

dónde  $\tau_{\text{exp},A}$  es el tiempo de auto-correlación exponencial. Una definición alternativa es el tiempo de auto-correlación integrado

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^n \frac{C_{AA}(t)}{C_{AA}(0)}, \quad (5.9)$$

donde  $n$  es el número de términos que se añaden a la suma antes del corte. Se elige  $n$  tal que, el tiempo de autocorrelación oscile al rededor de  $\tau_{\text{int}}$  a partir de  $t = n$ .

El error depende de las oscilaciones del tiempo de autocorrelación al rededor de  $\tau_{\text{int}}$  y es de la forma

$$\delta\tau_{\text{int}} = \sqrt{\frac{2\tau_{\text{int}}}{n} C_{AA}(0)}. \quad (5.10)$$

El tiempo de auto-correlación depende del algoritmo de Monte Carlo particular que se use y en general cerca de un punto crítico diverge según la ecuación

$$\tau \propto \xi^{-\nu z} \quad (5.11)$$

dónde  $z$  es el exponente crítico dinámico [20].

## Capítulo 6

# Métodos de Monte Carlo

La esencia de los métodos de Monte Carlo es evaluar numéricamente las sumas o integrales del espacio fase. El método de Monte Carlo introducido por Metropolis se basa en la idea de muestreo de importancia. Consiste en evaluar propiedades de una distribución a partir de una muestra de una distribución diferente.

Los elementos del espacio de fases no se seleccionan completamente al azar. La probabilidad de selección se multiplica por una función con mayor densidad en aquellas regiones del espacio de fases de mayor contribución a las integrales.

Una cadena de Markov se representa por una matriz de  $W$  con entradas  $W_{i,j}$   $i, j \in \mathbb{N}$  que satisfacen la condición

$$\sum_{i,j} W_{i,j} = 1. \quad (6.1)$$

Cada valor  $W_{i,j}$  representa la probabilidad de que un sistema en la configuración  $[s]_i$  pase a la configuración  $[s]_j$  en una unidad de tiempo discreta conocida como paso de Markov.

Consideremos la cadena de Markov dada por  $t_i$  dónde  $i \in \{1, \dots, N\}$  y  $O[s]_i$  es el valor de la observable en el instante  $t_i$ , el promedio aproximado de la observable en el intervalo temporal medido es

$$\langle O \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O[s]_i, \quad (6.2)$$

dónde  $[s]_i$  es la configuración del sistema en el instante  $t_i$ . La desviación estándar de esta suma de configuraciones es

$$\text{std}(O) = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left( \sum_{i=1}^N O[s]_i^2 - N \langle O \rangle^2 \right)}, \quad (6.3)$$

y el error estándar se define por la ecuación

$$\text{error}(O) = \frac{\text{std}(O)}{\sqrt{N}}. \quad (6.4)$$

Si cada medición es estadísticamente independiente, conduce al valor esperado de la observable y su error estándar definido por la ecuación

$$\langle O \rangle \simeq \langle O \rangle_{\text{aprox}} \pm \text{error}(O). \quad (6.5)$$

Definición: Variable aleatoria.

Una variable aleatoria  $X$  es el valor resultante de una selección aleatoria en el conjunto de los posibles resultados de un evento.

Un proceso estocástico es una secuencia de eventos aleatorios, consideremos un evento aleatorio con  $N$  posibles resultados  $\{x_1, \dots, x_N\}$ . La probabilidad de que el sistema a una  $T$  dada esté en una configuración determinada de energía  $\mathcal{H}$  es proporcional al factor de Boltzmann

$$P[s] = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}[s]}}{Z}, \quad (6.6)$$

dónde  $\beta = 1/T$ , y  $Z$  es la función de partición.

Definición: Balance Detallado.

Sea  $\{s_i\}$  una cadena de Markov con probabilidad de transición estacionaria. La cadena de Markov es reversible respecto a la distribución de probabilidad  $p$  si cumple la ecuación de balance detallado

$$p[s \rightarrow s']p[s] = p[s' \rightarrow s]p[s'], \quad (6.7)$$

dónde  $p[s]$  es la probabilidad de la configuración  $[s]$  y  $p[s \rightarrow s']$  es la probabilidad de la transición de la configuración  $[s]$  a  $[s']$ , de igual manera  $p[s']$  es la probabilidad de la configuración  $[s']$  y  $p[s' \rightarrow s]$  es la probabilidad de la transición de la configuración  $[s']$  a  $[s]$  [21].

## 6.1. Algoritmo de Metropolis

Metropolis es un algoritmo de actualización local. Es decir, generar una nueva configuración requiere de aplicar una probabilidad de transición individualmente a cada elemento de la configuración. Consideremos el modelo de espines 2-d  $O(3)$ , definido en la retícula con condiciones de frontera periódicas  $\mathcal{T}_L^2$ . La de energía de una configuración se define por la ec. (3.17).

El algoritmo de actualización actúa sobre cada espín  $\vec{s}_x \in [s]$  y sus vecinos más cercanos. Se propone un cambio aleatorio en el estado del espín  $\vec{s}_x$  que resulta en una configuración  $[s']$ . Si el cambio propuesto se acepta o se rechaza, depende de la probabilidad de aceptación

$$p[s \rightarrow s'] = \begin{cases} e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])} & \text{si } \mathcal{H}[s'] \geq \mathcal{H}[s] \\ 0 & \text{si } \mathcal{H}[s'] < \mathcal{H}[s]. \end{cases} \quad (6.8)$$

La diferencia en la energía de las configuraciones es

$$\Delta \mathcal{H} = \mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s]. \quad (6.9)$$

Es conveniente definir la probabilidad de aceptación en función de la diferencia de energía entre configuraciones

$$p[s \rightarrow s'] = \begin{cases} e^{-\beta \Delta \mathcal{H}} & \text{si } \Delta \mathcal{H} \geq 0 \\ 0 & \text{si } \Delta \mathcal{H} < 0. \end{cases} \quad (6.10)$$

Si la energía de la configuración disminuye con el cambio, la probabilidad de aceptaciones 1, y se acepta de inmediato.

Si la energía de la configuración aumenta, esta se acepta con una probabilidad  $e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}$ . Si  $\beta \rightarrow 0$ , entonces la probabilidad de aceptación para las configuraciones que aumentan la energía se acerca a 1. Resultando en más ruido térmico. Por otro lado, si  $\beta \rightarrow \infty$  la probabilidad de aceptación de las configuraciones que aumentan la energía tiende a cero. A menor temperatura, menor número de fluctuaciones. Menos fluctuaciones implican que el sistema se acerca a configuraciones de energía cercanas al mínimo.

La prueba de aceptación se repite para cada elemento de la configuración  $[s]$ . El orden de selección puede ser lexicográfico, en la que los espines se eligen siendo un orden basado en las posiciones de la retícula. O aleatorio, donde los espines se eligen al azar. Un barrido de actualización corresponde a una unidad de tiempo discreto de Markov para el algoritmo Metropolis e implica que se ha aplicado la probabilidad de aceptación a un número de espines igual al total  $V$  de espines en una configuración.

En el modelo 2d  $O(3)$ . La diferencia de energía en términos de los espines  $\vec{s}_{i,j} \in \mathbb{Z}_L^2$  es

$$\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s] = (\vec{s}_x - \vec{s}_x') \cdot (\vec{s}_{x+\hat{1}} + \vec{s}_{x-\hat{1}} + \vec{s}_{x+\hat{2}} + \vec{s}_{x-\hat{2}}). \quad (6.11)$$

## 6.2. Algoritmo de Glauber

El algoritmo Glauber [22] es al igual que el algoritmo Metropolis de actualización local. La diferencia es la probabilidad de aceptación. La propuesta es construir una función que cumpla con la ecuación de balance detallado

$$p[s \rightarrow s']p[s] = p[s' \rightarrow s]p[s']. \quad (6.12)$$

Reordenando términos y dividiendo por  $Z$

$$p[s \rightarrow s'] \frac{e^{-\beta\mathcal{H}[s]}}{Z} = p[s' \rightarrow s] \frac{e^{-\beta\mathcal{H}[s']}}{Z}. \quad (6.13)$$

Se propone la probabilidad de aceptación de algoritmo de Glauber como

$$\begin{aligned} p[s \rightarrow s'] &= \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}}{1 + e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}}} \\ &= \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}[s] - \mathcal{H}[s'])}}{1 + e^{\beta(\mathcal{H}[s] - \mathcal{H}[s'])}}} e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])} \\ &= p[s' \rightarrow s] e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

La propuesta cumple la ecuación de balance detallado.

$$p[s \rightarrow s'] = \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}}{1 + e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}}. \quad (6.15)$$

En términos de la diferencia de energía

$$p[s \rightarrow s'] = \frac{e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}}{1 + e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}}. \quad (6.16)$$

Similar al algoritmo de Metropolis dada una configuración  $[s]$ , para cada elemento en la configuración se propone un cambio aleatorio que resulta en una configuración  $[s']$ . Si  $\beta\Delta\mathcal{H} \rightarrow 0$ , entonces la probabilidad de aceptación se aproxima a  $1/2$ . Si  $\beta\Delta\mathcal{H} \rightarrow \infty$  entonces  $e^{-\beta\Delta\mathcal{H}} \rightarrow 0$  y la probabilidad de aceptación se aproxima a 0. Por otro lado, si la energía de la configuración disminuye. Si  $\beta\Delta\mathcal{H} \rightarrow -\infty$  entonces la probabilidad de aceptación tiende a 1.

### 6.3. Algoritmo clúster

Calcular la diferencia de energía entre configuraciones implica realizar pocos cálculos, por lo que los algoritmos de actualización local son muy eficientes lejos de la temperatura crítica. El problema con la temperatura crítica en los algoritmos de actualización locales se hace notar cerca de la temperatura crítica, donde disminuye drásticamente el número de cambios que se aceptan. Por consecuencia, el tiempo de relajación del sistema aumenta exponencialmente. A este fenómeno se le conoce como desaceleración crítica.

Definición: Clúster.

Un clúster es un subconjunto de espines de una configuración que comparten un vínculo directo o indirecto.

Para estudiar sistemas en equilibrio cerca de la temperatura crítica hay una opción más conveniente. Se trata de aplicar un algoritmo que actualice grupos de espines en vez de espines individuales [23, 24].

El algoritmo clúster sugerido por R. Swendsen y J. Wang, se basa en la observación de que la función de partición se puede escribir como una suma sobre un grupo de distribuciones [24, 25].

Consiste en generar clústeres y cambiar la configuración de cada subconjunto de espines a la vez. Una de las principales ventajas del algoritmo clúster es que evita la desaceleración crítica característica de los algoritmos de actualización local.

Un clúster puede estar formado por un único espín si no hay vínculos con sus vecinos, o puede estar formado por todos los espines de la configuración, caso frecuente cerca de la temperatura crítica.

Se propone un vector aleatorio  $\vec{w} \in S^2$ , se elige un espín  $\vec{s}_x$  y se calcula la reflexión de  $\vec{s}_x$  respecto al plano normal a  $\vec{w}$  aplicando la transformación de Wolff

$$\vec{s}_x' = \vec{s}_x - 2(\vec{w} \cdot \vec{s}_x)\vec{w}. \quad (6.17)$$

Para determinar si el espín  $\vec{s}_x$  está enlazado con sus espines vecinos más cercanos, se calcula la probabilidad de vínculo dada por la función

$$p_{\text{vínculo}} = \begin{cases} 1 - e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])} & \text{si } \mathcal{H}[s'] \geq \mathcal{H}[s] \\ 0 & \text{si } \mathcal{H}[s'] < \mathcal{H}[s]. \end{cases} \quad (6.18)$$

En términos de la diferencia de energía  $\Delta\mathcal{H}$  se tiene

$$p_{\text{vínculo}} = \begin{cases} 1 - e^{-\beta\Delta\mathcal{H}} & \text{si } \Delta\mathcal{H} \geq 0 \\ 0 & \text{si } \Delta\mathcal{H} < 0. \end{cases} \quad (6.19)$$

Para probar el vínculo entre dos espines vecinos  $\vec{s}_x, \vec{s}_y$ , se calcula la diferencia en la energía de las configuraciones

$$\Delta\mathcal{H} = \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y - \vec{s}_x' \cdot \vec{s}_y. \quad (6.20)$$

Se calcula la probabilidad de vínculo, con lo que se decide si los espines están enlazados.

Una forma de realizar el proceso de formación de grupos es usar el algoritmo de Hoshen-Kopelman que se describe en el apéndice B.

En la variante single-cluster, se forma un único clúster, y se cambia el estado de todos los espines la vez aplicando transformación de Wolff ec. (6.17).

En la variante multi-cluster se forman todos los clústeres posibles. Una vez formados, se decide si se aplica la transformación de Wolff con probabilidad  $p_{\text{giro}} = 1/2$ , valor que minimiza el tiempo de relajación del sistema al mantener más o menos la mitad de los grupos y cambiar la configuración de la otra mitad.



## Capítulo 7

# Simulaciones en equilibrio

En esta sección se miden las diferentes observables que se han descrito en los capítulos anteriores, en una simulación del modelo 2d  $O(3)$ . Para ello, se ha escrito un programa en Fortran con rutinas de generación de configuraciones y actualización de estados en función de la temperatura para cada uno de los algoritmos descritos. Algunos términos básicos son:

- hot-start. Es una configuración inicial de espines aleatorios.
- cold-start. Es una configuración inicial de espines alineados.
- Actualización. Una actualización es un cambio o una propuesta de cambio de una configuración.
- Barrido de actualizaciones. Un barrido es la actualización de  $V = L \times L$  espines seleccionados en orden lexicográfico, aleatorio o por su pertenencia a un clúster.

El programa que se encarga de las simulaciones sigue los siguientes pasos:

1. Se genera una configuración en equilibrio termodinámico a temperatura  $T$ .
2. Se actualiza la configuración.
3. Se miden las observables.
4. Si el número de observables medidas es menor al número requerido, se regresa al paso 2.

Como se ve en la Figura (7.1), las observables de un sistema fluctúan entre mediciones. Por lo que un resultado se calcula a partir del promedio de un número de mediciones suficientemente grande para alcanzar la precisión deseada.

### 7.1. Tiempo de autocorrelación

Se calculó el tiempo de autocorrelación en equilibrio térmico para las temperaturas  $T \in \{0.7, 0.8, 0.9, 1.0\}$  en una retícula de tamaño  $L \times L$  donde  $L = 64$ . En todos los experimentos numéricos se partió de una configuración inicial hot-start. Ya que en este punto se desconocía el

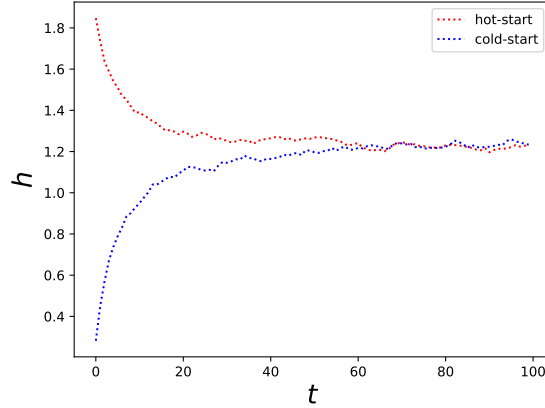


Figura 7.1: Termalización de dos sistemas 2d  $O(3)$  a temperatura  $T = 1$ ,  $L = 64$ . La trayectoria cold-start, parte de un estado de energía máxima en el que todos los espines están alineados. La trayectoria hot-start, parte de una configuración aleatoria. En unos 100 barridos de actualización, ambas trayectorias oscilan alrededor de una energía del sistema termalizado.

tiempo de autocorrelación, se realizaron  $10^4$  barridos de actualización del algoritmo multi-clúster, asegurando una configuración completamente termalizada.

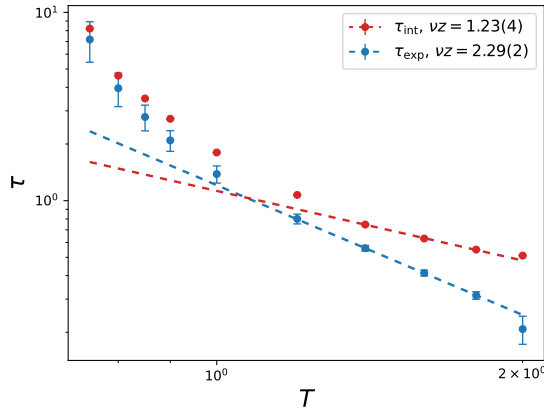
En el caso de la carga topológica, el tiempo de autocorrelación del algoritmo multi-clúster no puede medirse debido a la eficiencia con la que el algoritmo alcanza la configuración de equilibrio.

En el caso de los algoritmos de actualización local, hay una desaceleración crítica cerca de la temperatura  $T = 0$ .

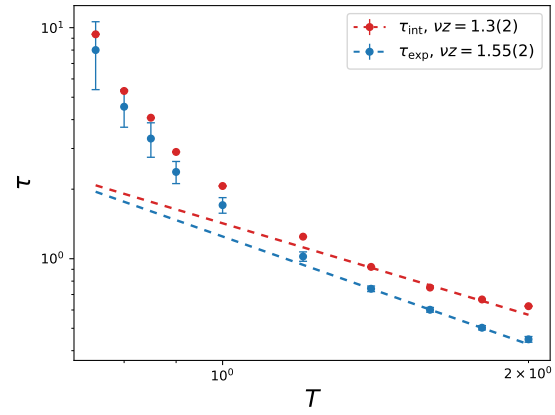
Los tiempos de autocorrelación se calcularon por ajuste a la función exponencial y por integración, ambos resultados fueron consistentes para  $T \in \{0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0\}$ .

Finalmente, se ajustó el tiempo de autocorrelación en función de la temperatura siguiendo la ecuación

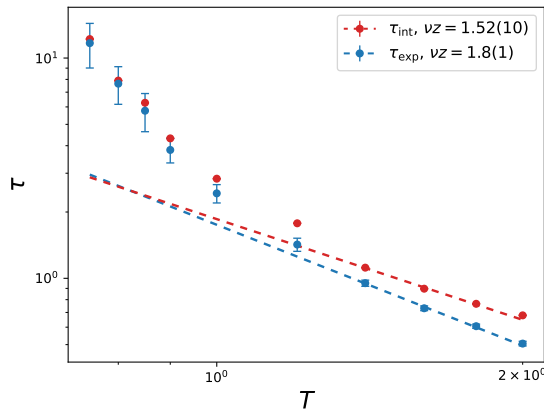
$$\tau \propto T^{-\nu z}. \quad (7.1)$$



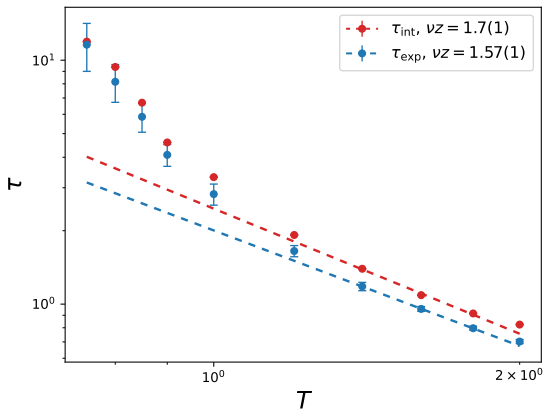
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.

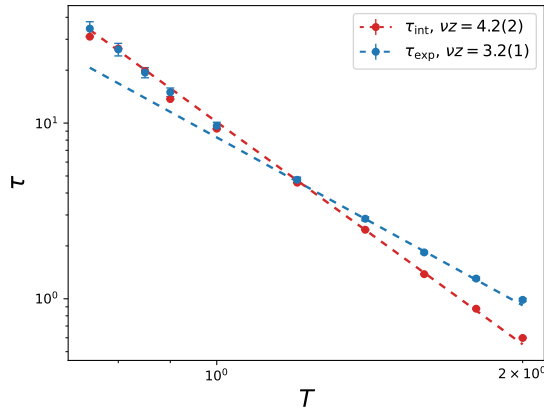


(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

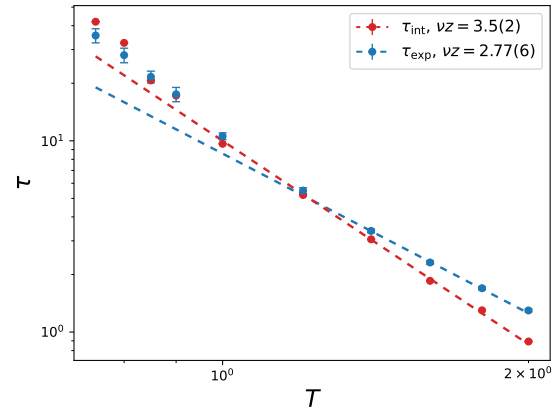


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

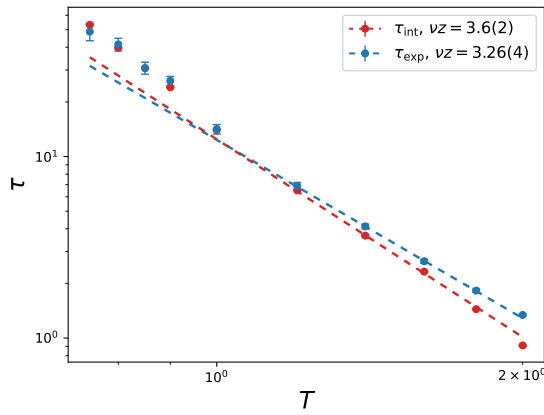
Figura 7.2: Tiempo de autocorrelación de la carga topológica en función de la temperatura en una retícula de longitud  $L = 64$ .



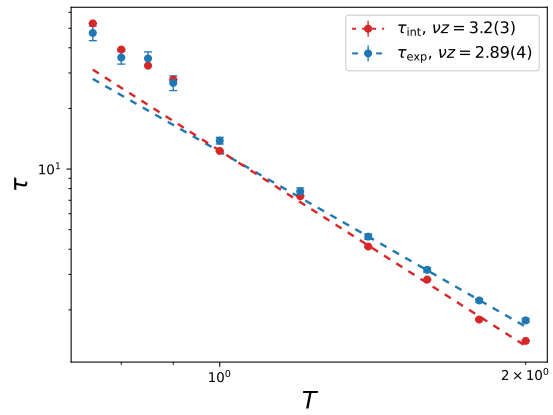
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

Figura 7.3: Tiempo de autocorrelación de la densidad de energía en función de la temperatura en una retícula de tamaño  $L = 64$ .

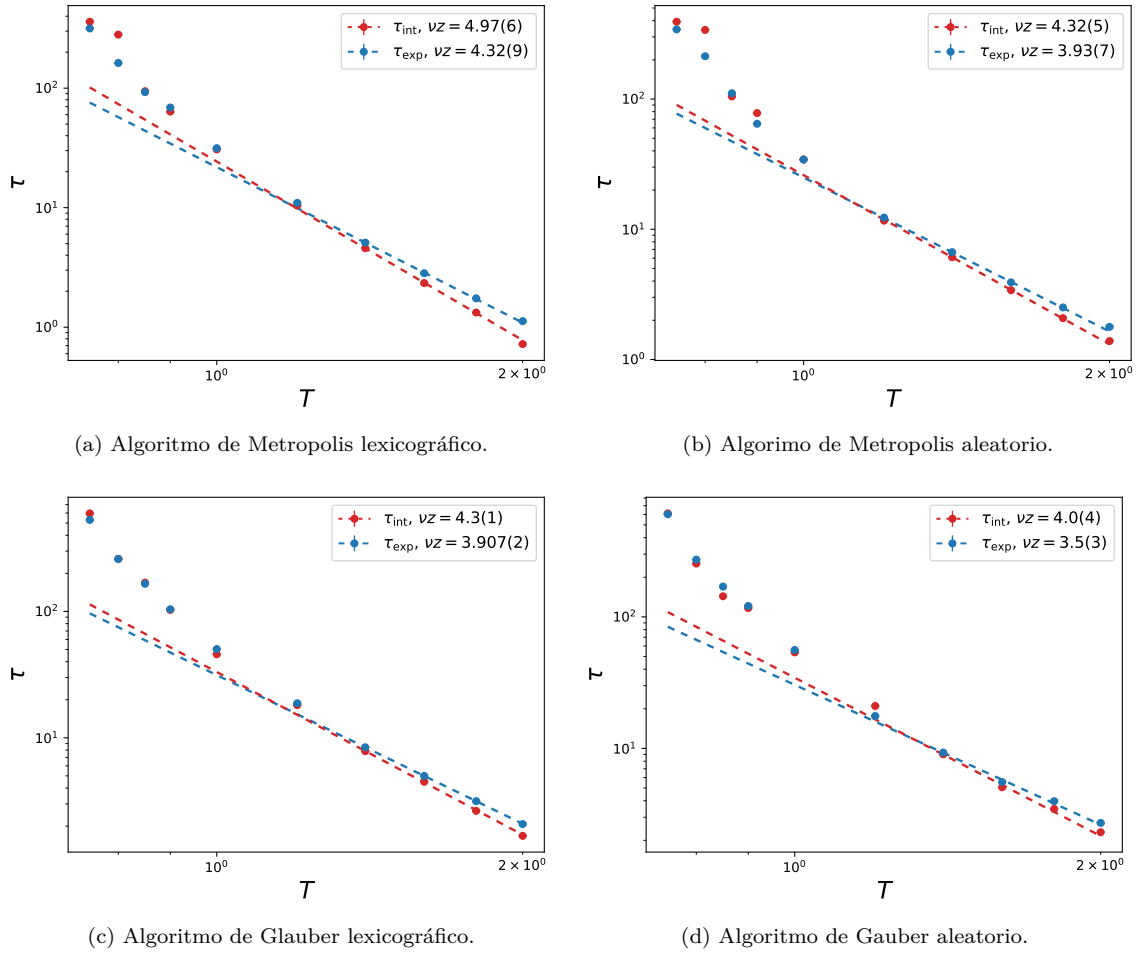


Figura 7.4: Tiempo de autocorrelación de la magnetización en función de la temperatura en una retícula de tamaño  $L = 64$ .

Algoritmo	$Q$	$\mathcal{H}$	$M$
Metropolis lexicográfico	2.29(2)	3.2(1)	4.32(9)
Metropolis aleatorio	1.55(2)	2.77(6)	3.93(7)
Glauber lexicográfico	1.8(1)	3.26(4)	3.907(2)
Glauber aleatorio	1.57(1)	2.89(4)	3.5(3)

Tabla 7.1: Exponente crítico  $\nu z$  para el tiempo de autocorrelación. Se toma el promedio entre el exponente para el tiempo de autocorrelación integrado y el ajustado.

Las definiciones de tiempo de autocorrelación integrada y por ajuste discrepan fuertemente a

muy baja temperatura. se mantiene cercanas en el rango de temperaturas  $(0.7, 1)$ , a mayor temperatura el calor mínimo  $1/2$  asociado a la definición integrada mantiene una discrepancia en los valores.

El algoritmo multi-cluster termalizó las configuraciones en un barridos de actualización en el rango de temperaturas usado por lo que no se pudo determinar un exponente  $\nu z$ .

## 7.2. Longitud de correlación

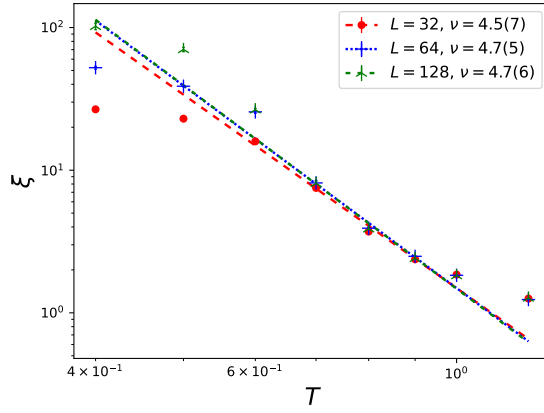
Se realizó una serie de experimentos numéricos para determinar características generales del modelo 2d  $O(3)$ ,

Se calculó la longitud de correlación en retículas de tamaño  $L \times L$  donde  $L \in \{32, 64, 128\}$  para las temperaturas  $T \in \{0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 1.2\}$ .

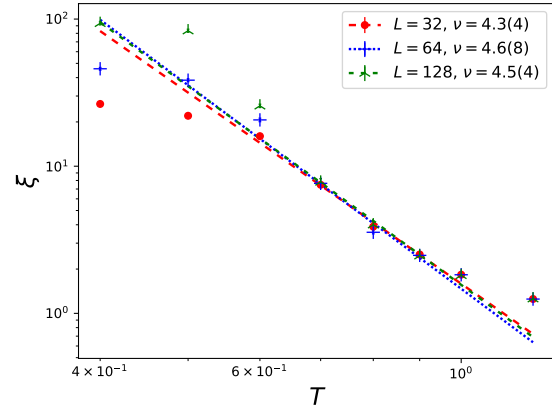
En todos los casos, se partió de una configuración hot-start y se termalizó durante  $10^4$  actualizaciones del algoritmo multi-clúster.

Cada uno de los exponentes críticos está registrado en la tabla 7.2. Se ajustaron las longitudes de correlación respecto a la temperatura a la función

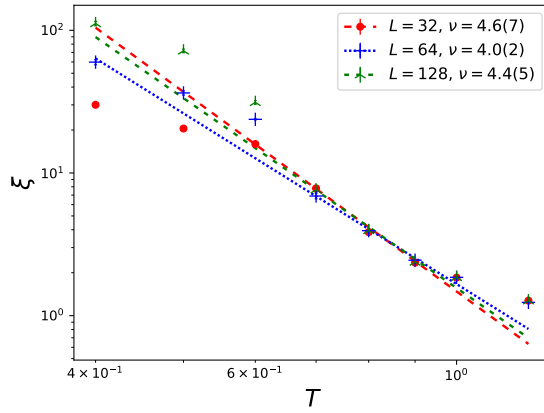
$$\xi \propto T^{-\nu}. \quad (7.2)$$



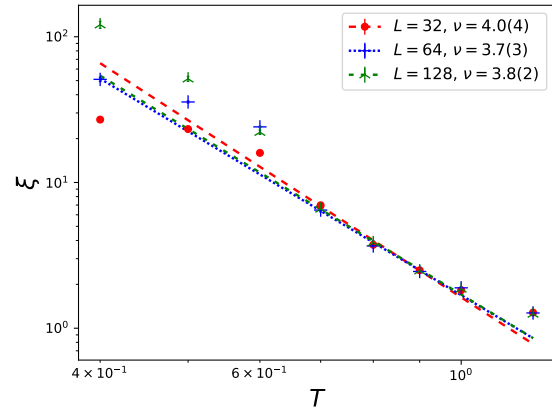
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio

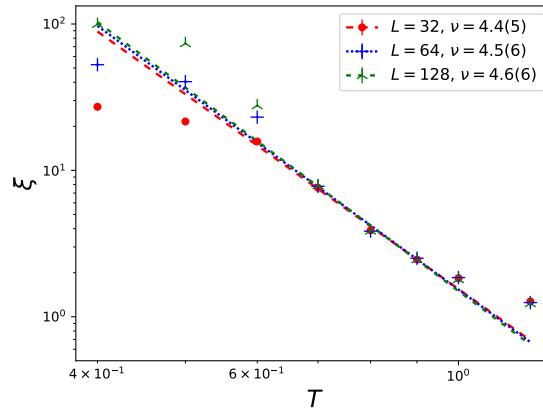
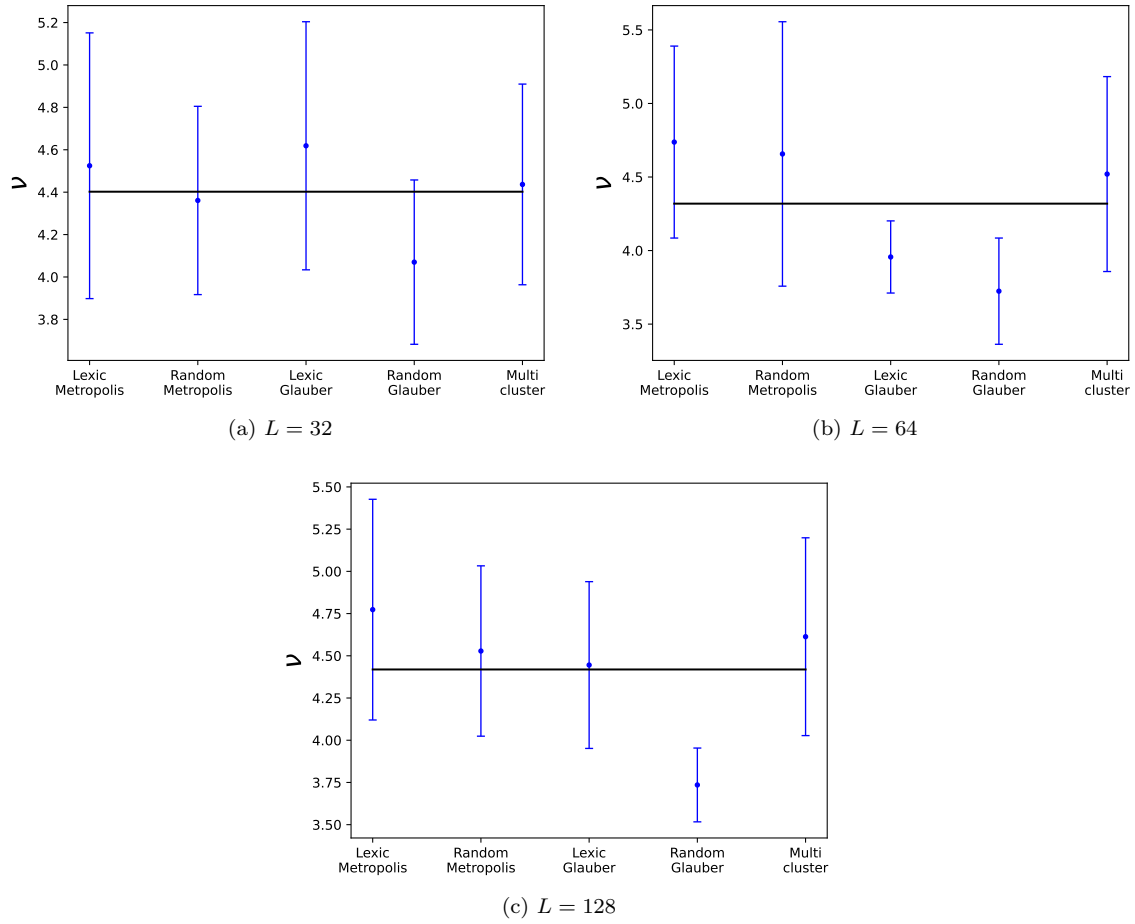
(e) Algoritmo *multi-clúster*

Figura 7.5: Longitud de correlación en función de la temperatura para las retículas de tamaño  $L \in \{32, 64, 128\}$ , algoritmo multi-clúster.

Figura 7.6: Longitud de correlación para los diferentes algoritmos dada una retícula de tamaño  $L$ .

$L$	Metropolis lexicográfico	Metropolis aleatorio	Glauber lexicográfico	Glauber aleatorio	multi-clúster
32	4.5(7)	4.3(4)	4.6(7)	4.0(4)	4.4(5)
64	4.7(5)	4.6(8)	4.0(2)	3.7(3)	4.5(6)
128	4.7(6)	4.5(4)	4.4(5)	3.8(2)	4.6(6)

Tabla 7.2: Exponente crítico  $\nu$  obtenido en las retículas de tamaño  $L \times L$  dónde  $L \in \{32, 64, 128\}$ .

Los efectos de volumen finito son más fuertes en temperaturas menores a  $T = 0.7$ , por tanto, se consideraron las temperaturas posteriores para el ajuste. Promediando los exponentes críticos para  $L = 128$  se tiene  $\nu = 4.4(5)$ .



### 7.3. Exponente crítico dinámico

El exponente crítico dinámico se obtuvo a partir de las longitudes de correlación y los tiempos de autocorrelación para las temperaturas  $T \in \{0.7, 0.8, 0.9, 1.0\}$  en una retícula de tamaño  $L \times L$  dónde  $L = 64$ . El exponente crítico se calculo siguiendo la ecuación

$$\tau \propto \xi^z. \quad (7.3)$$

Como el exponente crítico de autocorrelación no pudo medirse para el algoritmo multi-clúster, tampoco fue posible calcular el exponente crítico dinámico, en consecuencia en la tabla 7.3 se excluyen los exponentes críticos para el algoritmo multi-clúster.

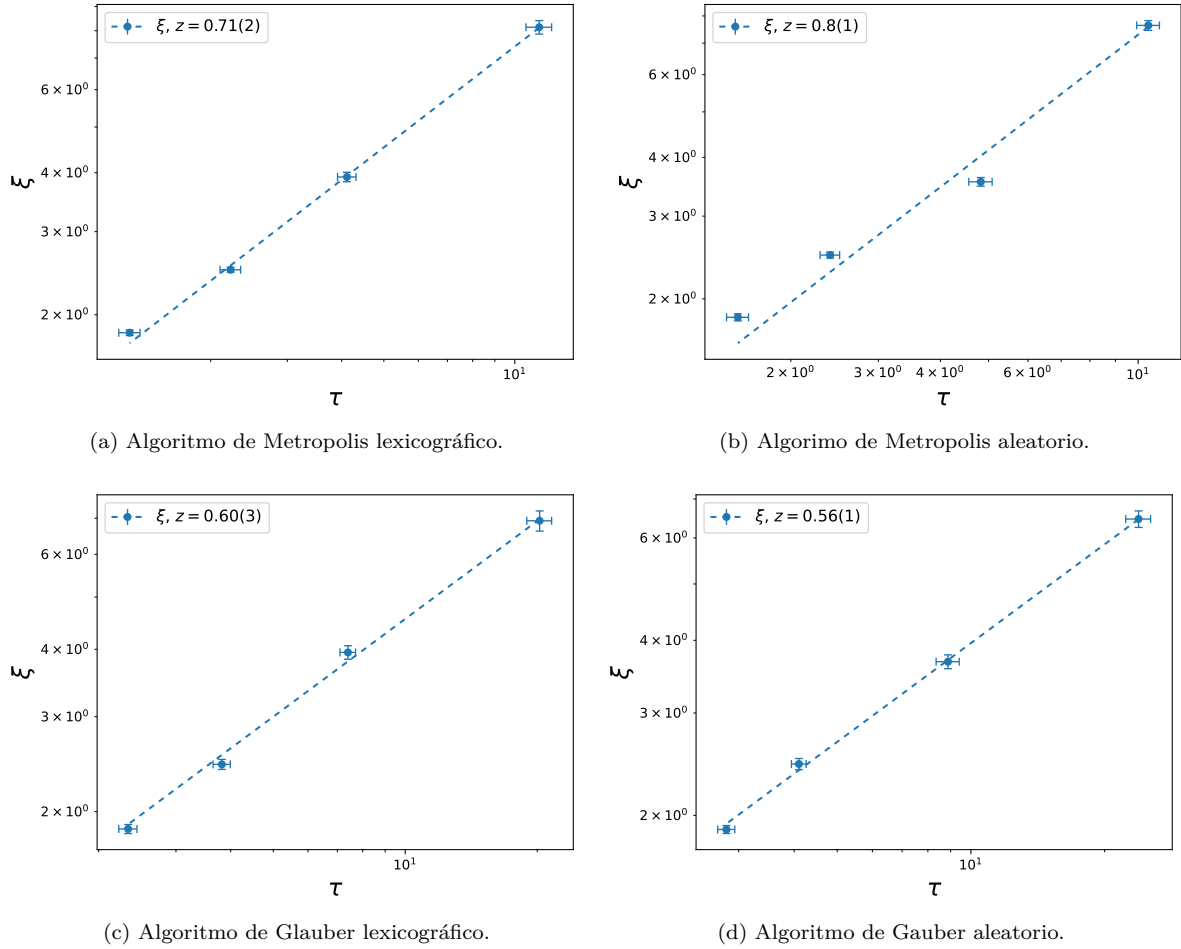
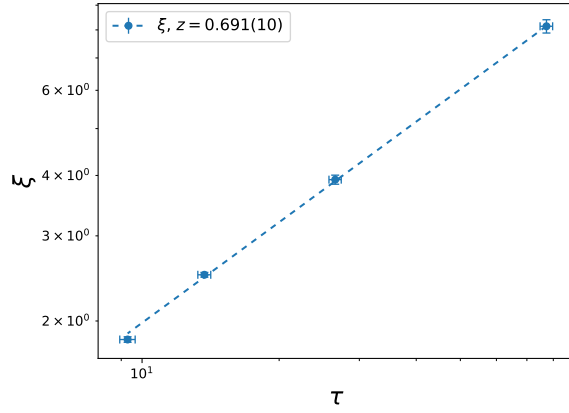
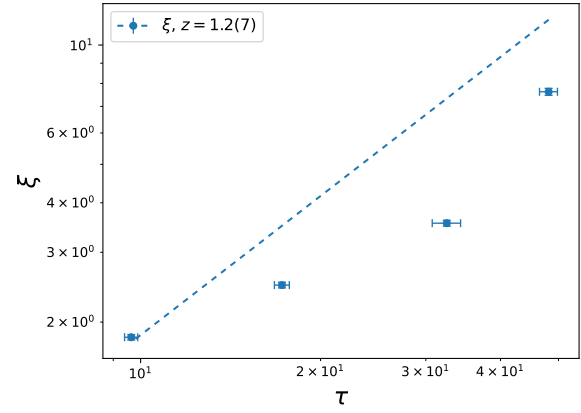


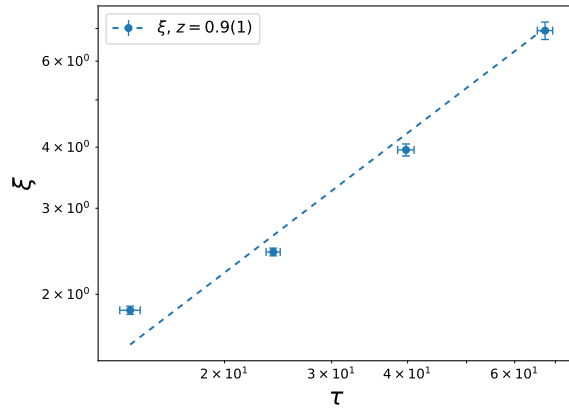
Figura 7.7: Tiempo de autocorrelación de la susceptibilidad topológica en función de la longitud de correlación en una retícula de tamaño  $L = 64$ .



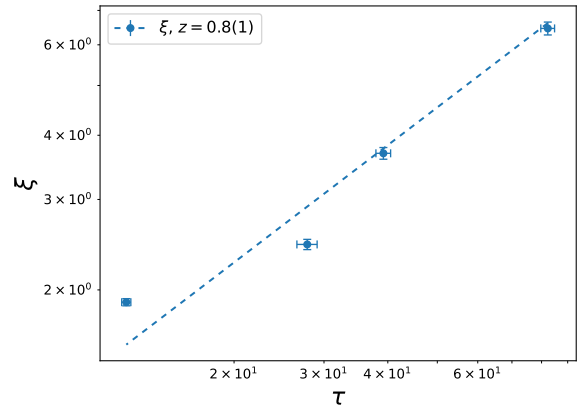
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

Figura 7.8: Tiempo de autocorrelación de la energía en función de la longitud de correlación en una retícula de tamaño  $L = 64$ .

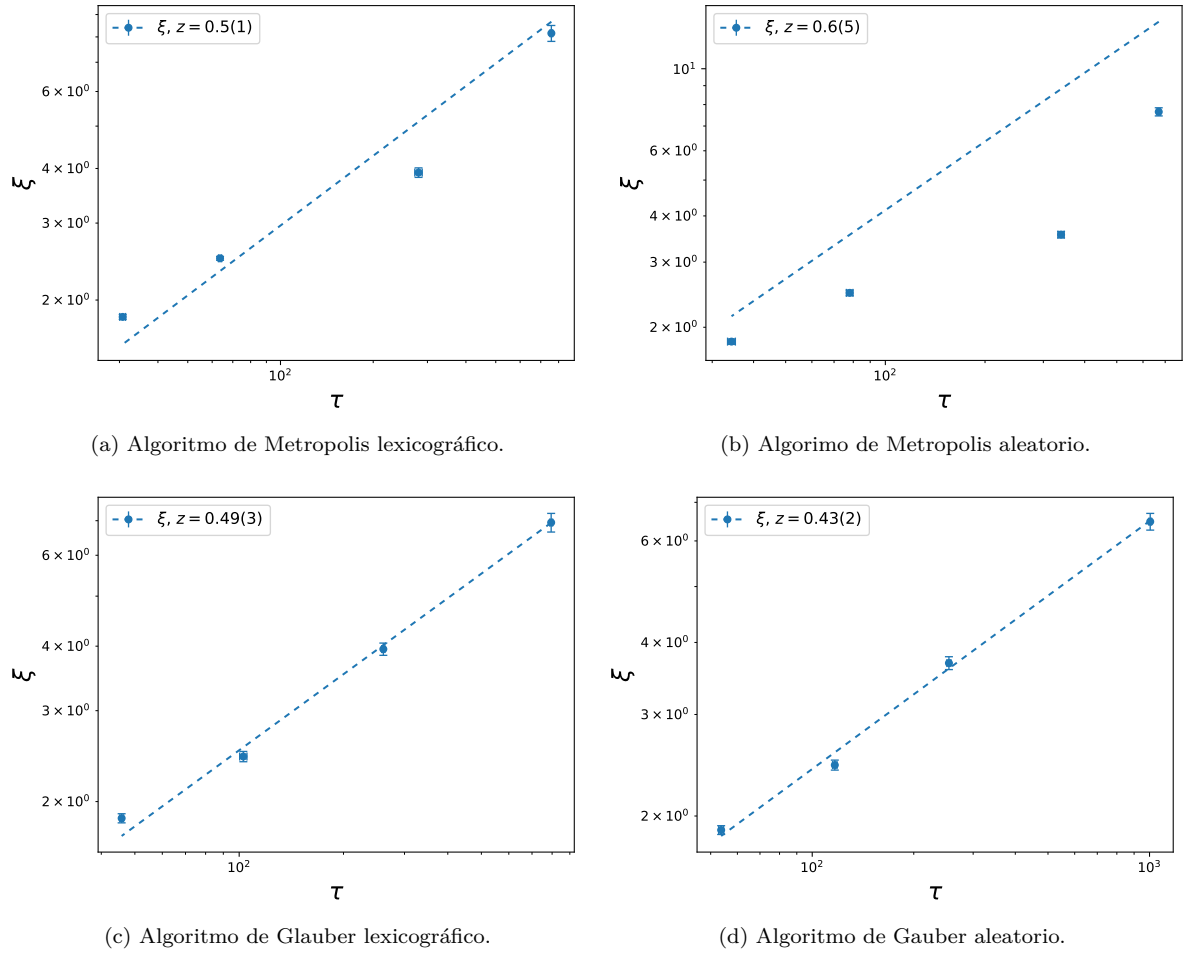


Figura 7.9: Tiempo de autocorrelación de la magnetización en función de la longitud de correlación en una retícula de tamaño  $L = 64$ .

Algoritmo	$\chi$	$\mathcal{H}$	$M$
Metropolis lexicográfico	0.71(2)	0.69(1)	0.5(1)
Metropolis aleatorio	0.8(1)	1.2(6)	0.6(5)
Glauber lexicográfico	0.60(3)	0.9(1)	0.49(3)
Glauber aleatorio	0.56(1)	0.8(1)	0.43(2)

Tabla 7.3: Exponente crítico  $z$  dinámico para la susceptibilidad topológica  $\chi_t$ , la energía  $\mathcal{H}$  y la magnetización  $M$ .

	$\chi$	$\mathcal{H}$	$M$
$\zeta$	1.6(2)	1.1(1)	0.9(1)

Tabla 7.4: Promedio de los valores calculados para el exponente critico en el mecanismo de Kibble-Zurek. Las observables son: la susceptibilidad topológica, la energía y la magnetización. Los valores obtenidos son compatibles.

Se calculó el valor del exponente del mecanismo de Kibble-Zurek [26] siguiendo la ecuación

$$\zeta = \frac{\nu}{1 + \nu z}, \quad (7.4)$$

y usando los exponentes críticos de las tablas 7.2 y 7.3. Finalmente se obtuvieron los resultados promedio expresados en la tabla 7.4.

## Capítulo 8

# Simulación de enfriamientos

Un enfriamiento rápido, se da cuando un sistema pasa de una temperatura inicial  $T_i$  a una temperatura final  $T_f$  en un tiempo  $t$  menor al tiempo de autocorrelación del sistema. La simulación de un enfriamiento se realiza cambiando la temperatura del sistema entre cada barrido de actualizaciones. El decremento de la temperatura entre cada barrido define la velocidad del enfriamiento. Se define la velocidad de enfriamiento como

$$v_{\text{cool}} = \frac{T_i - T_f}{\tau_{\text{cool}}} < 0. \quad (8.1)$$

La variable  $\tau_{\text{cool}}$  es la tasa de cambio de temperatura o tasa de enfriamiento y corresponde al número de pasos para llegar desde la temperatura inicial  $T_i$  hasta la temperatura final  $T_f$ . Conforme avanza el tiempo de Markov en el rango  $t \in [0, \tau_{\text{cool}}]$ , la temperatura cambia siguiendo la ecuación

$$T(t) = T_i - v_{\text{cool}}t. \quad (8.2)$$

Una simulación de enfriamiento consta de los siguientes pasos:

1. Se genera una configuración en equilibrio termodinámico a temperatura  $T$ .
2. Se actualiza la configuración a temperatura  $T(t)$
3. Se miden las observables y se aumenta el tiempo de Markov de  $t$  a  $t + 1$ .
4. Si  $T < 0$ , se regresa al paso 2.

Como se hace en las simulaciones en equilibrio, una medición se obtiene de promediar un número de mediciones suficientemente grande para alcanzar la precisión estadística deseada. Se realiza un número  $N$  de enfriamientos y se obtiene un promedio de las mediciones en el mismo instante  $t$ .

En cada enfriamiento se mide una trayectoria para cada observable en función del tiempo de Markov o de manera equivalente en función de la temperatura.

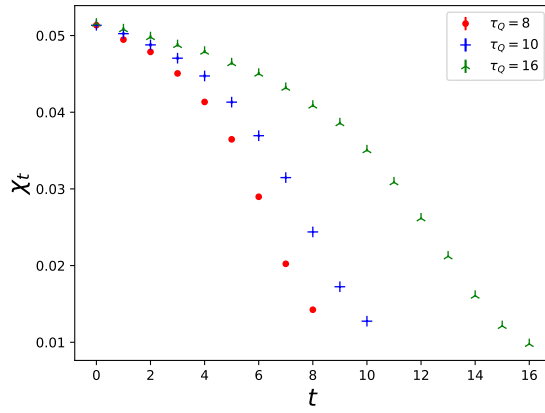
### 8.1. Enfriamientos rápidos

En esta sección se espera conocer si en un modelo donde la temperatura crítica es  $T_c = 0$  se cumple la ley de escalamiento

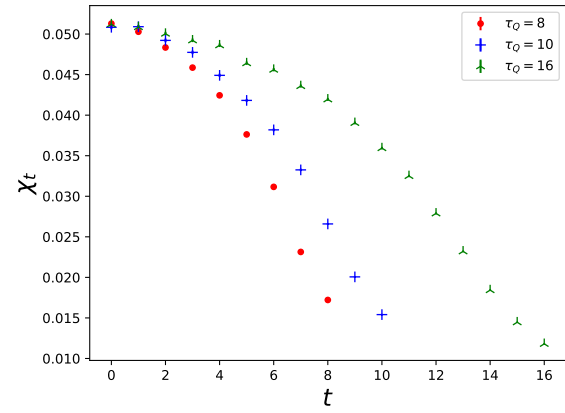
$$\chi_t \propto \tau_{\text{cool}}^{-\zeta}, \quad (8.3)$$

realizando enfriamientos que se acercan (pero no cruzan) a la temperatura crítica.

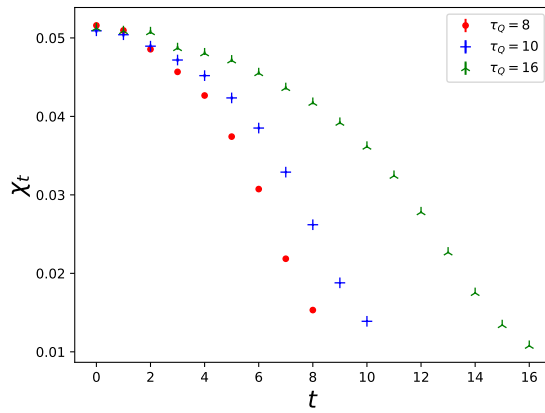
Se realizaron  $10^5$  enfriamientos desde la temperatura  $T_i = 4$  hasta  $T_f = 0$ , usando las tasas de cambio de temperatura  $\tau_{\text{cool}} \in \{8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18\}$ . En cada experimento numérico se midió la susceptibilidad topológica, la energía y la magnetización.



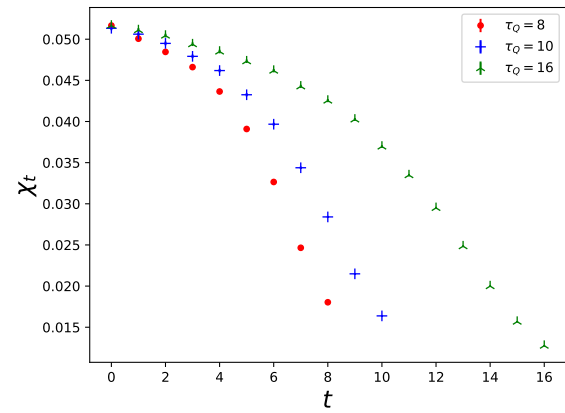
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



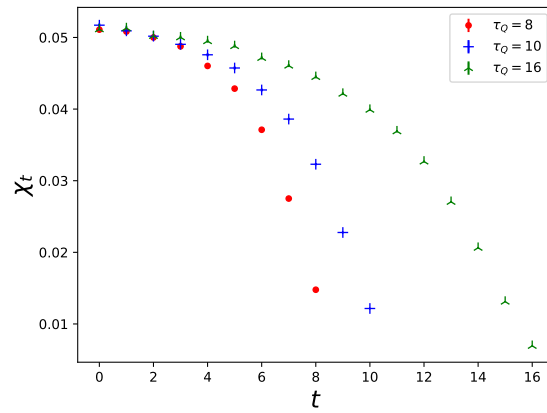
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico

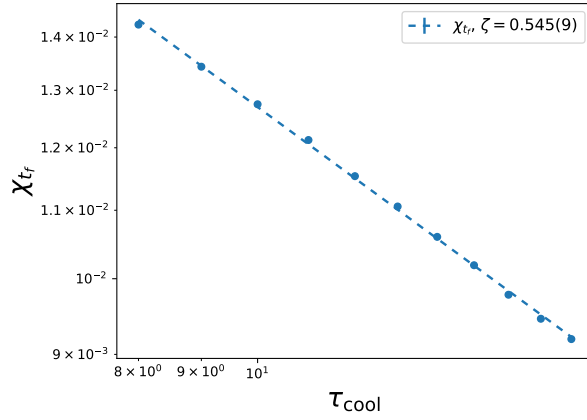


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio

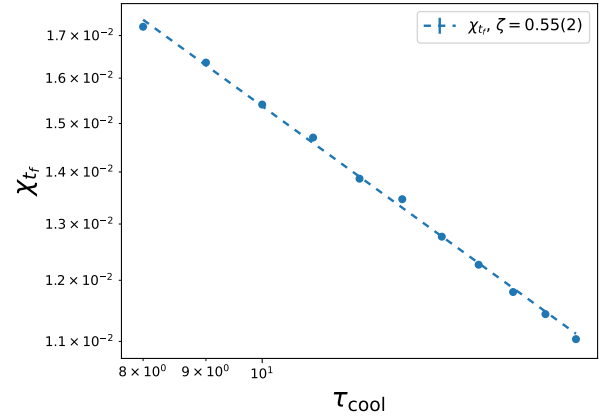


(e) Algoritmo multi-clúster

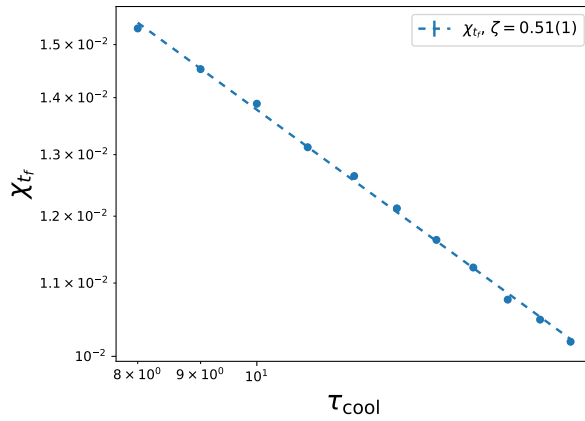
Figura 8.1: Evolución de los enfriamientos de la susceptibilidad topológica  $\chi_t$  respecto a la temperatura  $T$ , para diferentes tasas de cambio de temperatura  $\tau_{\text{cool}} \in \{8, 10, 16\}$ .



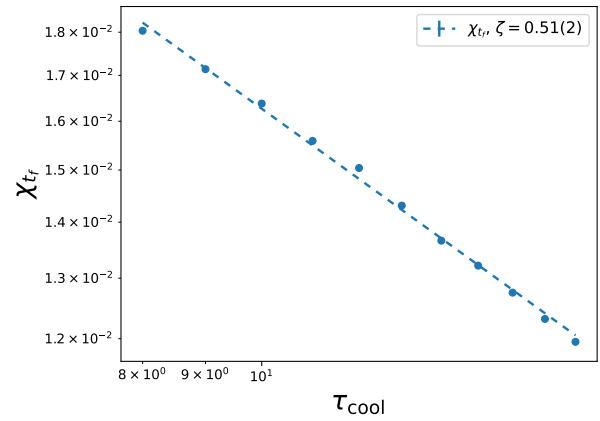
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



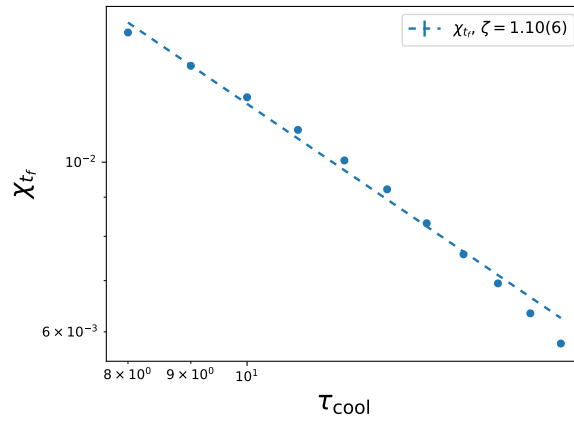
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico



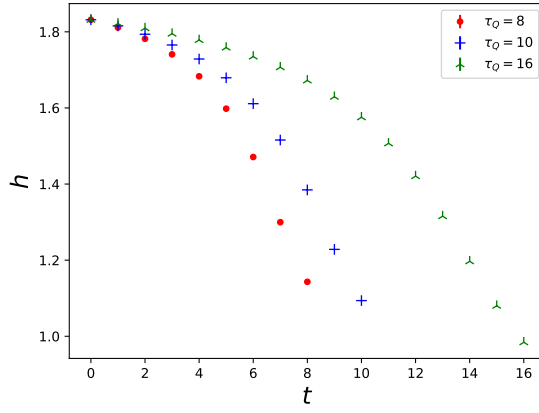
(d) Algoritmo de Glauber aleatorio



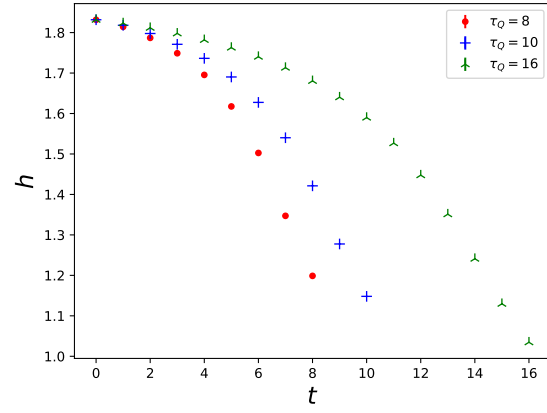
(e) Algoritmo multi-clúster

Figura 8.2: Susceptibilidad topológica final  $\chi_{t_f}$  respecto a la tasa de cambio de temperatura  $\tau_{cool}$ .

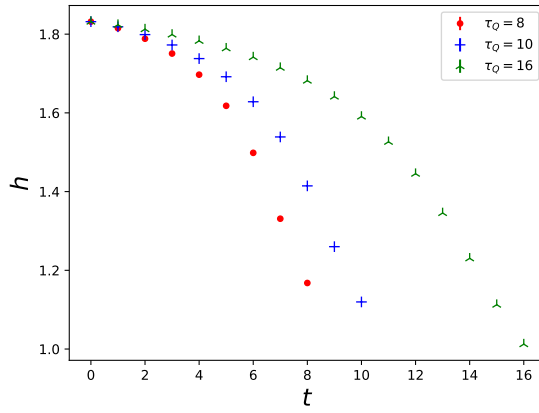




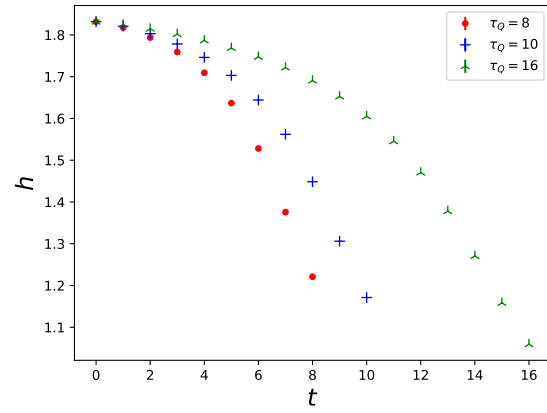
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



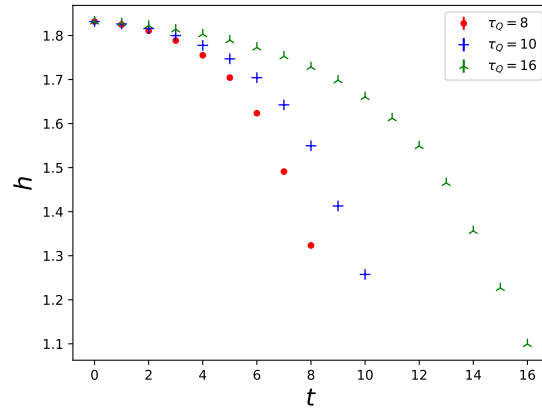
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico

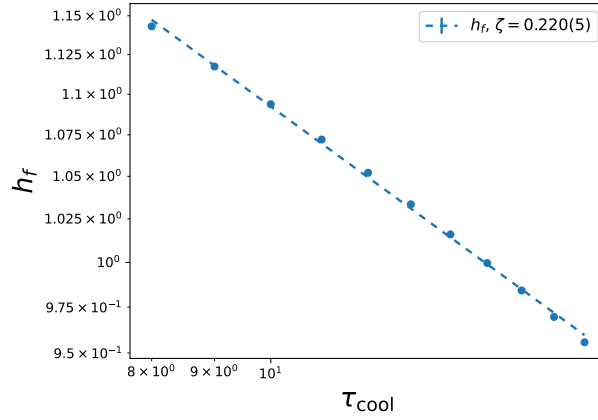


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio

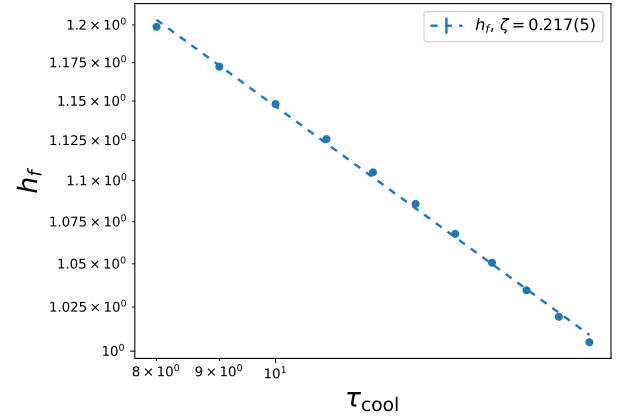


(e) Algoritmo multi-clúster

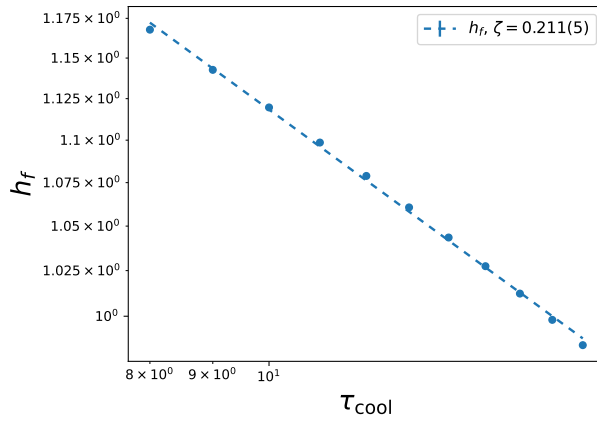
Figura 8.3: Evolución de los enfriamientos de la densidad de energía  $\rho_{\mathcal{H}}$  respecto a la temperatura  $T$ , para diferentes velocidades de enfriamiento  $\tau_{\text{cool}} \in \{8, 10, 16\}$ .



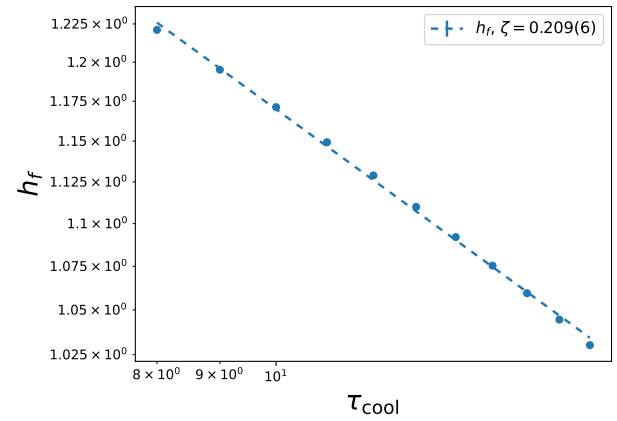
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



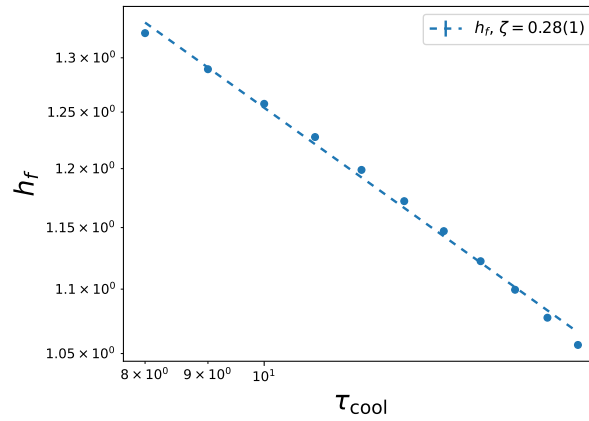
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico

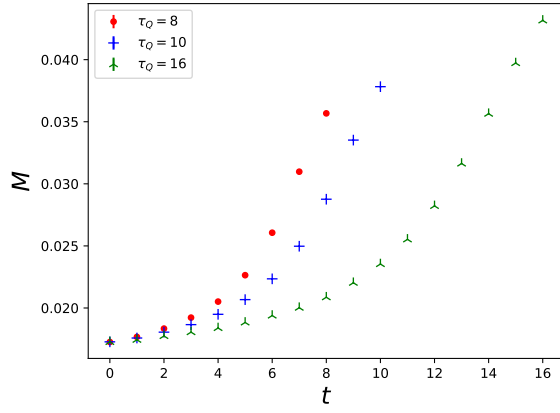


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio

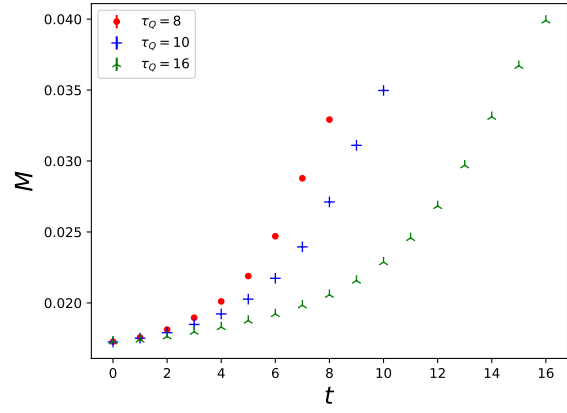


(e) Algoritmo multi-clúster

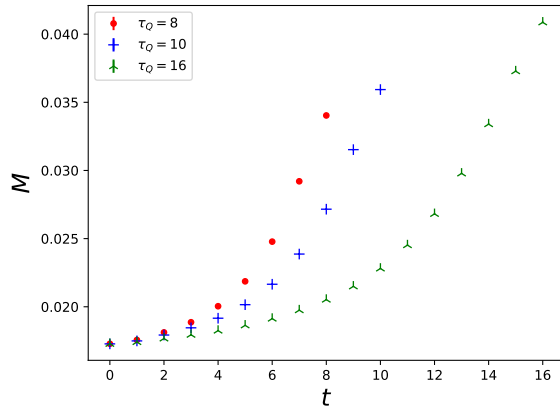
Figura 8.4: Densidad de energía final  $\rho_{\mathcal{H}_f}$  respecto a la tasa de cambio de temperatura  $\tau_{\text{cool}}$ .



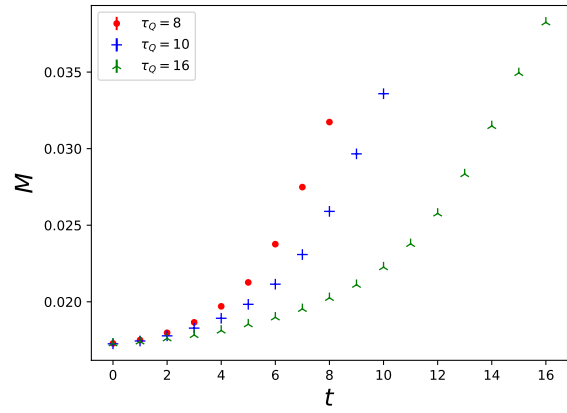
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



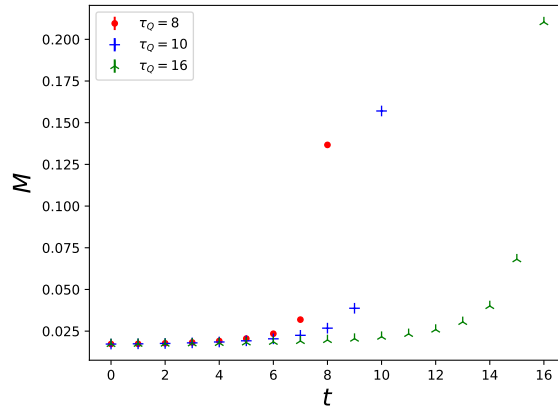
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico

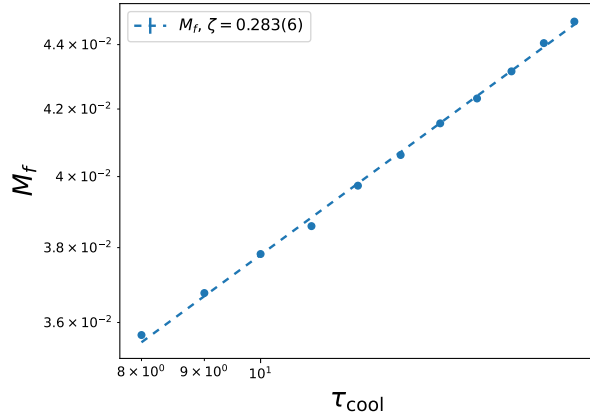


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio

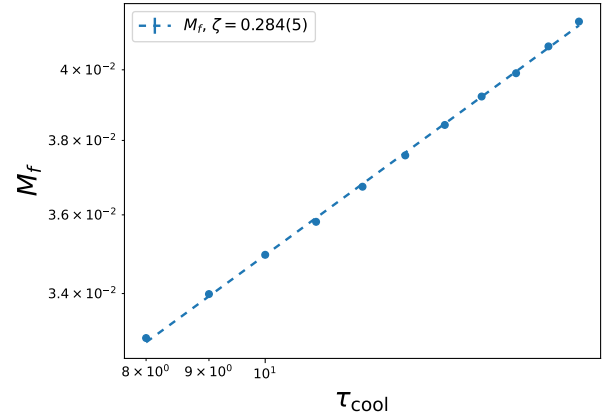


(e) Algoritmo multi-clúster

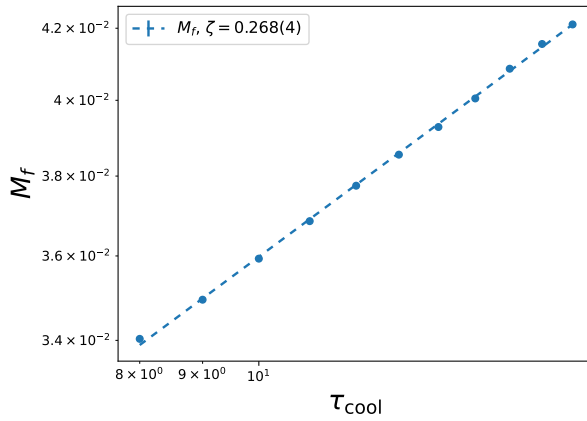
Figura 8.5: Evolución de los enfriamientos de la magnetización  $m$  respecto a la temperatura  $T$ , para diferentes tasas de cambio de temperatura  $\tau_{\text{cool}} \in \{4, 6, 8\}$ .



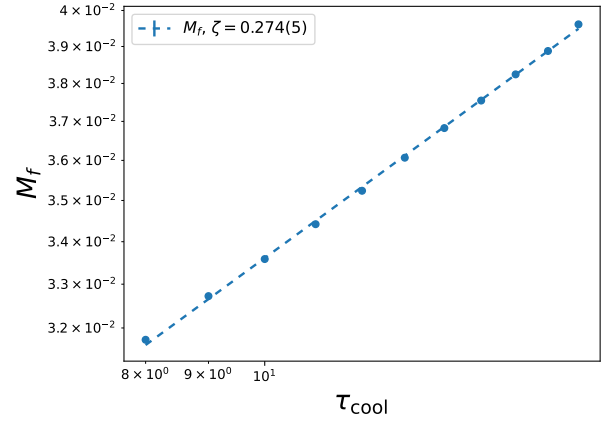
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



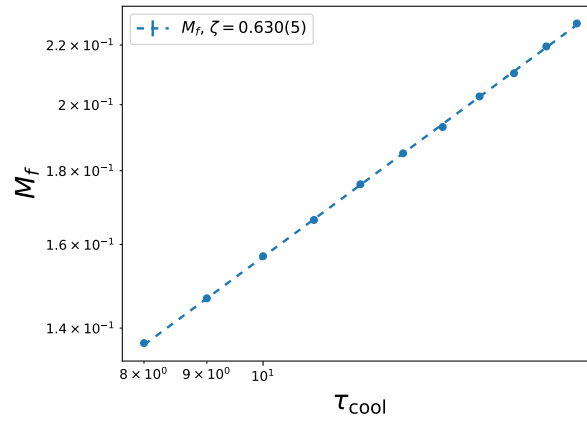
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio



(e) Algoritmo de multi-clúster

Figura 8.6: Magnetización final  $m_f$  respecto a la tasa de cambio de temperatura  $\tau_{\text{cool}}$ .

Algoritmo	$Q$	$\mathcal{H}$	$M$
Metropolis lexicográfico	0.54(1)	0.220(5)	0.283(7)
Metropolis aleatorio	0.55(1)	0.218(5)	0.283(5)
Glauber lexicográfico	0.51(1)	0.211(5)	0.267(4)
Glauber aleatorio	0.51(2)	0.210(6)	0.274(5)
multi-clúster	1.10(8)	0.28(1)	0.630(5)

Tabla 8.1: Exponentes críticos  $\zeta$  respecto a la susceptibilidad topológica, la energía y la magnetización para los diferentes algoritmos.

En la tabla 8.1 se observa que el exponente crítico  $\zeta$  es menor para los algoritmos de actualización local.

## Capítulo 9

# Resumen y conclusiones

Se realizaron simulaciones del modelo 2d  $O(3)$ , usando los siguientes algoritmos:

- Metropolis lexicográfico
- Metropolis aleatorio
- Glauber lexicográfico
- Glauber aleatorio
- multi-cluster

En las simulaciones en equilibrio, se midió la longitud de correlación y el exponente crítico dinámico, para las observables de susceptibilidad topológica, energía y magnetización.

Se simuló un sistema con diferentes velocidades de enfriamiento. Se midió numéricamente múltiples cantidades:

- La carga topológica y su susceptibilidad.
- la energía.
- la magnetización.

Cada una en función de las diferentes tasas de enfriamiento  $\tau_{cool}$ .

Los resultados para la susceptibilidad topológica llevaron a una ley de escalamiento con exponente  $\zeta = 0.53(1)$  para los algoritmos de actualización locales y  $\zeta = 1.10(8)$  para el algoritmo multi-cluster. Se calculó el exponente  $\zeta = 1.6(2)$  indirectamente usando la ec. (7.4).

Para la energía, los exponentes obtenidos resultaron en  $\zeta = 0.215(5)$  para los algoritmos de actualización locales y  $\zeta = 0.28(1)$  para el algoritmo multi-cluster. Se calculó el exponente  $\zeta = 1.1(1)$  indirectamente.

Para la magnetización, los exponentes obtenidos resultaron en  $\zeta = 0.279(6)$  para los algoritmos de actualización locales y  $\zeta = 0.279(6)$  para el algoritmo multi-cluster. Se calculó el exponente  $\zeta = 0.9(1)$  indirectamente.

Los exponentes críticos  $\zeta$  obtenidos indirectamente resultaron en todos los casos en valores mayores a los exponentes obtenidos en los ajustes.

El mecanismo de Kibble-Zurek se plantea en sistemas donde ocurre una ruptura de la simetría por cruzar la temperatura crítica  $T_c$ . En los experimentos numéricos realizados, no se cruzó una temperatura crítica debido a que esta corresponde al valor  $T_c = 0$ .

Por otro lado, al aproximar el sistema a temperatura cero, se observa una desaceleración crítica menor para la susceptibilidad topológica. Esto podría ser la razón por la cual el valor de  $\zeta$  calculado en el ajuste es más cercano para la susceptibilidad topológica.

Aunque el modelo 2d  $O(3)$  no pasa por la temperatura crítica en los enfriamientos, fue posible ajustar una ley de escalamiento para las observables de susceptibilidad topológica, energía y magnetización. Para los algoritmos de actualización locales, la ley de escalamiento conduce a exponentes críticos  $\zeta$  compatibles respecto a la misma observable. Sin embargo, difieren para diferentes observables.

En el caso del algoritmo multi-cluster no fue posible medir un exponente crítico dinámico por la efectividad de termalización del algoritmo. La dinámica del algoritmo multi-clúster es fundamentalmente diferente a los algoritmos de actualización locales, resulta en la supervivencia de más defectos topológicos. No fue posible calcular el exponente crítico dinámico para el algoritmo multi-cluster, por lo que no se pudo confirmar una compatibilidad entre los resultados obtenidos en equilibrio y los enfriamientos. Sin embargo, sí fue posible medir el exponente crítico  $\zeta$  resultando en una ley de escalamiento para enfriamientos en el rango de temperaturas (4,0) y con tasas de enfriamiento  $\tau_{\text{cool}} \in \{8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18\}$ .

## Apéndice A

# Distribución aleatoria de vectores en la esfera $S^2$

Uno de los principales retos para usar los métodos de Monte Carlo en la simulación del modelo 2d  $O(3)$  es la generación de vectores aleatorios uniformemente distribuidos en la esfera  $S^2$ .

Un elemento de la esfera  $S^2$  se puede escribir como

$$\vec{s} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad (\text{A.1})$$

dónde  $\theta \in [0, \pi]$  y  $\phi \in [0, 2\pi)$  son variables aleatorias.

Un primer intento para generar vectores aleatorios y uniformemente distribuidos es generar parámetros aleatorios  $\theta_r \in [0, \pi]$  y  $\phi_r \in [0, 2\pi)$  uniformemente distribuidos. Sin embargo, si se generan vectores aleatorios de esta manera y se representan sobre una esfera, se observa que la distribución de los vectores es más densa en los polos.

Consideremos ahora una distribución  $f$  de vectores aleatorios  $\vec{s}$  uniformemente distribuidos sobre la superficie de la esfera. Para que se cumpla la condición de uniformidad, la densidad de probabilidad debe ser constante, con valor  $p = 1/4\pi$ , entonces, integral de la densidad de probabilidad sobre el área de la esfera es

$$\frac{1}{4\pi} \int_S d\vec{r} = 1. \quad (\text{A.2})$$

En coordenadas esféricas se tiene

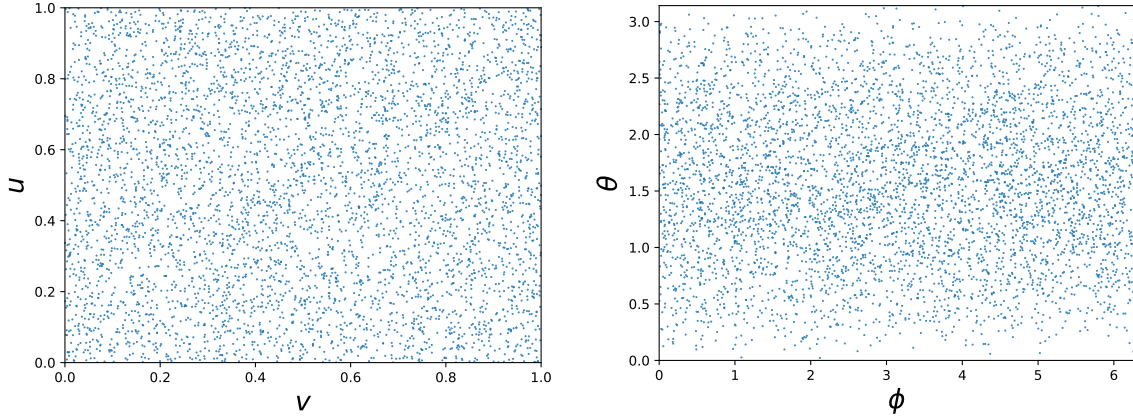
$$\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta d\phi = \left( \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \right) \left( \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \right) = 1. \quad (\text{A.3})$$

Se separa la distribución de probabilidad de vectores en la esfera, en dos distribuciones de probabilidad  $u, v$  para las variables aleatorias  $\theta, \phi$  definidas como

$$U(\theta) = \frac{1}{2} \int_0^\theta \sin \theta' d\theta' = \frac{1}{2} (1 - \cos \theta), \quad V(\phi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\phi d\phi' = \frac{\phi}{2\pi}, \quad (\text{A.4})$$

se definen variables aleatorias  $u, v$  tales que su función de distribución son las variables aleatorias  $\theta, \phi$ .





(a) Distribución aleatoria y uniforme de las variables  $u, v$ . (b) Transformación de las variables  $u, v$  a las variables  $\theta, \phi$ .

Figura A.1: En la figura (a) se tiene una distribución de puntos homogénea y aleatoria, la distribución se mapea a la distribución de la figura (b) en las variables  $\theta, \phi$ , se obtiene es la que genera vectores aleatorios y uniformemente distribuidos en la esfera.

$$\theta = \arccos(1 - 2u), \quad \phi = 2\pi v, \quad (\text{A.5})$$

dónde  $u, v \in (0, 1)$ .

Recapitulando los pasos para generar un vector aleatorio en la esfera son los siguientes:

1. Se generan dos números aleatorios  $u_r, v_r \in [0, 1]$ .
2. Se calculan las variables  $\theta_r = \arccos(1 - 2u_r), \phi = 2\pi v_r$ .
3. Se calculan las componentes cartesianas y se define el vector  $\vec{s}_r = (\sin \theta_r \cos \phi_r, \sin \theta_r \sin \phi_r, \cos \theta_r)$ .

Dada una esfera  $S^2$  y un vector  $\vec{s}_0$ , el siguiente objetivo es generar una distribución de vectores aleatoria y uniformemente distribuida en una región circular  $R$  de la esfera  $S^2$  con centro en  $\vec{s}_0$ .

Se define como la región de la esfera es con centro en  $\vec{s}_0$  tal que la distancia esférica máxima entre  $\vec{s}_0$  y cualquier vector de la distribución es  $\alpha_{\max} = \arccos(1 - 2u_{\max})$ .

$$R = \{ \vec{s} \in S^2 \mid d(\vec{s}, \vec{s}_0) \leq \alpha_{\max} \}, \quad (\text{A.6})$$

dónde  $d(\vec{s}, \vec{s}_0)$  la distancia esférica entre  $\vec{s}$  y  $\vec{s}_0$ . El valor  $u_{\max}$  ajusta el porcentaje  $p$  de la esfera que se cubre, si  $u = 1$  entonces  $\alpha = \pi$  y la región que se cubre es la totalidad de la esfera.

Si se quiere cubrir el porcentaje  $p$  de la esfera, se fija  $u_{\max} = p/100$ .

Pasos para generar un vector aleatorio en  $R$ :

Se genera un vector aleatorio  $\vec{r}$  en la esfera completa. Los vectores  $\vec{s}_0$  y  $\vec{r}$  fijan un círculo máximo sobre la esfera con una orientación aleatoria.

Se calcula un vector ortonormal al plano formado por  $\vec{s}_0$  y  $\vec{r}$  siguiendo la ecuación

$$\vec{k} = \frac{\vec{s}_0 \times \vec{r}}{\|\vec{s}_0 \times \vec{r}\|}. \quad (\text{A.7})$$

Se hace definir el nuevo vector como una rotación de  $\vec{s}_0$  respecto  $\vec{k}$  por un ángulo  $\alpha_r \in (0, \alpha_{\max})$ . El vector aleatorio  $\vec{s}_r$  respecto al vector de referencia  $\vec{s}_r$  es de la forma

$$\vec{s}_r = \vec{s}_0 \cos \alpha_r + (\vec{k} \times \vec{s}_0) \sin \alpha_r. \quad (\text{A.8})$$

La ventaja de generar vectores en un cono sobre la esfera con esta fórmula es que el número de cálculos es menor, que los que se harían al generar vectores en un cono sobre el eje  $z$  y aplicar una rotación, disminuyendo considerablemente el tiempo de cómputo cuando se generan millones de vectores aleatorios.

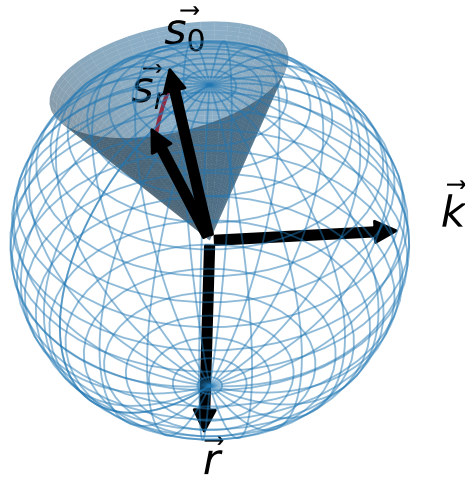


Figura A.2: Rotación de un espín  $\vec{s}$  respecto al eje de rotación  $\vec{k}$  en dirección  $\vec{r}$ . El espín resultante cae dentro del cono delimitado por  $\alpha_{\max}$

## Apéndice B

# Algoritmo Hoshen-Kopelman

**Definición: cúster.**

En una retícula de espines clásicos, un clúster es un conjunto de sitios enlazados directa o indirectamente.

El algoritmo de Hoshen-Kopelman fue descrito por Joseph Hoshen y Raoul Kopelman en 1976 [27]. El algoritmo de Hoshen-Kopelman describe cómo etiquetar los sitios de la retícula en sus respectivos clústeres a partir de una función de vínculo.

El algoritmo de Hoshen-Kopelman es considerablemente más eficiente que otros métodos de formación de clústeres. A diferencia de algoritmos en los que el número de cálculos crece cuadráticamente con el volumen del sistema, en el caso de Hoshen-Kopelman dicho crecimiento es lineal.

Un vínculo directo ocurre entre dos sitios vecinos, mientras que un vínculo indirecto se da entre sitios que no son vecinos, pero que están conectados a un sitio común. Este tipo de vínculo implica la posibilidad de que dos clústeres inicialmente distintos se unan mediante una conexión entre elementos que pertenecen a cada uno de ellos.

Para empezar, vamos a generar una configuración de vínculos en donde cada sitio  $x$  indica los vínculos directos. Por ejemplo, en una retícula cuadrada hay cuatro vecinos más cercanos. Para cada vecino un 1 indica un vínculo directo, mientras que un 0 indica que no hay vínculo. La función de vínculo  $p(x_1, x_2)$  da la probabilidad de vínculo entre los sitios  $x_1$  y  $x_2$ .

Una vez determinados todos los vínculos, se realizan los siguientes pasos:

1. Se selecciona un sitio  $x$  y se comprueban sus vínculos directos.
  - a) Si no hay vínculos directos, se etiqueta al sitio con un identificador  $\alpha$  correspondiente a un clúster de un elemento y se regresa al paso 1.
  - b) Si hay vínculos directos, se pasa al paso 2.
2. Se comprueban los vínculos directos de los sitios vecinos. Todos los espines enlazados en la comprobación se etiquetan con un identificador  $\alpha_i$  correspondiente a un clúster.
3. Se repinten los pasos anteriores etiquetando cada sitio de la retícula en sus respectivos clústeres.

4. En el proceso de formación de cústers, habrá casos en los que a un sitio le corresponden dos o más etiquetas  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ , ya que hay un vínculo indirecto entre clústeres. Los clústeres correspondientes se fusionan en uno y se les asigna la etiqueta  $\alpha_1$ .

Una forma de optimizar la generación de cústers individuales es la ampliación por capas. Es importante diferenciar entre sitios en el interior de un cúster, sitios en la frontera de un clúster y sitios en el exterior.

- Un sitio está en el interior de un clúster si todos sus vecinos más cercanos pertenecen al mismo clúster.
- Un sitio está en la frontera si alguno de sus vecinos más cercanos no pertenece al clúster.
- Un sitio está en el exterior si ninguno de sus vecinos más cercanos pertenece al clúster.

Se parte de un clúster individual y se va extendiendo una frontera provisional en cada paso hasta alcanzar el tamaño máximo del clúster, en ocasiones transformando a los sitios de la frontera en sitios en el interior.

Para evitar que un clúster se extienda indebidamente por el cálculo doble de una probabilidad de vínculo, solo se calculará una vez un vínculo entre dos espines.

El proceso es el siguiente:

1. Se selecciona un sitio aleatorio  $x$  y se comprueban los vínculos directos.
2. Todos los espines enlazados en la comprobación se etiquetan con un identificador  $\alpha_i$  correspondiente a un clúster.
3. Se identifican los sitios localizados en la frontera y se comprueban sus vínculos directos.
  - a) Si hay vínculos directos adicionales, se regresa al paso 2.
  - b) Si no hay vínculos directos adicionales, se termina la comprobación.

Este método es especialmente útil en la formación de un clúster, ya que evita el cálculo de una gran cantidad de vínculos.

La aplicación de estos métodos a los algoritmos multi-clúster y single-cluster, permiten ahorrar una gran cantidad de cálculos, por lo que el poder de cómputo puede usarse en aumentar la estadística de los experimentos y reducir los tiempos de cálculo, sin duda es un beneficio que vale la pena a cambio de un poco de programación extra.

# Bibliografía

- [1] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller y E. Teller, “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines,” *J. Chem. Phys.*, 21, 1087-1092, 1953.
- [2] A. Wipf, “Statistical approach to quantum field theory: an introduction,” *Springer*, 7-11, 2013.
- [3] R. P. Feynman, “Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics,” *Rev. Mod. Phys.*, 20, 367-387, 1948.
- [4] M. Creutz y B. Freedman, “A statistical approach to quantum mechanics,” *Ann. Phys.*, 132, 427-462, 1981.
- [5] W. Bietenholz, U. Gerber, M. Pepe y U.-J. Wiese, “Topological lattice actions,” *J. High Energy Phys.*, 2010, 20, 2010.
- [6] B. Berg y M. Lüscher, “Definition and statistical distributions of a topological number in the lattice  $O(3)$   $\sigma$ -model,” *Nucl. Phys.*, 190, 412-424, 1981.
- [7] T. I., “Spherical Trigonometry,” *Macmillan And Company*, 20-44, 1925.
- [8] W. Bietenholz, P. De Forcrand, U. Gerber, H. Mejía-Díaz e I. O. Sandoval, “Topological susceptibility of the 2D  $O(3)$  model under gradient flow,” *Phys. Rev.*, 98, 114501, 2018.
- [9] G. Giachetti, N. Defenu, S. Ruffo y A. Trombettoni, “Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Phase Transitions with Long-Range Couplings,” *Phys. Rev. Lett.*, 127, 156801, 2021.
- [10] H. Hinrichsen, “Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states,” *Advances in Physics*, 49, 815-958, 2000.
- [11] J. M. Yeomans, “Statistical mechanics of phase transitions,” *Clarendon Press ; Oxford University Press*, 16-19, 1992.
- [12] S.-Z. Lin et al., “Topological defects as relics of emergent continuous symmetry and Higgs condensation of disorder in ferroelectrics,” *Nature Physics*, 10, 970-977, 2014.
- [13] R. Ciuca y O. F. Hernández, “Information theoretic bounds on cosmic string detection in CMB maps with noise,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 492, 1329-1334, 2020.
- [14] T. W. B. Kibble, “Topology of cosmic domains and strings,” *J. Phys. A*, 9, 1387-1398, 1976.
- [15] T. Kibble, “Phase-transition dynamics in the lab and the universe,” *Phys. Today*, 60, 47-52, 2007.
- [16] T. Kibble, “Some implications of a cosmological phase transition,” *Phys. Rep.*, 67, 183-199, 1980.

- [17] W. H. Zurek, “Cosmological experiments in superfluid helium?” *Nature*, 317, 505-508, 1985.
- [18] J. M. Kosterlitz y D. J. Thouless, “Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids. (Application of dislocation theory),” *J. Phys. Condens. Matter*, 5, 124-126, 1972.
- [19] J. M. Kosterlitz, “Nobel Lecture: Topological defects and phase transitions,” *Rev. Mod. Phys.*, 89, 4, 2017.
- [20] F. Niedermayer, “General Cluster Updating Method for Monte Carlo Simulations,” *Phys. Rev. Lett.*, 61, 2026-2029, 1988.
- [21] K. B. Athreya, H. Doss y J. Sethuraman, “On the convergence of the Markov chain simulation method,” *Ann. Stat.*, 24, 69-100, 1996.
- [22] R. J. Glauber, “Time-Dependent Statistics of the Ising Model,” *J. Math. Phys.*, 4, 294-307, 1963.
- [23] K. Binder y D. W. Heermann, “Monte Carlo Simulation in Statistical Physics,” *Springer Berlin Heidelberg*, 1988.
- [24] R. H. Swendsen y J.-S. Wang, “Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations,” *Phys. Rev. Lett.*, 58, 86-88, 1987.
- [25] U. Wolff, “Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems,” *Physical Review Letters*, 62, 361-364, 1989.
- [26] H.-B. Zeng, C.-Y. Xia y A. Del Campo, “Universal Breakdown of Kibble-Zurek Scaling in Fast Quenches across a Phase Transition,” *Phys. Rev. Lett.*, 130, 060402, 2023.
- [27] J. Hoshen y R. Kopelman, “Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm,” *Physical Review B*, 14, 3438-3445, 1976.