



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

EL PAPEL DE LA VORTICIDAD EN LA
TRANSICIÓN DE FASE DE
BEREZINSKIÏ-KOSTERLITZ-THOULESS

T E S I S

PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

Brandon Saúl Gómez Bravo

TUTOR:

Dr. Wolfgang Peter Bietenholz



Ciudad Universitaria, CD.MX, 2021



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

*A mis padres y a mi pequeño hermano.
Gracias por todo.*

Agradecimientos

En primer lugar quisiera agradecer a las personas más importantes en mi vida: mis padres y mi hermano. Desearía poder expresar de un modo más vívido lo afortunado que me siento de tenerlos a mi lado. Gracias por todo el amor incondicional, por el esfuerzo sobrehumano que han hecho para salir adelante y por las miles de cosas que han hecho para apoyarme, gracias.

Agradezco al Dr. Wolfgang Bietenholz por todo el apoyo que me brindó para el desarrollo de este trabajo. Gracias por todas las reuniones, por las becas brindadas, y por todos los comentarios y sugerencias para la corrección de este trabajo. También me gustaría agradecer a Bryan Juarez por las reuniones, comentarios y el apoyo mutuo para impulsar el desarrollo de este trabajo.

A mis amigos por todas las historias que hemos compartido, desde los momentos más absurdos hasta los más significativos. Gracias por toda la alegría que me han brindado, la cual siempre me ha ayudado a seguir adelante.

Resumen

En este trabajo se presentan resultados numéricos del modelo XY bidimensional con el fin de analizar la transición de fase de Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless (BKT). Existe especial interés en la transición de fase BKT porque la longitud de correlación tiende a infinito, sin embargo, no presenta ningún rompimiento de simetría, como es demostrado por el teorema de Mermin-Wagner.

El algoritmo usado para la actualización de las configuraciones es el *algoritmo de Wolff de multi-cluster*. La formación de clusters para la actualización del sistema es de vital importancia porque sirve para introducir la nueva idea de los *semi-vórtices*. Explicamos la forma de identificar los semi-vórtices, de manera que le podemos asociar una *semi-vorticidad* a cada cluster. Esperamos que la semi-vorticidad nos dé una nueva perspectiva de la dinámica del algoritmo y además que sea un indicador de la transición BKT.

Se presentan los resultados numéricos del estudio de la vorticidad, la semi-vorticidad, el análisis y la interpretación de los datos obtenidos. Por último se muestran las conclusiones hechas y la propuesta de los posibles caminos a seguir para explorar la idea de semi-vorticidad.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Transiciones de fase	1
1.1.1. Parámetro de orden	3
1.2. Variables termodinámicas	6
1.3. Modelos de espines clásicos	7
1.3.1. Modelo XY bidimensional	8
1.4. Teorema de Mermin-Wagner	9
2. Simulaciones Numéricas	15
2.1. Simulaciones de Monte Carlo	15
2.2. Algoritmo de multi-cluster	18
2.2.1. Obtención de datos	22
3. Transición de fase Berezinskii-Kosterlitz-Thouless	24
3.1. Historia	24
3.2. Vórtices y anti-vórtices	25
3.2.1. Energía y entropía	27
3.2.2. Interacción de vórtices y anti-vórtices	29
3.3. Modulo de helicidad	33
3.4. Semi-vórtices	38
3.4.1. Pares ligados y semi-vórtices verdaderos	42
3.4.2. Vorticidad de un cluster	43
4. Resultados	45
4.1. Variables macroscópicas	47
4.2. Configuraciones típicas	49
4.3. Vórtices y semi-vórtices	54
4.4. Vorticidad promedio por cluster	58
5. Conclusiones	64

A. Cadenas de Markov	66
B. Algoritmos	69
B.1. Algoritmo Hoshen-Kopelman	69
B.2. Bondad de ajuste	72
B.3. Método jackknife	73
C. Plaqueta asociada a dos clusters	74
B.1. Dos clusters	75
B.2. Tres clusters	76
B.3. Cuatro clusters	78
Bibliografía	82

Introducción

En este capítulo discutimos los conceptos fundamentales que conlleva al estudio principal de este trabajo, el cual es la transición de fase de Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless (BKT).

Primero se introduce el concepto de transición de fase y el papel que juega el *parámetro de orden*, especialmente en sistemas ferromagnéticos. Posteriormente, se presenta el modelo XY bidimensional y el *teorema de Mermin-Wagner*, señalando por qué este modelo no presenta una transición de fase asociada a un rompimiento de simetría.

1.1. Transiciones de fase

Una fase es un estado de la materia donde la composición química y las propiedades físicas de la sustancia, tales como la densidad o la conductividad, son uniformes a escala macroscópica. La muestra debe ser suficientemente grande para poder ignorar el efecto de las fluctuaciones.

Un fenómeno de interés es el proceso por el cual pasa el sistema, para ir de una fase a otra denominado *transición de fase*. Existe una gran variedad de transiciones en sistemas distintos, por ejemplo: la transición líquido-gas del agua a vapor, la condensación de Bose-Einstein, entre otros. En un esquema actual¹ pueden ser clasificados como: *transición de fase de primer orden*² y *transición de fase continua*.

¹Un esquema encontrado comúnmente en la literatura es el *Esquema de Ehrenfest*, en el cual el orden de la transición está determinado por la derivada de la energía libre de menor orden que presente una discontinuidad.

²También es conocida como una transición discontinua.

1. INTRODUCCIÓN

Las transiciones de fase de primer orden son las que presentan una discontinuidad en la primera derivada de la *energía libre*. Un ejemplo típico es del agua al pasar de su fase sólida a su fase líquida, donde ocurre un cambio abrupto en el volumen. Las transiciones de fase continuas son aquellas donde no hay calor latente involucrado, es decir, el cambio de la entropía es continuo [1].

En la Fig. 1.1 se presenta el comportamiento cualitativo de diferentes cantidades físicas: entropía S , energía E y el calor específico C_V . La entropía S se muestra en dos situaciones diferentes: transición de fase de primer orden (A) y transición de fase continua (C). En (A), S tiene una discontinuidad en la temperatura de transición T_t , mientras que en (C) sufre un cambio abrupto en el valor de la pendiente en la temperatura crítica T_c . En (B) se muestra la energía en función de la temperatura. Al aumentar la temperatura, E da un “salto” en la temperatura de transición T_t . Las transiciones de fase continuas se caracterizan por mostrar una discontinuidad o divergencia en las derivadas de segundo orden, o mayor, de la energía libre. En (D) se muestra que el calor específico, que es una segunda derivada de la energía libre, presenta una divergencia en T_c .

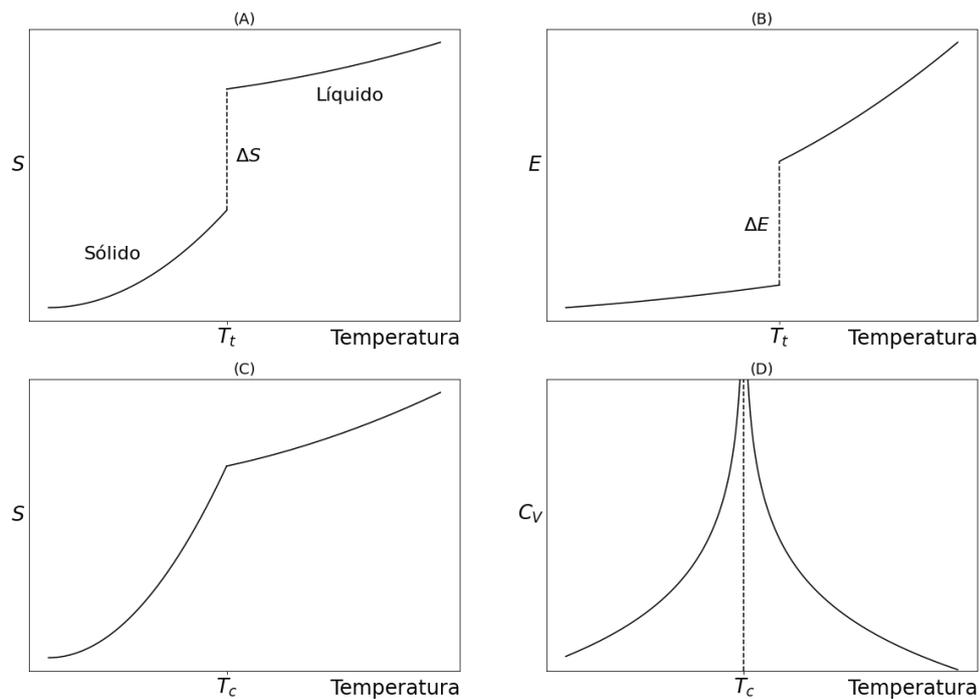


Figura 1.1: Ejemplo del comportamiento de distintas cantidades físicas. Transiciones de fase de primer orden se muestran en (A) y (B), donde se exhibe el comportamiento de la entropía y la energía, respectivamente. En (C) y (D) se muestra el comportamiento de la entropía S y el calor específico C_V cuando se tiene una transición de fase continua.

1.1.1. Parámetro de orden

Para determinar cuando estamos en una fase u otra, existen distintas cantidades físicas características del sistema que aportan dicha información. Unas cantidades de gran importancia, para muchos procesos de transición, son los *parámetros de orden*.

Los parámetros de orden son distintos de cero en una fase y cero en otra fase. Por ejemplo, en la transición de fase gas-liquido³, la densidad de la fase líquida ρ_l es mayor que la densidad de la fase gaseosa ρ_g y el parámetro de orden se puede definir como la diferencia de densidades $\rho_l - \rho_g$ [1].

En sistemas ferromagnético como los que emula el modelo Ising, en dos o más dimensiones, existen dos fases definidas por la temperatura crítica T_c . El modelo Ising bidimensional cuadrangular consiste en una malla o *lattice*⁴ de $L \times L$ sitios. Cada sitio del lattice carga un espín, cuyos valores son discretos y sólo pueden ser $s_i = \pm 1$ ($\uparrow \downarrow$). La función hamiltoniana para este sistema está dada por

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (1.1)$$

donde $[s]$ es la configuración completa de los espines, es decir, la orientación de cada espín en el lattice; el símbolo $\langle ij \rangle$ indica la suma sobre los vecinos inmediatos; \sum_i indica la suma sobre los L^2 espines; $J > 0$ es la constante de acoplamiento y h un campo magnético externo.

El modelo Ising presenta transición de fase para dos o más dimensiones. A pesar de la dificultad para obtener una expresión analítica de la función de partición, en el caso de dos dimensiones existe una solución exacta que fue propuesta por Onsager en 1944 [2]. Para dimensiones mayores a dos no existe una solución analítica conocida, sin embargo, existe una gran variedad de aproximaciones analíticas para determinar las distintas propiedades del sistema, como la temperatura crítica [3–5]. Otra forma de poder estudiar el sistema es mediante simulaciones computacionales, de lo cual se hablará a detalle en el siguiente capítulo.

Para estudiar las propiedades colectivas del sistema es necesario tomar el promedio pesado de todas las configuraciones posibles. Considerando que el sistema se encuentra en equilibrio, las configuraciones siguen la *distribución de probabilidad*

³Esto ocurre, por ejemplo, a presión constante y disminuyendo la temperatura.

⁴En todo el trabajo se ocupará el término lattice.

de Boltzmann. La probabilidad de una configuración $[s]$ está dada por

$$p([s], \beta) = \frac{\exp(-\beta \mathcal{H}[s])}{Z(\beta)}, \quad (1.2)$$

donde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, con T la temperatura del sistema y k_B la constante de Boltzmann [6]. La *función de partición* $Z(\beta)$ se define como

$$Z(\beta) = \sum_{[s]} \exp(-\beta \mathcal{H}[s]), \quad (1.3)$$

la suma es sobre todas las posibles configuraciones del sistema.

El valor esperado térmico de una observable \mathcal{O} se obtiene de la siguiente forma

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{[s]} \mathcal{O}([s]) p([s], \beta). \quad (1.4)$$

De esta manera se puede obtener, por ejemplo, la energía promedio E del sistema

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{[s]} \mathcal{H}([s]) p([s], \beta). \quad (1.5)$$

También se puede definir la entropía S ,

$$S = \frac{E}{T} + k_B \log(Z(\beta)). \quad (1.6)$$

La magnetización de una configuración está dada por

$$\mathcal{M}[s] = \sum_i s_i. \quad (1.7)$$

En presencia de un campo magnético externo $h \neq 0$, la magnetización promedio del sistema está dada por $M = |\langle \mathcal{M} \rangle|$. Si $h = 0$, el sistema presenta una simetría \mathbb{Z}_2 , por lo que es invariante al aplicar la transformación $s_i \rightarrow -s_i$, para todos los sitios i del lattice. En este caso, los espines tienen la misma probabilidad de estar arriba (\uparrow) o abajo (\downarrow), lo que implica $\langle \mathcal{M} \rangle = 0$. En esta situación la cantidad que es de interés es

$$M_{\text{lim}} = \lim_{h \rightarrow 0^+} \langle \mathcal{M}(T, h) \rangle. \quad (1.8)$$

El límite por la derecha $h \rightarrow 0^+$ permite asegurar que la magnetización del sistema tenga un valor positivo.

Reducir el valor de h es muy pesado computacionalmente porque se necesitaría alcanzar el equilibrio térmico para cada valor de h . Una alternativa para la ec. (1.8), que trata de capturar el comportamiento, es

$$M = \langle |\sum_i s_i| \rangle = \langle |\mathcal{M}[s]| \rangle. \quad (1.9)$$

En este caso, M puede ser considerada como el parámetro de orden, el cual nos cuantifica cuantos elementos están “ordenados” de la misma manera. Nótese que en la ec. (1.9) estamos considerando $\langle |\mathcal{M}[s]| \rangle$ y no $\langle \mathcal{M}[s] \rangle$ porque en sistemas finitos $\langle \mathcal{M}[s] \rangle = 0$ para $T > 0$ lo cual lleva a resultados incorrectos. Para evitar este problema tomamos el valor absoluto de la magnetización como se señala en Ref. [7].

En la *fase desordenada o simétrica*, es decir, cuando la temperatura T es mayor que la temperatura crítica ($T > T_c$), los espines apuntan en direcciones aleatorias por lo que, en el límite termodinámico $L \rightarrow \infty$, $M = 0$. Para $T \leq T_c$, M es distinta de cero, rompiendo la simetría del sistema, a lo que se llama: *magnetización espontánea*.

La temperatura crítica puede cambiar de valor o puede dejar de haber transición de fase al variar los parámetros del sistema. Tomando como ejemplo el modelo Ising, en la presencia de un campo magnético externo no hay transición de fase.

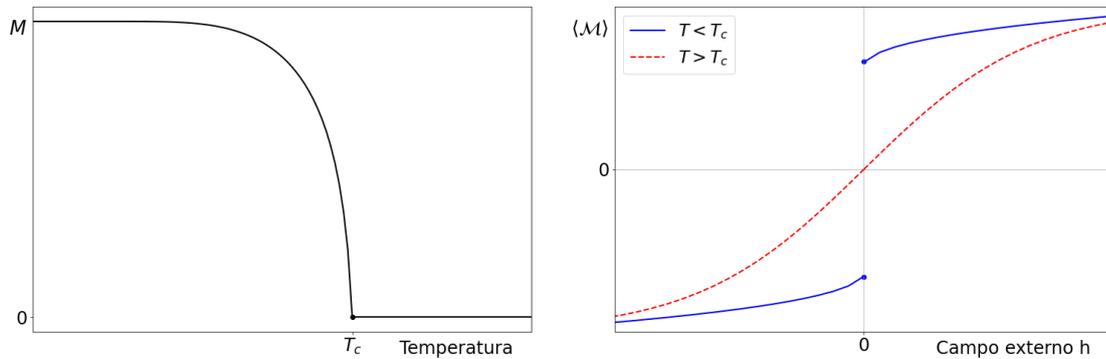


Figura 1.2: En la imagen de la izquierda se muestra, de manera simbólica, M como función de la temperatura, sin campo magnético externo. En la imagen de la derecha se muestra $\langle \mathcal{M} \rangle$ como función del campo magnético externo. Para $T \leq T_c$, $\langle \mathcal{M} \rangle$ es discontinua en $h = 0$, debido a que la presencia de h genera una dirección preferencial para los espines, así al reducir h por la derecha corresponde al caso de la ec. (1.8).

1.2. Variables termodinámicas

A partir de los potenciales termodinámicos de un sistema, es posible calcular sus variables termodinámicas [1]. El potencial libre de Helmholtz tiene la forma

$$F = E - TS, \quad (1.10)$$

donde E es la energía interna del sistema, T la temperatura, S la entropía. Si consideramos la primera ley de la termodinámica

$$dE = T dS + h dM, \quad (1.11)$$

con h el campo magnético externo y M la magnetización del sistema. Entonces, de las ecs. (1.10) y (1.11) se obtiene

$$dF = -S dT - M dh. \quad (1.12)$$

En sistemas ferromagnéticos, unas variables que dan una noción del comportamiento del sistema son: la magnetización M , la susceptibilidad magnética χ , la energía E y el calor específico C_V . En el caso del modelo Ising en dimensión $d \geq 2$ sin campo magnético externo, en el límite termodinámico, C_V y χ divergen en la temperatura crítica. Cabe resaltar que las transiciones de fase sólo ocurren cuando el tamaño del sistema tiende a infinito debido a la limitación de las fluctuaciones en sistemas finitos. En la práctica no es posible estudiar sistemas infinitos, regularmente se estudia al sistema en distintos tamaños y posteriormente se extrapolan los resultados, por lo que es conveniente obtener variables intensivas [7, 8]. A partir de la ec. (1.12) podemos obtener las siguientes expresiones

$$m = -\frac{1}{L^d} \left(\frac{\partial F}{\partial h} \right)_T, \quad (1.13)$$

$$\chi = \frac{1}{L^d} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial h^2} \right)_T, \quad (1.14)$$

$$C_V = -\frac{T}{L^d} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_h. \quad (1.15)$$

1.3. Modelos de espines clásicos

Los modelos de espines clásicos están formulados en un lattice d -dimensional. En cada sitio $i \in \mathbb{Z}^d$, se coloca un *espín clásico*. Un espín clásico es un vector N -dimensional, $\vec{s}_i \in \mathbb{R}^N$, regularmente se trabaja con espines normalizados $|\vec{s}_i| = 1$. La función hamiltoniana del sistema está dada por

$$\mathcal{H}[\vec{s}] = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \vec{h} \cdot \sum_i \vec{s}_i, \quad (1.16)$$

donde $[\vec{s}]$ es la configuración completa de los espines. Como en la ec. (1.1), $\langle ij \rangle$ indica la suma sobre los vecinos inmediatos; J es la constante de acoplamiento, si $J > 0$ el sistema es ferromagnético debido a que la alineación de los espines minimiza la energía⁵; y \vec{h} es el campo magnético externo.

Este tipo de modelos son conocidos como *modelos σ no lineales* o *modelos $O(N)$* . En ausencia de un campo magnético externo, $\vec{h} = \vec{0}$, los modelos presentan una simetría global $O(N)$,⁶ es decir, la energía se mantiene invariante si todos los espines sufren la misma rotación. El valor esperado de la magnetización es cero $\langle \vec{\mathcal{M}} \rangle = \vec{0}$, donde $\vec{\mathcal{M}}$ está definido como una generalización de la ec. (1.7).

Los modelos más conocidos son:

$N = 1$	Modelo Ising	$s_i \in \{-1, 1\}$
$N = 2$	Modelo XY	$\vec{s}_i = (\cos(\theta_i), \sin(\theta_i))$
$N = 3$	Modelo de Heisenberg	$\vec{s}_i = (\sin(\phi_i) \cos(\theta_i), \sin(\phi_i) \sin(\theta_i), \cos(\phi_i))$

Tabla 1.1: Modelos σ no lineales de 1,2 y 3 dimensiones.

A pesar de que el modelo Ising es muy simple, ha tenido mucho éxito en describir la física de los fenómenos críticos. El modelo de Heisenberg es la forma más eficaz de describir materiales ferromagnéticos. El modelo XY empezó a recibir atención debido a que es una representación simple para estudiar la transición de fase de helio superfluido, también conocida como *transición λ* [9, 10]. Cuando el helio-4 se encuentra a una presión menor a 25 atm y su temperatura se reduce

⁵En el caso que $J < 0$ el comportamiento del sistema es anti-ferromagnético.

⁶En el caso del modelo Ising la simetría es \mathbb{Z}_2 , como se mencionó en la sección 1.1.

por debajo de 2.18 K se convierte en un “superfluido” de viscosidad cero. De igual manera, si el helio-3 se encuentra a una presión menor a 34 atm y su temperatura es menor a 0.0025 K, entra en una fase de superfluidez.

S. Manabe, K. Hasselmann y G. Parisi han sido galardonados con el premio Premio Nobel de Física 2021 [11]. Parte del trabajo de Parisi es el estudio de vidrios de espines. Los vidrios de espines consisten de un lattice, similar al modelo Ising, cuya constante de acoplamiento varía aleatoriamente entre los espines. Debido a esto, los espines tienden a estar desordenados y el sistema no presenta orden de largo alcance. A pesar de la falta de orden, Parisi encontró cierto tipo de “orden” en el desorden [12–14]. Su trabajo ha permitido una mejor comprensión de fenómenos aleatorios, además sus ideas han sido abstraídas a muchos otros sistemas complejos.

1.3.1. Modelo XY bidimensional

El modelo XY bidimensional consiste de un lattice de $L_1 \times L_2$ sitios, y en cada sitio hay un espín clásico bidimensional [15]. Por simplicidad, en este trabajo, se elige $L_1 = L_2 = L$ y con condiciones periódicas sobre las fronteras, esto es

$$\begin{aligned}\vec{s}_{(x,L+1)} &= \vec{s}_{(x,1)} & \forall x \in \{1, \dots, L\}, \\ \vec{s}_{(L+1,y)} &= \vec{s}_{(1,y)} & \forall y \in \{1, \dots, L\}.\end{aligned}\tag{1.17}$$

Cada espín $\vec{s}_i \in \mathbb{R}^2$ está normalizado, $|\vec{s}_i| = 1$. Así, se puede parametrizar \vec{s}_i con un ángulo θ_i , $\vec{s}_i = (\cos(\theta_i), \sin(\theta_i))$ como se muestra en la Tab. 1.1. Para cada sitio i del lattice, donde el índice $i = (x, y)$ con $x, y \in \{1, 2, \dots, L\}$.

Para el modelo XY bidimensional en presencia de un campo magnético externo $\vec{h} = (h, 0)$, la ec. (1.16) es reescrita como

$$\mathcal{H}[\vec{s}] = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - h \sum_i \cos(\theta_i).\tag{1.18}$$

En presencia de un campo magnético externo, el sistema pierde la simetría global por lo que $\langle \vec{\mathcal{M}} \rangle \neq \vec{0}$. Por la forma de $\vec{h} = (h, 0)$ que estamos considerando, tendremos que la magnetización del sistema va a estar determinada por $M = |\langle \vec{\mathcal{M}} \rangle| = \left| \sum_i \langle \cos(\theta_i) \rangle \right|$.

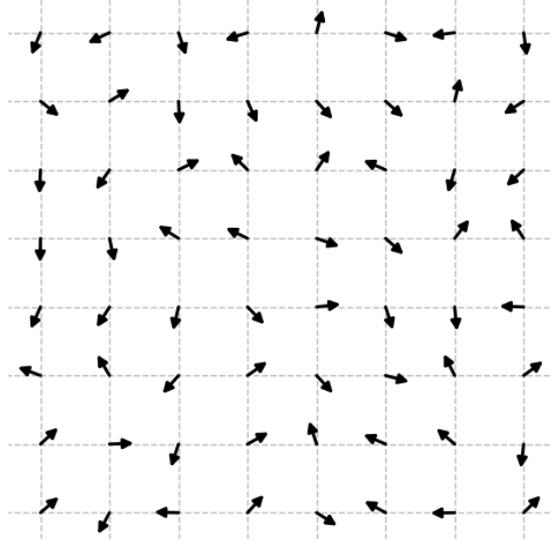


Figura 1.3: Representación esquemática de una configuración del modelo XY bidimensional.

En todo el trabajo se usan unidades de temperatura que corresponden a $k_B = 1$, por ende $\beta = 1/T$ es el inverso de la temperatura. La función de partición del sistema está dada por

$$Z = \int_0^{2\pi} \cdots \int_0^{2\pi} \prod_{k=1}^{L^2} d\theta_k \exp \left[\beta \left(J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) + h \sum_i \cos(\theta_i) \right) \right]. \quad (1.19)$$

Debido a la complejidad de este término, no es posible obtener una expresión completa que sea factible de manejar y logre obtener las distintas propiedades del sistema, de manera analítica. Es por ello que en el siguiente capítulo está dedicado a explicar como obtener dichas propiedades de manera computacional.

1.4. Teorema de Mermin-Wagner

Cuando se refiere a transiciones de fase, un aspecto importante es la dimensión del sistema. Un modelo puede o no presentar transición de fase dependiendo del espacio donde esté formulado. Por ejemplo, el modelo Ising presenta magnetización espontánea para dimensiones mayores a uno [2–5].

Conforme la dimensión espacial d decrece, las fluctuaciones tienden a tener un mayor alcance y aparecen a un bajo costo energético, lo cual implica que la

estabilidad del estado ordenado se vea destruido. La relación entre la dimensión de sistemas y la existencia de transiciones de fase ha sido tema de múltiples trabajos, por ejemplo Refs. [16–18].

En 1966 N. D. Mermin y H. Wagner [16] publicaron su trabajo donde mostraban que no podía existir magnetización espontánea para el modelo isotrópico de Heisenberg unidimensional y bidimensional. Para el caso de espines clásicos, el teorema sostiene que en sistemas con interacciones de corto alcance y con grados de libertad continuos, la magnetización espontánea no tiene lugar a temperaturas finitas en dimensiones $d \leq 2$ [4]. De manera más general, el teorema establece la existencia de una dimensión crítica donde el efecto de las fluctuaciones térmicas no afecta la estabilidad del estado ordenado del sistema [17, 18].

Para mostrar que el modelo XY bidimensional no presenta magnetización espontánea [5], nos apoyaremos en el modelo XY d -dimensional y en la *desigualdad de Cauchy-Schwarz*,

$$|\langle AB^* \rangle|^2 \leq \langle AA^* \rangle \langle BB^* \rangle. \quad (1.20)$$

El problema se resume a elegir las transformadas de Fourier A, B de manera que $\langle AB^* \rangle$ sea proporcional al parámetro de orden y cuyo valor se tienda a cero conforme el campo magnético externo tienda a cero,

$$\begin{aligned} A(\vec{q}) &= \frac{1}{L^d} \sum_{j=1}^{L^d} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_j} \sin(\theta_j), \\ B(\vec{q}) &= \frac{1}{L^d} \sum_{j=1}^{L^d} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_j} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_j}. \end{aligned} \quad (1.21)$$

L^d es el número total de espines en el lattice; θ_j es el ángulo del espín con la etiqueta j ; \vec{r}_j es el vector de la posición del espín \vec{s}_j ; \vec{q} el momento y \mathcal{H} la función hamiltoniana descrita en la ec. (1.18).

Primero veamos que

$$\langle A(\vec{q})B^*(\vec{q}) \rangle = \frac{1}{L^{2d}} \sum_{j=1}^{L^d} \sum_{l=1}^{L^d} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_l)} \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_l} \sin(\theta_j) \right\rangle. \quad (1.22)$$

Usando que

$$e^{-\beta \mathcal{H}} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_l} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial e^{-\beta \mathcal{H}}}{\partial \theta_l} \quad (1.23)$$

e integrando por partes

$$\int \prod_k d\theta_k \frac{\partial e^{-\beta\mathcal{H}}}{\partial\theta_l} \sin(\theta_j) = - \int \prod_k d\theta_k e^{-\beta\mathcal{H}} \frac{\partial \sin(\theta_j)}{\partial\theta_l}, \quad (1.24)$$

podemos expresar el último término de la ec. (1.22) de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta_l} \sin(\theta_j) \right\rangle &= \frac{1}{Z} \int \prod_{k=1}^{L^d} d\theta_k e^{-\beta\mathcal{H}} \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta_l} \sin(\theta_j) \\ &= \frac{1}{\beta Z} \int \prod_{k=1}^{L^d} d\theta_k e^{-\beta\mathcal{H}} \frac{\partial \sin(\theta_j)}{\partial\theta_l} = \frac{1}{\beta} \langle \cos(\theta_l) \rangle \delta_{lj}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Sustituyendo el resultado anterior en la ec. (1.22), obtenemos

$$\langle A(\vec{q})B^*(\vec{q}) \rangle = \frac{1}{\beta L^{2d}} \sum_{l=1}^{L^d} \langle \cos(\theta_l) \rangle. \quad (1.26)$$

Recordando la definición de la densidad de la magnetización:

$m = \frac{1}{L^d} M = \frac{1}{L^d} \left| \sum_i \langle \cos(\theta_i) \rangle \right|$, obtenemos

$$|\langle A(\vec{q})B^*(\vec{q}) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\beta L^{2d}} \sum_{l=1}^{L^d} \langle \cos(\theta_l) \rangle \right|^2 = \frac{m^2}{\beta^2 L^{2d}}. \quad (1.27)$$

Por otro lado,

$$\langle B(\vec{q})B^*(\vec{q}) \rangle = \frac{1}{L^{2d}} \sum_{j=1}^{L^d} \sum_{l=1}^{L^d} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_l)} \left\langle \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta_j} \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta_l} \right\rangle. \quad (1.28)$$

Usando la ec. (1.23) e integrando por partes

$$\int \prod_k d\theta_k \frac{\partial e^{-\beta\mathcal{H}}}{\partial\theta_l} \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta_j} = - \int \prod_k d\theta_k e^{-\beta\mathcal{H}} \frac{\partial^2\mathcal{H}}{\partial\theta_l\partial\theta_j}, \quad (1.29)$$

podemos reescribir el último término de la ec. (1.28) de la siguiente manera

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_j} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_l} \right\rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{k=1}^{L^d} d\theta_k e^{-\beta \mathcal{H}} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_j} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_l} = \frac{1}{\beta Z} \int \prod_{k=1}^{L^d} d\theta_k e^{-\beta \mathcal{H}} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \theta_l \partial \theta_j}. \quad (1.30)$$

Para el término $\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \theta_l \partial \theta_j}$ existen diferentes casos dependiendo de la relación entre los índices l y j .

- Si $l = j$, entonces tenemos que

$$\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \theta_l \partial \theta_j} = \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \theta_l^2} = J \sum_{\nu} \cos(\theta_l - \theta_{l+\nu}) + h \cos(\theta_l), \quad (1.31)$$

donde \sum_{ν} indica la suma es sobre los $2d$ vecinos inmediatos de l .

- Si l y j son índices vecinos

$$\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \theta_l \partial \theta_j} = \frac{\partial}{\partial \theta_l} \left[J \sum_{\nu} \sin(\theta_j - \theta_{j+\nu}) + h \sin(\theta_j) \right] = -J \cos(\theta_j - \theta_l). \quad (1.32)$$

- En otro caso

$$\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \theta_l \partial \theta_j} = 0. \quad (1.33)$$

Sustituyendo los resultados de las ecs. (1.31) a (1.33) en (1.30), se llega a lo siguiente

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_j} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_l} \right\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\beta} \left[J \sum_{\nu} \langle \cos(\theta_l - \theta_{l+\nu}) \rangle + h \langle \cos(\theta_l) \rangle \right] & \text{si } j = l, \\ -\frac{1}{\beta} J \langle \cos(\theta_j - \theta_l) \rangle & \text{si } j \text{ y } l \text{ son vecinos,} \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (1.34)$$

Sustituyendo la ec. (1.34) en (1.28), obtenemos

$$\begin{aligned} \langle B(\vec{q})B^*(\vec{q}) \rangle &= \frac{1}{\beta L^{2d}} \sum_l \left(J \sum_{\nu} \langle \cos(\theta_l - \theta_{l+\nu}) \rangle + h \langle \cos(\theta_l) \rangle \right) \\ &\quad - \frac{J}{\beta L^{2d}} \sum_{\langle l\nu \rangle} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}_l - \vec{r}_\nu)} \langle \cos(\theta_l - \theta_{l+\nu}) \rangle. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Debido a que \sum_{ν} representa la suma sobre los vecinos inmediatos de l , tenemos que $\sum_{\nu} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}_l - \vec{r}_\nu)} = \sum_{i=1}^d 2 \cos(q_i)$, donde q_i representa la i -ésima componente de \vec{q} . A causa de la invarianza de traslación que presenta el lattice con condiciones periódicas en la frontera, el término $\sum_{\nu} \langle \cos(\theta_l - \theta_{l+\nu}) \rangle$ se puede expresar como $2d \langle \cos(\theta_l - \theta_{l+\tilde{\nu}}) \rangle$, donde $l + \tilde{\nu}$ representa algún vecino de l . Dicho lo anterior, podemos reescribir a (1.28) como

$$\langle B(\vec{q})B^*(\vec{q}) \rangle = \frac{J}{\beta L^{2d}} \sum_l \left(2d - 2 \sum_{i=1}^d \cos(q_i) \right) \langle \cos(\theta_l - \theta_{l+\tilde{\nu}}) \rangle + \frac{h}{\beta L^{2d}} \sum_l \langle \cos(\theta_l) \rangle. \quad (1.36)$$

Teniendo en cuenta que $1 - \cos(x) \leq x^2/2$, $\forall x \in \mathbb{R}$, podemos ver que $2d - 2 \sum_i^d \cos(q_i) \leq \sum_i^d q_i^2 = |\vec{q}|^2$. Por lo tanto

$$\langle B(\vec{q})B^*(\vec{q}) \rangle \leq \frac{J}{\beta L^{2d}} \sum_l |\vec{q}|^2 \langle \cos(\theta_l - \theta_{l+\tilde{\nu}}) \rangle + \frac{h}{\beta L^{2d}} \sum_l \langle \cos(\theta_l) \rangle. \quad (1.37)$$

Teniendo en cuenta que $\cos(x) \leq 1$, $\forall x \in \mathbb{R}$, se obtiene que

$$\beta \langle B(\vec{q})B^*(\vec{q}) \rangle \leq \frac{J|\vec{q}|^2 + h}{L^d}. \quad (1.38)$$

A partir de la ec. (1.21) obtenemos que

$$\sum_{\vec{q}} \langle A(\vec{q})A^*(\vec{q}) \rangle = \frac{1}{L^d} \sum_j \langle \sin^2(\theta_j) \rangle \leq 1, \quad (1.39)$$

donde hemos usado $\frac{1}{L^d} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)} = \delta_{jl}$.

Usando la ec. (1.20) tenemos que

$$\sum_{\vec{q}} \frac{|\langle A(\vec{q})B^*(\vec{q}) \rangle|^2}{\langle B(\vec{q})B^*(\vec{q}) \rangle} \leq \sum_{\vec{q}} \langle A(\vec{q})A^*(\vec{q}) \rangle. \quad (1.40)$$

Sustituyendo los resultados de las ecs. (1.27), (1.38) y (1.39) en (1.40) se obtiene la desigualdad

$$\frac{1}{\beta L^d} m^2 \sum_{\vec{q}} \frac{1}{J|\vec{q}|^2 + h} \leq 1. \quad (1.41)$$

En el límite termodinámico, $L^d \rightarrow \infty$, se cumple la transformación

$$\frac{1}{L^d} \sum_{\vec{q}} \rightarrow \int_{\text{BZ}} \frac{d^d \vec{q}}{(2\pi)^d}, \quad (1.42)$$

donde la integral es sobre la zona de Brillouin, es decir, $\int_{\text{BZ}} d^d \vec{q} = \int_{-\pi}^{\pi} \cdots \int_{-\pi}^{\pi} dq_1 \dots dq_d$ [5]. Por lo tanto, la ec. (1.41) se puede reformular como

$$\frac{m^2}{\beta} \int \frac{d^d \vec{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{J|\vec{q}|^2 + h} \leq 1. \quad (1.43)$$

En ausencia de un campo magnético externo, $h \rightarrow 0$, para $d > 2$ la desigualdad está bien definida para m finito. Sin embargo, para $d \leq 2$ la integral diverge si $h \rightarrow 0$, la desigualdad se cumple si $m \rightarrow 0$ conforme $h \rightarrow 0$, es decir, magnetización espontánea no puede ocurrir en la ausencia de un campo externo [4, 5].

La ausencia de magnetización espontánea en el sistema no descarta la posibilidad de algún tipo de transición de fase, lo cual será explicado en el tercer capítulo.

Simulaciones Numéricas

En este capítulo se presenta el motivo de por qué usar simulaciones numéricas para describir el comportamiento de un modelo. Además, discutimos algunos conceptos y resultados que son relevantes para que las simulaciones sean factibles y logren el comportamiento deseado. En particular se mostrará la idea detrás del método de Monte Carlo.

Cuando se trata de problemas de física estadística o al tratar de describir las propiedades de un sistema con una gran cantidad de grados de libertad, en la mayoría de los casos, resulta imposible obtener una solución analítica que capture todas las configuraciones, es por ello que regularmente se recurre a aproximaciones o métodos computacionales. En este capítulo dejamos a un lado las aproximaciones analíticas y nos enfocamos en los métodos computacionales para recabar los valores esperados de las observables. Sin embargo, capturar todas las configuraciones posibles, aún con la gran cantidad de recursos computacionales y el aumento en su velocidad, puede llegar a tomar una cantidad inmensurable de tiempo de cómputo¹ si no se desarrollan algoritmos inteligentes. El siguiente punto tiene la finalidad de explicar el método de Monte Carlo, lo cual hace posible obtener resultados con incertidumbre controlada.

2.1. Simulaciones de Monte Carlo

Al tratar de analizar un sistema, el objetivo es obtener los valores esperados de las observables. En los cálculos de tipo Monte Carlo se miden las propiedades del sistema para un conjunto de configuraciones, por lo que se obtiene un muestreo

¹El tiempo no es viable para situaciones realistas. Por ejemplo, en el modelo Ising para un volumen $V = 48 \times 48$, se necesita sumar sobre $\approx 10^{694}$ configuraciones para obtener la integral funcional completa.

de los valores de las observables del sistema, a partir del cual se pueden obtener estimaciones estadísticas de dicha propiedad.

En los métodos de Monte Carlo se trabaja con un subconjunto de estados $\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n\}$ dados por una distribución de probabilidad p_{μ_i} . La forma de obtener un estimado de una observable \mathcal{O} , dadas n configuraciones $\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n\}$, es

$$\langle \mathcal{O} \rangle \approx \bar{\mathcal{O}}_n = \frac{\sum_{\mu_i=1}^n \mathcal{O}_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{\mu_j=1}^n p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}}, \quad (2.1)$$

donde p_{μ_i} es la probabilidad de seleccionar la configuración μ_i ; \mathcal{O}_{μ_i} es el valor de la observable y E_{μ_i} la energía en la configuración μ_i [8].

Una forma de realizar este tipo de cálculos sería crear configuraciones de manera aleatoria, eligiendo $p_{\mu_i} = \frac{1}{n}$, repetidamente hasta tener la cantidad de muestreos deseados. La ec. (2.1) se reescribe como

$$\bar{\mathcal{O}}_n = \frac{\sum_{\mu_i=1}^n \mathcal{O}_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{\mu_j=1}^n e^{-\beta E_{\mu_j}}}. \quad (2.2)$$

A pesar de que esta sea la forma más directa de medir, para que sea precisa se requiere que la cantidad de configuraciones generadas sea muy grande. En consecuencia, queremos que las probabilidades p_{μ_i} sigan la distribución de Boltzmann, es decir, que la probabilidad de una configuración esté dada por la ec. (1.2), $p_{\mu_i} = Z^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}$, por lo que se obtiene

$$\bar{\mathcal{O}}_n = \frac{1}{n} \sum_{\mu_i=1}^n \mathcal{O}_{\mu_i}. \quad (2.3)$$

Esta idea detrás de los métodos de Monte Carlo es llamada *muestreo por importancia* [7, 8].

El problema se concentra en encontrar la forma de generar las configuraciones con la distribución de Boltzmann. Una manera ingeniosa de generar dichas configuraciones es usando *cadena de Markov*.²

Sea $\mathbf{X} = \{X_n\}_{n \geq 1}$ un proceso estocástico, el cual vamos a suponer numerable.

²Definiciones y propiedades se muestran en el Apéndice A.

Sea \mathcal{S} el conjunto de posibles configuraciones del sistema.

Definición 2.1.1 *Decimos que es una cadena de Markov si satisface*

$$P(X_{n+1} = \mu_{\mathbf{n}+1} \mid X_n = \mu_{\mathbf{n}}, \dots, X_1 = \mu_{\mathbf{1}}) = P(X_{n+1} = \mu_{\mathbf{n}+1} \mid X_n = \mu_{\mathbf{n}}),$$

tal que $n \in \mathbb{N}$ y $\mu_i \in \mathcal{S}$.

Esta propiedad indica que la probabilidad para generar una nueva configuración no depende de la historia de las configuraciones anteriores, sólo de la configuración actual. Dicha propiedad también es conocida como *pérdida de memoria*.

Para asegurar que la dinámica del modelo sea la deseada y siga la distribución de Boltzmann, la cadena de Markov debe cumplir con:

Ergodicidad

La condición de ergodicidad nos asegura que de una configuración es posible llegar a otra en una cantidad finita de pasos. Esto es que todas las configuraciones sean accesibles.

Balance detallado

Es la condición que garantiza que el sistema tiende a convergir a una distribución estacionaria, es decir, la distribución de probabilidad no depende del tiempo. La cual se puede expresar como

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu), \tag{2.4}$$

donde $P(\mu \rightarrow \nu)$ es la probabilidad de ir de la configuración μ a la configuración ν y p_μ la probabilidad de estar en la configuración μ . En nuestro caso, queremos que las probabilidades p_μ tiendan a seguir la distribución de Boltzmann. La condición de balance detallado se interpreta que el sistema, en promedio, pasa de la configuración μ a ν , tantas veces como de ν a μ .

Existen diferentes tipos de algoritmos para la actualización de las configuraciones. Unos de los algoritmos más famosos de métodos de Monte Carlo son: algoritmo Metropolis [19] introducido en 1953; el algoritmo Swendsen-Wang [20] introducido

en 1987 para el modelo de Potts ³; el algoritmo de Wolff [21] publicado en 1989 para modelos $O(n)$ y en particular para el modelo XY [22]; el algoritmo *heat-bath* [7]. Para una explicación detallada de estos algoritmos consúltese [7, 8].

En este trabajo, para la actualización de las configuraciones se usa el *algoritmo de Wolff de multi-cluster* para el modelo XY, el cual, hasta donde hemos podido estudiar, es el algoritmo más eficiente conocido.

2.2. Algoritmo de multi-cluster

Este algoritmo implica la creación de múltiples *clusters* en el sistema de manera que dichos clusters cubran todo el lattice. El objetivo es que la actualización de todos los espines que pertenezcan a un cluster sea de manera colectiva [22].

El primer paso es generar un vector unitario $\vec{r}_W \in \mathbb{R}^2$, de manera aleatoria, para definir una línea de referencia en el sistema. El vector \vec{r}_W se conoce como *vector de Wolff* y la línea perpendicular a \vec{r}_W se conoce como *línea de Wolff* (l_W). Similar al modelo Ising, se puede decir que un espín \vec{s}_i se encuentra en la parte “superior” o “inferior” respecto a l_W .

- Si $\vec{r}_W \cdot \vec{s}_i > 0$, decimos que el espín se encuentra en la parte “superior”.
- Si $\vec{r}_W \cdot \vec{s}_i < 0$, decimos que se encuentra en la parte “inferior”.

En la Fig. 2.1 se muestra la parte superior de color azul y la parte inferior de color rojo, definidas por l_W .

El segundo paso consiste en revisar los *links* del lattice y crear *bonds* entre los espines. Un link es la conexión de un espín con uno de sus vecinos y un bond conecta dos espines indicando que pertenecen al mismo cluster. Se revisa un espín \vec{s}_i y dos de sus vecinos cercanos, es decir, $\vec{s}_{i+\hat{1}}$ y $\vec{s}_{i+\hat{2}}$,⁴ denotados por \vec{s}_j . Para un lattice rectangular bidimensional, se excluyen $\vec{s}_{i-\hat{1}}$ y $\vec{s}_{i-\hat{2}}$ para evitar que un link sea revisado más de una vez. Si \vec{s}_i y \vec{s}_j no se encuentran en el mismo semi-plano, entonces no se crea un bond.

³El modelo de Potts consiste de un lattice y en cada sitio del lattice se coloca un espín bidimensional cuyo valor angular puede tomar q posibles valores de manera uniforme sobre el intervalo $[0, 2\pi)$, es decir, $\theta = 2\pi n/q$ con $n = 0, 1, \dots, q - 1$.

⁴Los vectores unitarios $\hat{1}$ y $\hat{2}$ indican las direcciones de los dos ejes del lattice. Además, las condiciones periódicas en la frontera son consideradas.

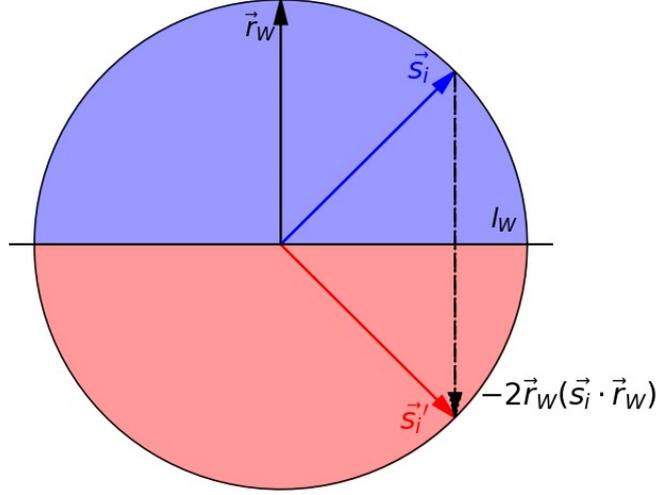


Figura 2.1: El vector y la línea de Wolff denotados por \vec{r}_W y l_W , respectivamente. Al reflejar el vector \vec{s}_i (azul) respecto a l_W se obtiene \vec{s}_i' (rojo), es decir, al actualizar al espín \vec{s}_i se obtiene $\vec{s}_i' = \vec{s}_i - 2\vec{r}_W(\vec{s}_i \cdot \vec{r}_W)$.

Para determinar si \vec{s}_i y \vec{s}_j se encuentran en el mismo semi-plano basta con revisar el producto punto con \vec{r}_W . Si $(\vec{s}_i \cdot \vec{r}_W)$ y $(\vec{s}_j \cdot \vec{r}_W)$ tienen el mismo signo, entonces se encuentran en el mismo semi-plano. Ahora, consideremos el cambio de la energía de acoplamiento entre \vec{s}_i y \vec{s}_j . Sea $I = -\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$ y $I' = -\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j'$, con $\vec{s}_j' = \vec{s}_j - 2\vec{r}_W(\vec{s}_j \cdot \vec{r}_W)$, es decir, \vec{s}_j' es el resultado de reflejar \vec{s}_j respecto a la línea de Wolff. El cambio de la energía está dado por

$$\Delta\mathcal{H} = I' - I = 2(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_i)(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_j). \quad (2.5)$$

Si $\Delta\mathcal{H} > 0$, ambos espines se encuentran en el mismo semi-plano. En este caso, se crea un bond entre los espines con probabilidad P ,

$$P = 1 - \exp[-\beta \Delta\mathcal{H}] = 1 - \exp\left[-2\beta(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_i)(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_j)\right]. \quad (2.6)$$

Se repite el paso anterior hasta que todos los links del lattice hayan sido revisados. El orden no afecta la simulación, sin embargo, en nuestras simulaciones, los espines se revisan recorriendo el lattice en sentido lexicográfico.

El cuarto paso consiste en identificar los clusters del sistema como se muestra en la Fig. 2.2. Un cluster es un conjunto de espines que están conectados mediante los bonds, directamente o indirectamente. Para identificar, de manera eficiente, los

clusters se usa el algoritmo Hoshen-Kopelman [23].⁵ La complejidad del algoritmo Hoshen-Kopelman es $\sim \mathcal{O}(L^2)$, es decir, es lineal respecto al volumen del sistema. Esto es un punto crucial para la eficiencia de las simulaciones, pues permite simular sistemas de gran tamaño en un tiempo de cómputo factible.

El siguiente paso consiste en la actualización de los espines. Cada cluster es elegido para ser actualizado con probabilidad $p = \frac{1}{2}$. En el caso que haya actualización, todos los espines del cluster son modificados de la forma $\vec{s}_i \rightarrow \vec{s}_i - 2\vec{r}_W(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_i)$, es decir, son reflejados respecto a la línea de Wolff como se muestra en la Fig. 2.1. En el caso que no haya actualización, los espines no son modificados.

Una vez que todos los clusters hayan sido revisados, se miden las observables de interés. Después, se genera otro vector unitario \vec{r}_W de manera aleatoria y se hace todo el procedimiento nuevamente.

De esta manera, el algoritmo cumple ergodicidad y balance detallado como se muestra en Refs. [21, 22].

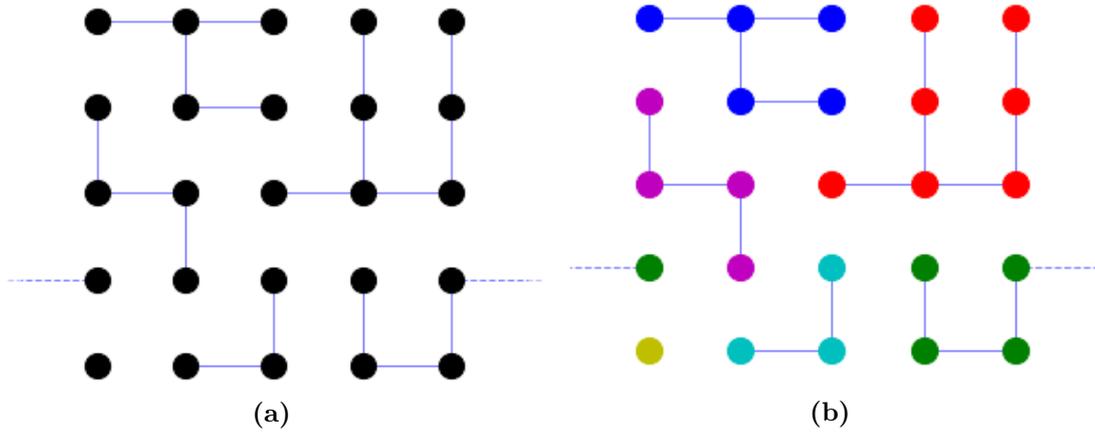


Figura 2.2: Ejemplo de la formación de clusters. Los nodos negros representan los espines; las líneas azules los bonds. Para resaltar que las condiciones periódicas en la frontera también son consideradas se muestra la línea azul punteada que también representa un bond. Los colores hacen referencia a las etiquetas de los clusters encontrados.

⁵El procedimiento de este algoritmo se describe en el Apéndice B.1.

Resumiendo los pasos anteriormente explicados, el procedimiento es el siguiente:

1. Se crea un vector aleatorio $\vec{r}_W \in \mathbb{R}^2$ tal que $|\vec{r}_W| = 1$, y la línea de Wolff l_W perpendicular a \vec{r}_W .
2. Se elige un espín del lattice \vec{s}_i y se revisan los vecinos inmediatos \vec{s}_j , es decir, $\vec{s}_{i+\hat{1}}$ y $\vec{s}_{i+\hat{2}}$.
 - Si $(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_j)$ y $(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_i)$ son de signos diferentes, entonces no se crea el bond.
 - Si $(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_j)$ y $(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_i)$ son de signos iguales, se crea un bond entre los espines con probabilidad P ,

$$P = 1 - \exp \left[- 2\beta(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_i)(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_j) \right].$$

3. Se repite el paso anterior hasta que todos los links del lattice hayan sido revisados.
4. Una vez establecidos todos los bonds del sistema, con el algoritmo Hoshen-Kopelman, se identifican los clusters.
5. Cada cluster es elegido para ser actualizado con probabilidad $p = \frac{1}{2}$. En el caso que haya actualización, todos los espines del cluster son cambiados de la forma $\vec{s}_i \rightarrow \vec{s}_i - 2\vec{r}_W(\vec{r}_W \cdot \vec{s}_i)$. En el caso que no haya actualización, los espines del cluster no son modificados.
6. Medición de las observables de interés en caso de que sea requerido.
7. Repetir el proceso hasta obtener la estadística deseada.

Este algoritmo puede modificar simultáneamente todos los espines de un cluster, de manera que todos los clusters sean independientes entre sí. Además, se puede considerar tener un *estimador mejorado* (“improved estimator”). A partir de una configuración con n clusters se puede capturar un “sub-ensamble” de 2^n configuraciones. En algunas situaciones la observable de interés puede ser calculada de cada una de estas 2^n configuraciones sin tener que generarlas, lo cual incrementa dramáticamente la estadística sin la necesidad de generar nuevas configuraciones explícitamente.

2.2.1. Obtención de datos

Para comenzar con la simulación se genera una configuración inicial $[\vec{s}_0]$. La configuración inicial es llamada *hot-start* si los ángulos θ_i , de todos los espines de la configuración, son seleccionados de manera aleatoria. Por el contrario, se denomina *cold-start* si el valor de θ_i es el mismo para todos los espines.

Como se mencionó anteriormente, la distribución de las configuraciones tiende a convergir a la distribución de Boltzmann conforme se van actualizando las configuraciones. Las configuraciones iniciales *hot-start* y *cold-start* no son generadas con la distribución deseada, por lo que se debe actualizar el sistema un número N_{ter} de veces hasta alcanzar el “equilibrio”. Cabe resaltar que el valor de N_{ter} se determina de manera empírica y además depende de diversos factores, como la temperatura o de la observable de interés. Este proceso es conocido como la *termalización* del sistema. La analogía física es colocar al sistema en un “baño térmico”. Una vez alcanzado el equilibrio se comienza a extraer los datos del sistema (véase *Fig. 2.3*). Cabe resaltar que no siempre se puede asegurar se llegue al equilibrio. En el caso de vidrios de espín el sistema queda atrapado en estados metaestables. Esto se debe a que no existe orden de largo alcance y los efectos de la geometría y/o interacciones entre espines dan lugar a que el sistema quede “frustrado” causando que no se logre un estado ordenado para todos los espines [7].

Entre cada medición hecha se actualiza el sistema N_{ind} veces sin hacer medición alguna para obtener configuraciones que sean estadísticamente independientes. Se sigue el mismo procedimiento hasta tener n mediciones que serán usadas para obtener un valor estimado de las observables de interés.

1. Se genera la configuración inicial $[\vec{s}_0]$, ya sea *hot-start* o *cold-start*.
2. N_{ter} actualizaciones son realizadas hasta alcanzar el equilibrio.
3. Se mide la observable \mathcal{O} de interés cada N_{ind} actualizaciones.
4. Se repite el paso 3 hasta obtener n mediciones $\{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2, \dots, \mathcal{O}_n\}$.
5. Se obtiene el valor estimado $\bar{\mathcal{O}}_n$ dado por la ec. (2.3) y se calcula el error con el método de jackknife.⁶

⁶La explicación del método jackknife puede consultarse en el Apéndice B.3.

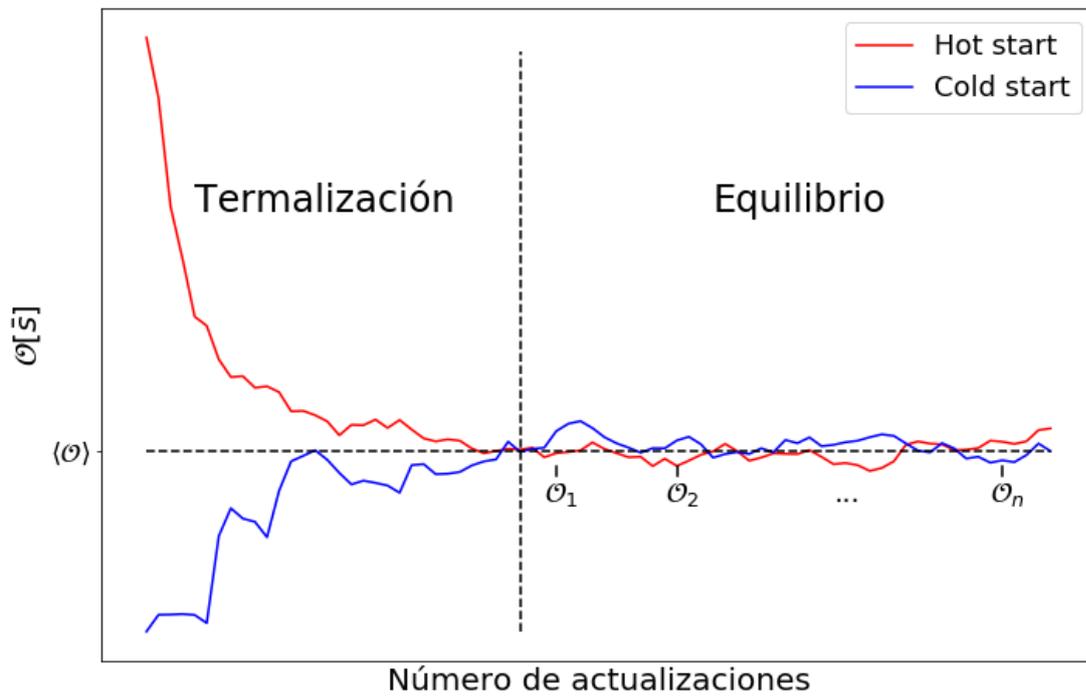


Figura 2.3: Se muestra dos ilustraciones del valor de la observable a partir de dos configuraciones iniciales distintas. El eje vertical representa el valor de una observable \mathcal{O} y el eje horizontal el número de actualizaciones. Una vez que llega al equilibrio, que es independiente de la configuración inicial, medimos n veces, de manera que obtenemos un conjunto $\{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2, \dots, \mathcal{O}_n\}$ de datos para ser colocados en la ec. (2.3).

Transición de fase

Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless

En este capítulo se presenta el tema principal de este trabajo: la transición de fase de Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless (BKT). Se muestra la inconsistencia entre distintos resultados que no podían ser explicados con los conocimientos que se tenían en los años sesenta y que dan lugar a buscar una nueva forma de describir el fenómeno. Se introduce el concepto de *transición de fase topológica y vorticidad*.

Por último, se muestran las nuevas ideas que se abordan en este trabajo para poder tener una forma de caracterizar la transición de fase y tener una mejor comprensión del papel de la vorticidad en la transición BTK.

3.1. Historia

En 1968, H. E. Stanley publicó un artículo que indicaba la posible existencia de una transición de fase para el modelo XY bidimensional [24]. La evidencia de la transición de fase fue principalmente derivada del comportamiento de la expansión en serie de la susceptibilidad magnética en el régimen de altas temperaturas. Otro trabajo similar hecho por M. A. Moore [25], enfocado en el régimen de altas temperaturas, también indicaba la posible existencia de una temperatura crítica $T_c > 0$ y confirmaba los resultados obtenidos por Stanley. Un artículo publicado en 1967 por F. Wegner [15] mostraba que la susceptibilidad divergía en el régimen de bajas temperaturas, es decir, existe una fase “crítica” para todo un rango de temperaturas $T < T_c$. Por lo tanto, los resultados indicaban una fase de baja temperatura con susceptibilidad magnética infinita y una fase de alta temperatura con susceptibilidad finita, lo cual indicaba la posible existencia de una transición

de fase. Por otro lado, el teorema de Mermin-Wagner muestra, en particular, que para el modelo XY bidimensional no existe magnetización espontánea. Además, el trabajo numérico de un sistema bidimensional de discos duros hecho por Alder y Wainwright, presentaba evidencia inconclusa de una transición de fase entre el estado sólido y gaseoso [26]. Ante ambas inconsistencia se debía de buscar una explicación que fuera congruente. La solución fue introducir la idea de *defectos topológicos*.

En el caso del modelo XY los defectos topológicos son mejor conocidos como vórtices. El primero en introducir el concepto de vorticidad fue V. L. Berezinskiĭ en sus trabajos [27, 28]. D. Thouless, M. Kosterlitz y D. Haldane¹ en el 2016 fueron galardonados con el Premio Nobel de física por sus aportaciones a *transiciones de fase topológicas y fases topológicas de la materia* [29–32].

3.2. Vórtices y anti-vórtices

Debido a que el concepto de *largo alcance* no es eficaz para el modelo XY, se introduce la noción de *defectos topológicos*. Un defecto topológico se caracteriza por alguna región central donde el orden del sistema es destruido. Particularmente, tienen un papel importante en las transiciones de fase de sistemas bidimensionales con simetrías continuas [33]. En el caso del modelo XY, se denominan *vórtices* y *anti-vórtices* [27–29].

Una plaqueta es un elemento definido por cuatro vértices $i, i + \hat{1}, i + \hat{2}$ y $i + \hat{1} + \hat{2}$, donde están localizados los espines $\vec{s}_i, \vec{s}_{i+\hat{1}}, \vec{s}_{i+\hat{2}}$ y $\vec{s}_{i+\hat{1}+\hat{2}}$, respectivamente (véase Fig. 3.1). Definimos la diferencia angular entre dos espines \vec{s}_i y \vec{s}_j , parametrizados por los ángulos θ_i y θ_j , respectivamente, como

$$\Delta\theta_{i,j} = (\theta_j - \theta_i) \pmod{2\pi} \in (-\pi, \pi]. \quad (3.1)$$

Así, cada plaqueta tiene asociada una vorticidad dada por

$$q_i = \frac{1}{2\pi} \left(\Delta\theta_{i,i+\hat{1}} + \Delta\theta_{i+\hat{1},i+\hat{1}+\hat{2}} + \Delta\theta_{i+\hat{1}+\hat{2},i+\hat{2}} + \Delta\theta_{i+\hat{2},i} \right) \in \{-1, 0, 1\}. \quad (3.2)$$

El valor $q_i = 0$ indica la ausencia de vorticidad en la plaqueta; para $q_i = 1$ la plaqueta carga un vórtice; para $q_i = -1$ representa un anti-vórtice (véase Fig. 3.2). En estos dos últimos casos decimos que la plaqueta representa un defecto topológico.

¹A pesar de que el trabajo de Haldane ha sido de gran importancia para el entendimiento de estados topológicos, sus investigaciones no están relacionadas al modelo XY.

co. Nótese que existe el caso donde el valor $q_i = 2$, que es cuando la diferencia angular de los cuatro pares de espines es π . Sin embargo, dichas configuraciones no son probables de ocurrir de manera estocástica, por lo que podemos ignorar dicho caso.

En el caso continuo, la ec. 3.2 se puede expresar como

$$q = \frac{1}{2\pi} \oint \nabla\theta(\vec{r}) \cdot d\vec{r}, \quad (3.3)$$

donde la integral es alrededor de un defecto topológico (vórtice o anti-vórtice) y $\theta(\vec{r})$ el campo angular.

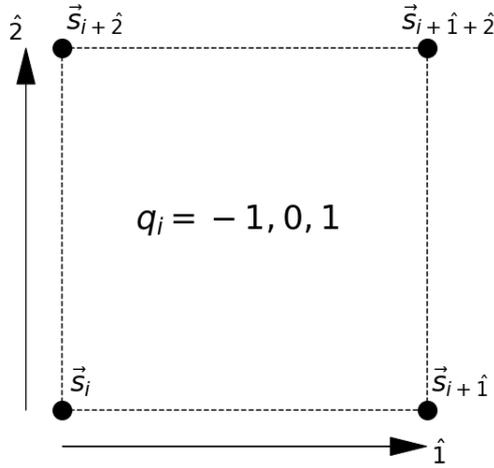


Figura 3.1: Una plaqueta es un cuadrado unitario del lattice, donde están localizados los espines \vec{s}_i , $\vec{s}_{i+\hat{1}}$, $\vec{s}_{i+\hat{2}}$ y $\vec{s}_{i+\hat{1}+\hat{2}}$. Cada plaqueta tiene asociada una vorticidad que puede tomar los valores $\{-1, 0, 1\}$. Considerando condiciones periódicas se tiene que en un lattice de $L \times L$, hay L^2 plaquetas.

El teorema de Stokes relaciona la integral de superficie del rotacional de un campo vectorial con la integral de línea alrededor de la frontera de la superficie de la siguiente forma

$$\iint_S (\nabla \times \mathbf{F} \cdot \hat{n}) dS = \int_{\partial S} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{s}, \quad (3.4)$$

donde \mathbf{F} es el campo vectorial, S representa la superficie, ∂S la frontera y \hat{n} el vector normal a la superficie. En nuestro caso, estamos interesados por el gradiente del campo angular $\nabla\theta(\vec{r})$. Ya que imponemos condiciones periódicas en la frontera, el lattice representa un toroide de manera que el término derecho de la ec. (3.4) es cero, lo cual indica que la contribución de los vórtices es cancelada por la

contribución de los anti-vórtices. Esto implica que la suma de la vorticidad de todas las plaquetas es igual a cero, $\sum_i q_i = 0$. Los vórtices contribuyen con un $+1$, mientras que los anti-vórtices con -1 . Por lo tanto, el número de vórtices es igual al número de anti-vórtices, $n_A = n_{AV}$.

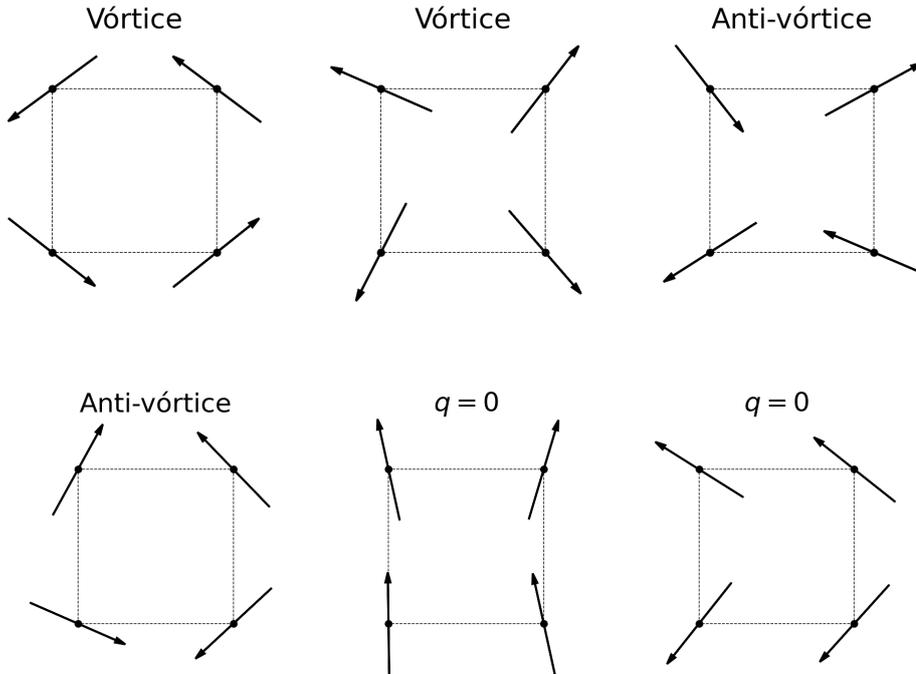


Figura 3.2: Ejemplos de la configuración de los 4 espines de una plaqueta para distintos casos de vorticidad.

3.2.1. Energía y entropía

Para ver los efectos que producen los vórtices (anti-vórtices) en el sistema, vamos a considerar una región donde se encuentre un sólo vórtice. En el caso de estar en el régimen de bajas temperaturas, se puede realizar una expansión del término $\theta_i - \theta_j$, ignorando los términos mayores a segundo orden de la función hamiltoniana, de manera que

$$\mathcal{H}[\vec{s}] = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \approx -J \sum_{\langle ij \rangle} \left(1 - \frac{(\theta_i - \theta_j)^2}{2} \right). \quad (3.5)$$

Así, al considerar el caso continuo, se obtiene

$$\mathcal{H}[\vec{s}] - E_0 \approx \frac{J}{2} \int d^2\vec{r} (\nabla\theta(\vec{r}))^2, \quad (3.6)$$

donde $\theta(\vec{r})$ representa el campo angular y E_0 la energía de una configuración con todos los espines apuntando en la misma dirección.

Si consideramos una región con un vórtice como se muestra en Fig. 3.3 y asumimos que el centro del vórtice se encuentra en $\vec{r} = \vec{0}$, tendremos que

$$|\nabla\theta(\vec{r})| = \frac{1}{r}, \quad r = |\vec{r}|. \quad (3.7)$$

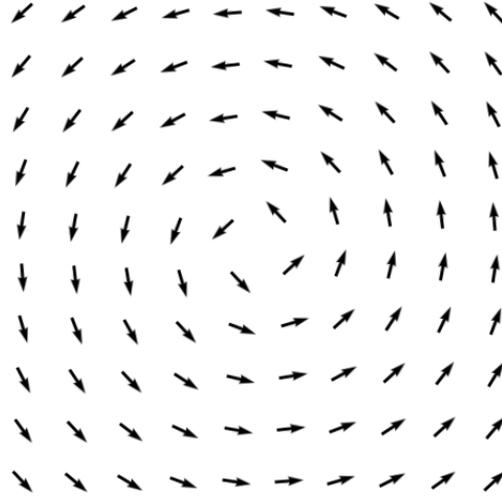


Figura 3.3: Se muestra un sector del sistema completo, donde sólo está la presencia de un vórtice.

Si la región de la Fig. 3.3 la aproximamos a un círculo de radio R , la integral de la ec. (3.6) se simplifica

$$E_V \approx \frac{J}{2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_1^R \frac{1}{r} dr = J\pi \log(R). \quad (3.8)$$

A pesar de la notación continua, R es un valor adimensional que está expresado en términos de unidades del espaciado del lattice. Debido a que el campo angular no está definido en el centro del vórtice, se necesita hacer un “corte” en la integral.

Por ende, al considerar unidades de espaciamento del lattice, la integral comienza en 1. De la ec. (3.8) se tiene que $E_V \propto \log(R)$, es decir, la energía requerida para crear un vórtice aumenta conforme aumentamos el tamaño del sistema. Sin embargo, la región donde se encuentra un vórtice aislado no es válida en el límite $R \rightarrow \infty$ debido a que $E_V \rightarrow \infty$.

La entropía está dada por

$$S = k_B \log(\Omega), \quad (3.9)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann y Ω es el número de posibles microestados. Recordando que hemos elegido unidades de temperatura que corresponden a $k_B = 1$. Para colocar un vórtice hay L^2 posibles posiciones, su entropía es

$$S \sim \log(L^2). \quad (3.10)$$

Además, recordemos que la energía libre F está dada por

$$F = E - T S. \quad (3.11)$$

Con los resultados de las ecs. (3.8) y (3.10), podemos calcular el cambio de la energía libre que se requiere para crear un vórtice

$$\Delta F = (\pi J - 2T) \log(L). \quad (3.12)$$

La ec. (3.12) predice la existencia de una temperatura crítica $T_c = \frac{\pi J}{2}$, para $T > T_c$ la creación del vórtice causa que la energía libre decrezca. Esto sugiere que a altas temperaturas, la densidad de vórtices y anti-vórtices aumenta. A pesar de que $T_c = \frac{\pi J}{2}$ es un valor estimado, da cierta noción del efecto que tiene la presencia de vórtices en el sistema.

El siguiente punto tiene la finalidad de ver el efecto que produce la interacción entre vórtices y anti-vórtices.

3.2.2. Interacción de vórtices y anti-vórtices

Si bien los resultados anteriores dan una noción del efecto que tienen los vórtices en el sistema, no son válidos pues la configuración de un sólo vórtice no existe. Como se mencionó anteriormente, en una configuración existen el mismo número de vórtices que de anti-vórtices, por consiguiente hay que considerar la interacción

entre múltiples vórtices y anti-vórtices [30, 31].

Para estudiar la interacción recordemos el campo angular $\theta(\vec{r})$ y la ec. (3.3).² Si se examina una determinada región tendremos que

$$\oint \nabla\theta(\vec{r}) \cdot d\vec{r} = 2\pi q, \quad (3.13)$$

donde la integral es sobre la frontera de la región y q es la vorticidad de dicha región. En el caso de presentar un vórtice, la integral de contorno de $\nabla\theta(\vec{r})$ debe ser 2π debido θ “da” una vuelta completa. Múltiples vórtices y anti-vórtices pueden encontrarse en dicha región por lo que $q \in \mathbb{Z}$. En el caso $q = 0$, existe la misma cantidad de vórtices que de anti-vórtices; para $q > 0$ indica un mayor número de vórtices que de anti-vórtices y viceversa para $q < 0$. Si la integral es alrededor de un sólo defecto topológico, $q = \pm 1$ según sea el caso.

Consideremos

$$\theta(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}) + \bar{\theta}(\vec{r}), \quad (3.14)$$

donde $\bar{\theta}(\vec{r})$ define la distribución angular del mínimo local energético y $\Psi(\vec{r})$ las desviaciones de dicho mínimo. Tomando en cuenta el principio variacional respecto al mínimo local energético, obtenemos que la derivada funcional de la función hamiltoniana, ec. (3.6), $\delta\mathcal{H}/\delta\bar{\theta}(\vec{r}) = 0$. De este modo, $\bar{\theta}(\vec{r})$ cumple la ecuación de Laplace excepto en los centros de los vórtices,

$$\nabla^2 \bar{\theta}(\vec{r}) = 0. \quad (3.15)$$

Si consideramos una configuración con múltiples vórtices y anti-vórtices, de la ec. (3.13), tendremos que

$$(\nabla \times \nabla\bar{\theta}(\vec{r}))_z = 2\pi \sum_i q_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) = 2\pi\rho(\vec{r}), \quad (3.16)$$

donde se ha definido la densidad local de vórtices

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i q_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad (3.17)$$

con q_i y \vec{r}_i la vorticidad y posición del i -ésimo vórtice o anti-vórtice, respectiva-

²Estamos interesados en estudiar el comportamiento del sistema cerca de la temperatura crítica T_c . Conforme nos acercamos a T_c la longitud de correlación tiende a infinito, donde la aproximación del espaciamiento del lattice al continuo es suficientemente precisa.

mente [30].

Se introduce la función conjugada $\bar{\theta}'(\vec{r})$, definida por $f(z) = \bar{\theta}(\vec{r}) + i\bar{\theta}'(\vec{r})$ con $z = x + iy$, y $\vec{r} = (x, y)$, donde podemos asegurar su existencia debido a que $\bar{\theta}(\vec{r})$ satisface la ecuación de Laplace. Usando las ecuaciones de Cauchy-Riemann, se tiene que

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x} &= \frac{\partial \bar{\theta}'}{\partial y}, \\ \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y} &= -\frac{\partial \bar{\theta}'}{\partial x}.\end{aligned}\tag{3.18}$$

Usando las ecs. (3.16) y (3.18), obtenemos

$$(\nabla \times \nabla \bar{\theta}(\vec{r}))_z = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x} \right) = -\nabla^2 \bar{\theta}'(\vec{r}).\tag{3.19}$$

De las ecs. (3.16) y (3.19), se tiene que

$$\nabla^2 \bar{\theta}'(\vec{r}) = -2\pi\rho(\vec{r}).\tag{3.20}$$

Para un lattice cuadrangular la solución de la ec. (3.20) está dada por

$$\bar{\theta}'(\vec{r}) = -2\pi \int d^2 \vec{R} \rho(\vec{R}) g(\vec{r} - \vec{R}),\tag{3.21}$$

donde $g(\vec{r})$ es la función de Green del laplaciano en dos dimensiones [31],

$$g(\vec{r}) \sim \log(|\vec{r}|).\tag{3.22}$$

Usando la ec. (3.18) tenemos que

$$(\nabla \bar{\theta}(\vec{r}))^2 = (\nabla \bar{\theta}'(\vec{r}))^2.\tag{3.23}$$

Finalmente, de la ec. (3.6) se obtiene

$$\begin{aligned} \mathcal{H}[\vec{s}] - E_0 &= \frac{J}{2} \int d^2\vec{r} (\nabla\Psi)^2 - 2\pi^2 J \int \int d^2\vec{r} d^2\vec{R} \rho(\vec{r})\rho(\vec{R})g(\vec{r} - \vec{R}) \\ &= \frac{J}{2} \int d^2\vec{r} (\nabla\Psi)^2 - \pi J \sum_{i \neq j} q_i q_j \log(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) - 2\pi N \log\left(\frac{e^{-\gamma}}{2\sqrt{2}}\right), \end{aligned} \quad (3.24)$$

donde γ es la constante de Euler y N es el número de vórtices y anti-vórtices en el sistema [31].

El término que cuantifica la interacción entre vórtices y anti-vórtices es la energía

$$E_{\text{int}} = -\pi J \sum_{i \neq j} q_i q_j \log(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \quad (3.25)$$

\vec{r}_i y \vec{r}_j son las posiciones del i -ésimo y j -ésimo defecto topológico, respectivamente. La ec. (3.25) implica una fuerza atractiva de magnitud $\propto 1/|\vec{r}_V - \vec{r}_{AV}|$,

$$|\vec{\mathbf{F}}_{V-AV}| = |-\nabla E_{\text{int}_{A-AV}}| \propto 1/|\vec{r}_V - \vec{r}_{AV}|, \quad (3.26)$$

entre vórtice-anti-vórtice; y una fuerza repulsiva entre vórtice-vórtice. Esencialmente, se tiene un sistema similar a un gas de Coulomb bidimensional de partículas cargadas, razón por la cual el modelo funciona para aproximar el comportamiento de los superfluidos en la transición λ [9, 10, 30, 31]. La analogía entre la dinámica de un gas de Coulomb y el efecto de los vórtices ha sido ampliamente estudiada [34]. Una de las principales diferencias es que el número de vórtices y anti-vórtices no es constante porque se pueden crear o aniquilar por pares, contrario al gas de Coulomb donde el número de cargas sí me mantiene constante.

Se ha visto que el efecto energético que tiene un par vórtice-anti-vórtice depende de manera logarítmica de la distancia entre ellos. De la ec. (3.25) se tiene que la energía de un par vórtice-anti-vórtices ($q_i = 1$ y $q_j = -1$) disminuye conforme la distancia entre ellos disminuye. Un par está *fuertemente ligado* si su impacto se reduce asintóticamente a cero, es decir, a largas distancias no hay efecto de la presencia de vórtices y anti-vórtices. En el caso en que la distancia entre ellos tienda a cero, el par se “aniquila”, es decir la vorticidad es cero para cualquier región en el espacio. Conforme la distancia aumenta entre un par vórtice-anti-vórtice, el efecto de la vorticidad del vórtice no se ve reducida por la presencia del anti-vórtice, ni viceversa. En consecuencia, la vorticidad del vórtice y del anti-vórtice es visible, de manera que se puede considerar que están “libres”.

Como hemos visto, el modelo XY bidimensional no presenta magnetización es-

pontánea para $T > 0$, como lo indica el teorema de Mermin-Wagner. Sin embargo, la presencia de vórtices y anti-vórtices perturba la correlación a largas distancias y da lugar a dos fases con distintas propiedades. En el régimen de altas temperaturas, $T > T_c$, la función de correlación entre espines $\langle \vec{s}_{\vec{r}_1} \cdot \vec{s}_{\vec{r}_2} \rangle$ decae exponencialmente con la distancia, es decir, el sistema no exhibe orden de largo alcance. Sin embargo, en el régimen de bajas temperaturas, $T < T_c$ comúnmente referida como *fase crítica*, la función de correlación decae como una ley de potencias. Tomando $r = |\vec{r}|$, tenemos que

$$\langle \vec{s}_{\vec{r}} \cdot \vec{s}_{\vec{0}} \rangle \propto r^{-\eta}, \quad (3.27)$$

donde el exponente $\eta = T/2\pi J$ no es universal pues depende de T y J [33]. Dicho comportamiento es llamado orden de cuasi-largo alcance (*quasi-long-range order*). Se puede interpretar que de manera local los espines están alineados con sus vecinos, pero el ángulo relativo entre espines cambia lentamente de manera que la correlación tiende a cero conforme aumenta la distancia.

En resumen, a bajas temperaturas se tienen pares fuertemente ligados de una vorticidad total de cero, donde la correlación del sistema presenta una ley de potencias con exponentes críticos no universales. Conforme $T \rightarrow T_c^-$, vórtices y anti-vórtices aislados tienden a aparecer, de manera que se pueden “mover” libremente. Esto perturba la correlación a largas distancias causando la transición BTK.

3.3. Modulo de helicidad

El modulo de helicidad $\Upsilon(T)$ cuantifica la reacción del sistema cuando se le aplica una torsión a la dirección del parámetro de orden. Fue introducido en Ref. [35] y ha sido estudiado extensamente en el modelo XY bidimensional [36–40]. Recibió atención debido a que $\Upsilon(T)$ es proporcional a la densidad de helio en su estado superfluido.

$$\rho_s(T) = \Upsilon(T) \left(\frac{m}{\hbar} \right)^2, \quad (3.28)$$

donde m es la masa de la molécula de helio.

El modelo XY bidimensional no presenta divergencia alguna del calor específico, tampoco magnetización espontánea, lo cual complica determinar la temperatura crítica T_c . Un indicador de T_c es el modulo de helicidad, pues en el limite termodinámico $\Upsilon(T)$ sufre una discontinuidad en $T = T_c$, también conocido como *salto universal* del módulo de helicidad.

Para considerar la torsión en las simulaciones, suponemos un lattice sin condiciones periódicas en una frontera. La torsión significa que rotamos en un ángulo α

a los espines de la última columna del lattice denotados por \vec{s}_ν , con $\nu = (L, y)$ y $y = 1, \dots, L$. Para hacer esto, les aplicamos la matriz de rotación definida como

$$\mathbf{R}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix} \in \text{SO}(2). \quad (3.29)$$

De esta manera, a los espines $\vec{s}_\nu = (s_\nu^{(1)}, s_\nu^{(2)})$ los podemos expresar como

$$\mathbf{R}(\alpha)\vec{s}_\nu = (\cos(\alpha)s_\nu^{(1)} + \sin(\alpha)s_\nu^{(2)}, \cos(\alpha)s_\nu^{(2)} - \sin(\alpha)s_\nu^{(1)}). \quad (3.30)$$

El modulo de helicidad cuantifica la reacción del sistema ante dicha torsión y puede ser expresado de la siguiente forma

$$\Upsilon(T) = \left. \frac{\partial^2 F}{\partial \alpha^2} \right|_{\alpha=0}, \quad (3.31)$$

con F la energía libre del sistema, $F = -T \log(Z)$ y Z la función de partición. Al aplicar la regla de la cadena obtenemos

$$\frac{\partial^2 \log(Z)}{\partial \alpha^2} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \alpha^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial \alpha} \right)^2. \quad (3.32)$$

Por otro lado, al derivar la función de partición respecto a α se obtiene lo siguiente

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z}{\partial \alpha} &= -\beta \int \prod_{k=1}^{L^2} d\theta_k \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \alpha} e^{-\beta \mathcal{H}}, \\ \frac{\partial^2 Z}{\partial \alpha^2} &= \beta^2 \int \prod_{k=1}^{L^2} d\theta_k \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \alpha} \right)^2 e^{-\beta \mathcal{H}} - \beta \int \prod_{k=1}^{L^2} d\theta_k \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \alpha^2} e^{-\beta \mathcal{H}}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Sustituyendo los resultados de las ecs. (3.32) y (3.33) en (3.31), se llega a la siguiente expresión del modulo de helicidad

$$\Upsilon(T) = \left[\left\langle \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \alpha^2} \right\rangle - \frac{1}{T} \left[\left\langle \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \alpha} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \alpha} \right\rangle^2 \right] \right] \Big|_{\alpha=0}. \quad (3.34)$$

En ausencia de campo magnético externo, la función hamiltoniana (1.18) puede ser reescrita como

$$\mathcal{H}[\vec{s}, \alpha] = -J \left[\underbrace{\sum_{\substack{(ij) \\ i,j \neq \mu, \nu}} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j}_{\mathbf{A1}} + \underbrace{\sum_{\mu} \vec{s}_{\mu} \cdot \vec{s}_{\mu+\hat{2}}}_{\mathbf{A2}} + \underbrace{\sum_{\mu} \vec{s}_{\mu} \cdot \mathbf{R}(\alpha) \vec{s}_{\mu+\hat{1}}}_{\mathbf{A3}} + \underbrace{\sum_{\nu} \mathbf{R}(\alpha) \vec{s}_{\nu} \cdot \mathbf{R}(\alpha) \vec{s}_{\nu+\hat{2}}}_{\mathbf{A4}} \right], \quad (3.35)$$

donde \sum_{μ} representa la suma sobre los espines de la penúltima columna y \sum_{ν} la suma sobre los espines de la última columna, es decir, $\mu = (L-1, y)$ y $\nu = (L, y)$ con $y = 1, \dots, L$.

- **A1** cuantifica el acoplamiento entre los espines que no sufrieron la rotación.
- **A2** representa el acoplamiento de los espines de la penúltima columna con los espines vecinos en la dirección $\hat{2}$ del lattice, este término tampoco se ve afectado por la rotación.
- **A3** cuantifica el acoplamiento entre los espines de la penúltima columna y la última columna, en este caso sí hay cambios debido a la rotación.
- **A4** representa el acoplamiento de los espines de la última columna con los espines vecinos en la dirección $\hat{2}$. Este término tampoco se ve afectado debido a que ambos espines sufren la misma rotación.

De este modo, al derivar respecto a α , el único término que no se hace cero es **A3**. A partir de la ec. (3.30) y derivando respecto a α podemos obtener

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\vec{s}_{\mu} \cdot \mathbf{R}(\alpha) \vec{s}_{\mu+\hat{1}})}{\partial \alpha} &= s_{\mu}^{(1)} \left[-\sin(\alpha) s_{\mu+\hat{1}}^{(1)} + \cos(\alpha) s_{\mu+\hat{1}}^{(2)} \right] + s_{\mu}^{(2)} \left[-\cos(\alpha) s_{\mu+\hat{1}}^{(1)} - \sin(\alpha) s_{\mu+\hat{1}}^{(2)} \right], \\ \frac{\partial^2 (\vec{s}_{\mu} \cdot \mathbf{R}(\alpha) \vec{s}_{\mu+\hat{1}})}{\partial \alpha^2} &= s_{\mu}^{(1)} \left[-\cos(\alpha) s_{\mu+\hat{1}}^{(1)} - \sin(\alpha) s_{\mu+\hat{1}}^{(2)} \right] + s_{\mu}^{(2)} \left[\sin(\alpha) s_{\mu+\hat{1}}^{(1)} - \cos(\alpha) s_{\mu+\hat{1}}^{(2)} \right]. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Como resultado, al derivar la función hamiltoniana (3.35) y evaluando en $\alpha = 0$, obtenemos lo siguiente

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} &= -J \sum_{\mu} \left[s_{\mu}^{(1)} s_{\mu+\hat{1}}^{(2)} - s_{\mu}^{(2)} s_{\mu+\hat{1}}^{(1)} \right], \\ \left. \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \alpha^2} \right|_{\alpha=0} &= J \sum_{\mu} \left[s_{\mu}^{(1)} s_{\mu+\hat{1}}^{(1)} + s_{\mu}^{(2)} s_{\mu+\hat{1}}^{(2)} \right]. \end{aligned} \quad (3.37)$$

En ausencia de un campo magnético externo, el término $\langle s_\mu^{(1)} s_{\mu+\hat{1}}^{(2)} - s_\mu^{(2)} s_{\mu+\hat{1}}^{(1)} \rangle = \langle \sin(\theta_{\mu+\hat{1}} - \theta_\mu) \rangle = 0$, debido a que no hay ninguna dirección preferencial en el sistema, por lo tanto el término $\left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \alpha} \right\rangle$ de la ec. (3.34), se desvanece.

Para las simulaciones no es necesario introducir el parámetro α pues basta con sustituir las expresiones de la ec. (3.37) en la ec. (3.34). Por otra parte, podemos realizar el mismo procedimiento para las demás columnas de espines en el lattice y para obtener resultados adimensionales multiplicamos por β , de manera que $\tilde{\Upsilon} = \beta \Upsilon$, donde $\tilde{\Upsilon}$ es la variable adimensional, queda de la siguiente forma

$$\tilde{\Upsilon} = -\frac{\beta^2 J^2}{L^2} \left\langle \left(\sum_i s_i^{(1)} s_{i+\hat{1}}^{(2)} - s_i^{(2)} s_{i+\hat{1}}^{(1)} \right)^2 \right\rangle + \frac{\beta J}{L^2} \left\langle \sum_i \vec{s}_i \cdot \vec{s}_{i+\hat{1}} \right\rangle, \quad (3.38)$$

donde \sum_i indica la suma sobre todos los sitios del lattice.

El valor teórico de la altura del salto universal fue predicho como $\tilde{\Upsilon}_c = \tilde{\Upsilon}(T_c) = 2/\pi$ y para $T > T_c$, $\tilde{\Upsilon}(T) = 0$ [41, 42]. Posteriormente, se mostró que se debía hacer una serie de correcciones [43]. Con la corrección de mayor magnitud, el valor teórico del salto resulto en

$$\tilde{\Upsilon}(T_c)_{\text{teórico}} = \frac{2}{\pi} (1 - 16e^{-4\pi}), \quad (3.39)$$

por lo tanto,

$$\lim_{T \rightarrow T_c^-} \tilde{\Upsilon}(T) = \frac{2}{\pi} (1 - 16e^{-4\pi}) \quad \text{y} \quad \lim_{T \rightarrow T_c^+} \tilde{\Upsilon}(T) = 0. \quad (3.40)$$

Para volumen finito, $\tilde{\Upsilon}$ es una función continua, entre mayor es el volumen del sistema, el descenso es más pronunciado para $T \gtrsim T_c$. En la Fig. 3.5 se muestra $\tilde{\Upsilon}$ para distintos tamaños, conforme aumentamos el tamaño del sistema, la curva tiende a descender más rápidamente. En el límite termodinámico $L \rightarrow \infty$, el valor de $\tilde{\Upsilon}$ cae abruptamente a 0 en $T = T_c$. De esta manera se puede determinar la temperatura crítica. Sin embargo, la convergencia es muy lenta, por lo que es difícil obtener una extrapolación a $L \rightarrow \infty$. Los resultados mostrados en Ref. [39] indican un valor de $\beta_c = 1.1199$ cuando se toma $J = 1$.

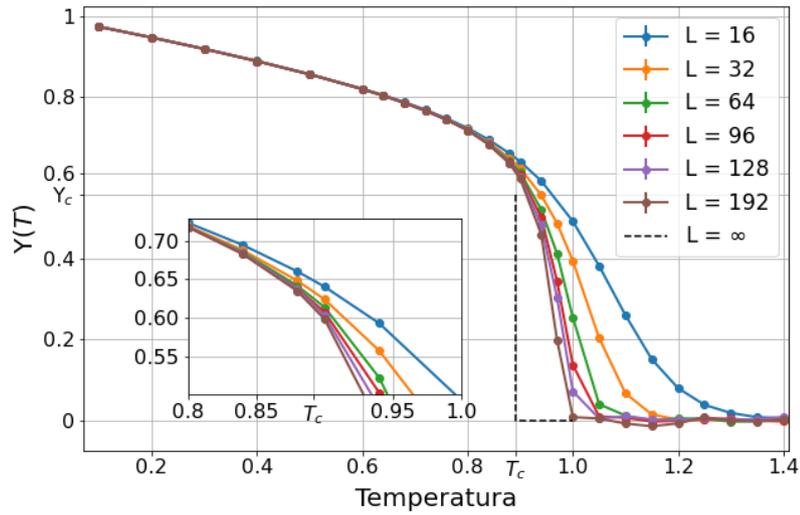


Figura 3.4: Se muestra Υ en función de la temperatura. La caída de las curvas tiende a ser más perceptible entre mayor es el valor de L . En el límite termodinámico, $L \rightarrow \infty$, la pendiente de la curva tiende a menos infinito para $T = T_c$.

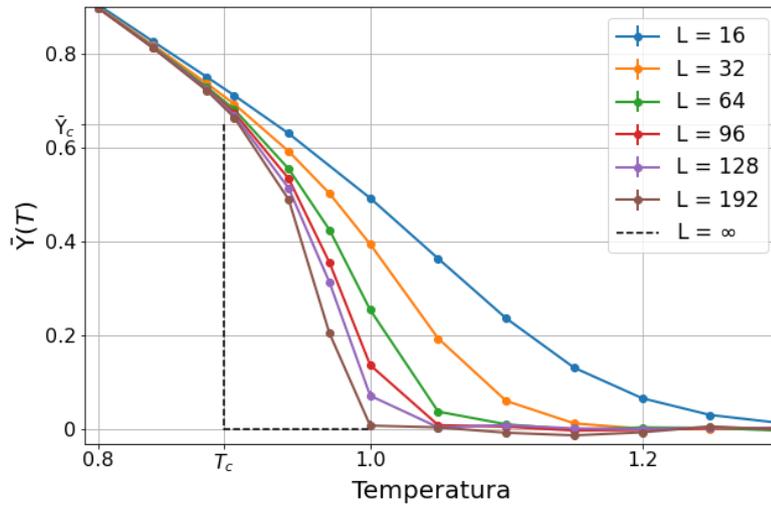


Figura 3.5: Se muestra $\tilde{\Upsilon}$ en función de la temperatura. Por la forma en que está definida $\tilde{\Upsilon}$, su valor tiende a infinito conforme la temperatura tiende a cero. Conforme aumentamos el tamaño del sistema, los datos para $T \gtrsim T_c$ tienden a acercarse a la línea punteada, la cual representa el valor de $\tilde{\Upsilon}$ en el límite termodinámico.

3.4. Semi-vórtices

En esta sección introducimos el concepto de los *semi-vórtices*, la cual es una nueva idea de asociar una *semi-vorticidad* a cada cluster del sistema [44]. Para hacer más claro este esquema es necesario recordar la definición de link y explicar los siguientes conceptos: *frontera de un cluster* y *trayectoria alrededor de un cluster*.

- Un link es la conexión de un espín con uno de sus vecinos.
- La frontera de un cluster consiste de todos los links que conectan un espín, que pertenece al cluster, con un espín vecino que no pertenezca al cluster.
- La trayectoria alrededor del cluster es un circuito que pasa a través de los centros de todos los links, que pertenecen a la frontera del cluster, una sola vez. La orientación es tal que un observador caminando sobre dicha trayectoria, siempre ve al cluster a su lado izquierdo (véase Fig. 3.6).

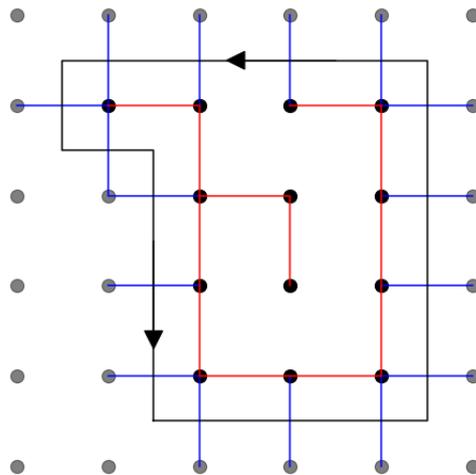


Figura 3.6: Los espines que pertenecen al cluster están señalados con puntos negros, los puntos grises son los que no pertenecen. Las uniones de color azul representan los links y las de color rojo representan los bonds. El circuito alrededor del cluster y la orientación está denotada por las flechas.

Teniendo en cuenta lo anterior, la forma de identificar los semi-vórtices de un cluster es la siguiente:

- Supongamos un círculo unitario, el cual es dividido en dos por la línea de Wolff, l_W , que se utiliza para la creación de los clusters. Existen dos puntos donde la línea de Wolff cruza el círculo, los cuales los vamos a denotar como A y B (véase Fig. 3.7).
- Consideremos dos links consecutivos en un circuito, respecto a la orientación ya establecida. Si nos fijamos en el primer link, denotamos como $\vec{s}_{1\text{in}}$ al espín que es parte del cluster y $\vec{s}_{1\text{out}}$ al espín que no lo es. Consideramos que tienen orientación opuesta, es decir, no se encuentran en el mismo semi-plano determinado por l_W . En caso de tener la misma orientación reflejamos $\vec{s}_{1\text{out}}$ respecto a l_W . Procedemos de la misma manera para los espines del segundo link, $\vec{s}_{2\text{in}}$ y $\vec{s}_{2\text{out}}$.
- Debido a que los espines del primer link tienen orientación opuesta, el “arco de conexión” mínimo entre ambos espines debe pasar por el punto A o B (véase Fig. 3.8). De igual manera identificamos el punto por el que pasa la conexión de los espines del segundo link.
- Si ambos links pasan por A o ambos por B , los ignoramos. Si la conexión del primer link pasa por A y la del segundo por B , entonces esta plaqueta contiene un *mortice*³; si el primero pasa por B y el segundo por A , entonces contiene un *anti-mortice*. Tanto los mortices como los anti-mortices son considerados semi-vortices.
- Procedemos de la misma manera con el segundo y tercer link, de manera consecutiva hasta completar el circuito alrededor del cluster.

Otra forma de identificar los semi-vórtices es a partir de una *configuración de referencia*. Una vez que se tienen todos los clusters identificados, todos son reflejados respecto a l_W , de manera que todos los espines se encuentren en el mismo semi-plano de Wolff, a lo cual lo llamamos una configuración de referencia. Para identificar los semi-vórtices en la frontera de un cluster, reflejamos todos los espines del cluster respecto a l_W . Por lo tanto, todos los espines que no pertenezcan al cluster están en un semi-plano de Wolff y los pertenecientes al cluster están en el otro semi-plano. En esta configuración, revisamos la vorticidad de las plaquetas, usando la ec. (3.2). Si una plaqueta tiene vorticidad $q_i = 1$, la denotamos como un mortice; si tiene vorticidad $q_i = -1$, la denotamos como un anti-mortice.⁴ Cabe resaltar que los mortices y anti-mortices siempre se encuentran en la frontera de

³El nombre es una referencia a los *merones* o también conocidos como *medios instantones*.

⁴La distinción entre mortices y anti-mortices no es importante debido a que depende del semi-plano elegido para la configuración de referencia, es decir, los mortices se convierten en anti-mortices, y viceversa, si todos los espines son reflejados respecto a la línea de Wolff.

los clusters. Dentro de un cluster no puede existir un semi-vórtice debido a que todos los espines pertenecientes a un cluster se encuentran en el mismo semi-plano y por ello la semi-vorticidad asociada a todas las plaquetas dentro del cluster es cero. En la Fig. 3.9 se muestra un ejemplo del procedimiento para los tres primeros clusters encontrados. Se procede de la misma manera con todos los clusters. Al final se puede regresar a la configuración inicial, la cual vamos a llamar *configuración original*.

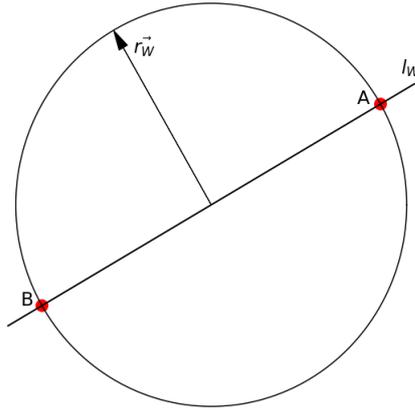


Figura 3.7: La línea de Wolff y el vector de Wolff son representados por l_W y \vec{r}_W , respectivamente. l_W corta al círculo unitario en los puntos A y B .

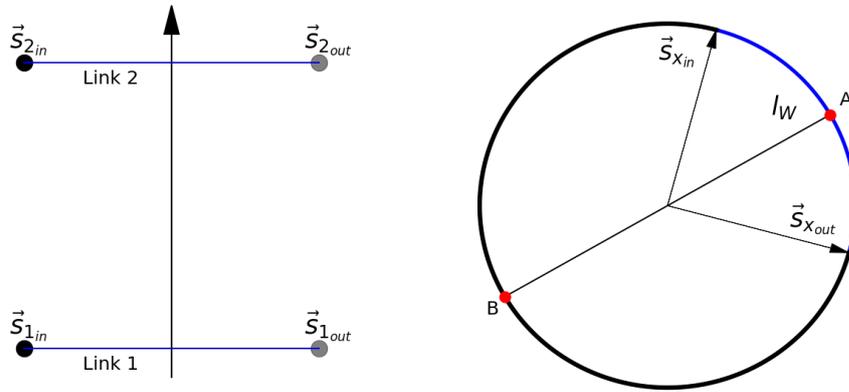


Figura 3.8: En la imagen izquierda se muestra el orden de los links respecto a la trayectoria del cluster. $\vec{s}_{1,in}$ y $\vec{s}_{2,in}$ pertenecen al cluster que estamos considerando, mientras que $\vec{s}_{1,out}$ y $\vec{s}_{2,out}$ pertenecen a otro cluster u otros clusters. En la imagen derecha se muestra un ejemplo, donde el arco mínimo entre $\vec{s}_{x,in}$ y $\vec{s}_{x,out}$ pasa por el punto A .

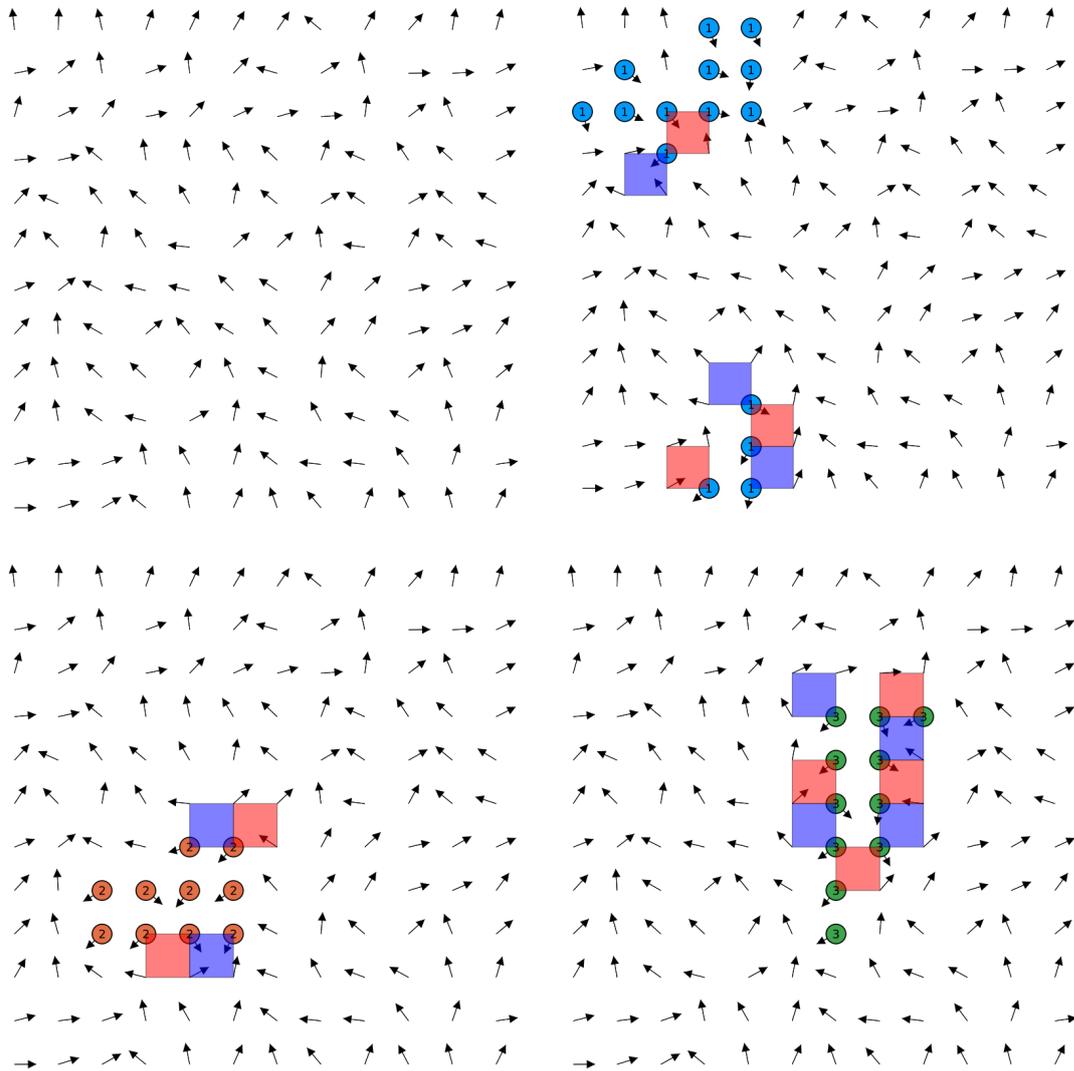


Figura 3.9: En la imagen superior-izquierda se muestra una configuración de referencia, en este caso el vector de Wolff está dado por $\vec{r}_W = (0, 1)$. Por lo tanto, la línea de Wolff está en la dirección $(1, 0)$, es por ello que todos los espines apuntan a la parte superior del semi-plano. En la imagen superior-derecha se muestran los semi-vórtices asociados al primer cluster; las plaquetas de color azul representan los mortices y las de color rojo los anti-mortices. En las imágenes inferiores se muestran los semi-vórtices para el segundo y tercer cluster, respectivamente.

3.4.1. Pares ligados y semi-vórtices verdaderos

Para explicar lo que es un *par ligado*, supongamos que se tiene una configuración con n clusters. Como se mencionó en la sección 2.2, existe un sub-ensamble de 2^n configuraciones que se obtiene al reflejar, respecto la línea de Wolff, cada uno de los n clusters de manera independiente. Consideramos que un par está ligado si la presencia de vorticidad en dos plaquetas coincide para cada una de las 2^n configuraciones, es decir, dos semi-vórtices están ligados si la presencia de uno, garantiza la presencia del otro. En caso de que la presencia de vorticidad en una plaqueta no coincida con la presencia de vorticidad en alguna otra plaqueta, para cada una de las 2^n configuraciones, decimos que es un *semi-vórtice libre*.

La definición de semi-vórtices ligados y semi-vórtices libres no es idéntica a la definición de vórtices ligados mostrada en la sección 3.2.2, pues no estamos considerando interacción alguna que dependa de la distancia.

Para identificar los semi-vórtices ligados y libres consideremos un lattice de $L \times L$ plaquetas⁵, etiquetamos a cada plaqueta con P_i , donde $i \in \{1, 2, \dots, L^2\}$. Ahora, supongamos que se tienen n clusters, de manera que a cada cluster lo etiquetamos con C_j , $j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Para un semi-vórtice, se puede identificar la posición (etiqueta de la plaqueta) y uno de los clusters al que pertenece.

Si se encuentra un semi-vórtice del cluster C_{j_1} en la plaqueta P_{i_1} , se agrega a P_{i_1} la etiqueta j_1 . Se procede de la misma manera con todos los semi-vórtices de todos los clusters. Cada plaqueta contiene dos índices o ninguno, es decir, $P_i = \{j_1, j_2\}$ o $P_i = \emptyset$. Esto sucede en todos los casos, sin excepción alguna.⁶

Si dos plaquetas contienen los mismos índices, $P_{i_1} = \{j_1, j_2\}$ y $P_{i_2} = \{j_1, j_2\}$, decimos que las plaquetas P_{i_1} y P_{i_2} forman un par ligado. Las plaquetas que no tengan otra plaqueta con índices iguales son consideradas libres.

En la Fig. 3.10 se muestra un ejemplo para identificar los pares ligados. El índice inferior derecho de color rojo indica la etiqueta de plaqueta. Los números de color azul indican la etiqueta del cluster. En la plaqueta 1 y 2, fueron encontrados semi-vórtices del cluster 1 y 4. En este caso decimos que la plaqueta 1 y 2 forman un par ligado. De igual manera para la plaqueta 9 y 14. Los índices de las plaquetas 4,6 y 11 no coinciden con alguna otra, por lo que estas plaquetas son consideradas libres. En el resto de las plaquetas no fue encontrado algún semi-vórtice por lo que son ignoradas.

⁵Recordemos que en todo este trabajo hemos usado un lattice cuadrangular, sin embargo, el procedimiento es válido para cualquier lattice con condiciones periódicas sobre las fronteras.

⁶La explicación de esto se muestra en el apéndice C.

1-4 1	1-4 2	3	6-7 4
5	3-6 6	7	8
2-5 9	10	3-7 11	12
13	2-5 14	15	16

Figura 3.10: Ejemplo de la identificación de semi-vórtices ligados, plaquetas libres y plaquetas que no cargan semi-vórtices. Las plaquetas 1 y 2 tienen el mismo par de índices por lo que forman un par ligado, de igual manera para las plaquetas 9 y 14. Las plaquetas 4, 6 y 11 no tiene una “pareja” con los mismos índices por lo que son considerados semi-vórtices libres.

Recordemos que los semi-vórtices surgen al reflejar, respecto a la línea de Wolff, todos los espines pertenecientes a un cluster, partiendo de la configuración de referencia. Definimos a los *semi-vórtices verdaderos* a aquellos semi-vórtices que se encuentren en la posición de un vórtice de la configuración original. Asimismo,, los *semi-vórtices falsos* son aquellos semi-vórtices que están situados en plaquetas que no presentan vorticidad en la configuración original.

3.4.2. Vorticidad de un cluster

Definimos la vorticidad de un cluster \mathcal{C} , denotada por $Q_{\mathcal{C}}$, como

$$Q_{\mathcal{C}} = \frac{1}{2}(\text{mortices} + \text{anti-mortices}), \quad (3.41)$$

donde $Q_{\mathcal{C}}$ es el número total de semi-vórtices asociados al cluster \mathcal{C} , cuyo valor siempre es positivo.

Si se tiene una configuración de n clusters, definimos la *vorticidad promedio*

por cluster V_c como

$$V_c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Q_i, \quad (3.42)$$

donde Q_i es la vorticidad del i -ésimo cluster. Definimos V_{c2} como

$$V_{c2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Q_i^2, \quad (3.43)$$

y la susceptibilidad de la vorticidad promedio denotada por χ_{V_c} ,

$$\chi_{V_c} = \langle V_{c2} \rangle - \langle V_c \rangle^2. \quad (3.44)$$

La ec. (3.44) cuantifica la dispersión del número de semi-vórtices encontrados en la frontera. Estudiar esta cantidad nos da una noción de la dinámica de los semi-vórtices en función de la temperatura y cómo éstos pueden proveer una refinada interpretación de la transición BKT.

La implementación del algoritmo de Wolff en modelos $(N - 1)$ -d $O(N)$ ha sido estudiada en Refs. [44, 45]. A cada cluster se le puede asignar una *carga topológica semi-entera*. Esto permite dar un estimador mejorado que logra obtener valores muy precisos de la *susceptibilidad topológica*.

Resultados

Recordemos que el modelo consiste de un lattice cuadrangular de $L \times L$ espines con condiciones periódicas en las fronteras y la función hamiltoniana está dada por la ec. (1.18). Para todas las simulaciones se fijó $J = 1$ y $h = 0$; por ende, no estamos considerando la presencia de un campo magnético externo. Para asegurar que las configuraciones seguían la distribución de Boltzmann, se generaban 10,000 actualizaciones antes de comenzar a medir, correspondientes a la termalización del sistema. El valor de β se estudió en el rango $0.1 \leq \beta \leq 1.4$ y el tamaño del sistema $16 \leq L \leq 312$.

Un elemento clave de este trabajo es el algoritmo Hoshen-Kopelman, pues permite simular sistemas de gran tamaño en un tiempo de cómputo factible. Conforme mayor es el tamaño del sistema, mayor es el tiempo de cómputo que le toma algoritmo realizar una actualización. Por lo cual, no nos era viable generar el mismo número de muestras para todos los tamaños del sistema. En la Tabla 4.1 se presenta el número de mediciones hechas para distintos valores de L . Entre cada medición se actualiza el sistema 10 veces sin hacer medición alguna con el fin de obtener configuraciones estadísticamente independientes.

Un aspecto a resaltar es que el tiempo de cómputo que se requiere para actualizar al sistema es independiente del tiempo de cómputo que se necesita para realizar las mediciones en una configuración dada. A su vez, el tiempo que se requiere para hacer una medición depende de la observable en cuestión. Por ejemplo, medir la energía requiere menos tiempo de cómputo que medir el número de semi-vórtices.

4. RESULTADOS

L	Mediciones	L	Mediciones
16	300,000	128	30,000
24	300,000	168	15,000
32	200,000	192	10,000
48	200,000	216	10,000
64	100,000	264	5,000
96	50,000	312	3,000

Tabla 4.1: Se muestra el número de mediciones para distintos tamaños del sistema. Entre cada medición se actualiza el sistema 10 veces sin hacer medición alguna para obtener configuraciones estadísticamente independientes.

En la Tabla 4.2 se muestran los valores del modulo de helicidad adimensional $\bar{\Upsilon}$ y la susceptibilidad magnética χ para $\beta = \beta_c$, obtenidos por Hasenbusch [39] y los obtenidos en nuestras simulaciones, donde hemos usado el valor de β_c que es reportado por Hasenbusch. Los resultados son compatibles dentro del rango de los errores obtenidos. Esto da certeza de que el modelo fue implementado de manera correcta.

L	Hasenbusch		Este trabajo	
	$\bar{\Upsilon}$	χ	$\bar{\Upsilon}$	χ
16	0.72536(7)	133.011(9)	0.7255(4)	132.98(3)
32	0.70883(7)	452.114(31)	0.7084(4)	452.0(1)
64	0.69785(7)	1536.58(11)	0.6985(6)	1536.9(7)
128	0.69001(7)	5220.99(36)	0.6913(8)	5520(3)
256	0.68400(7)	17729.9(12)	0.684(2)	17719(16)

Tabla 4.2: Resultados del modulo de helicidad adimensional $\bar{\Upsilon}$ y la susceptibilidad magnética χ para $\beta = \beta_c$, reportados en Ref. [39] y los obtenidos en este trabajo. Los resultados son compatibles dentro del rango de los errores obtenidos.

4.1. Variables macroscópicas

Ahora veremos el comportamiento de las variables macroscópicas mostradas en la sección 1.2, especificadas para el modelo XY bidimensional. Tenemos a la energía E ,

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \left\langle -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \right\rangle. \quad (4.1)$$

En este caso la energía es una variable extensiva por lo que converge asintóticamente a una constante cuando es dividida por el volumen del sistema, como se muestra en la Fig. 4.1.

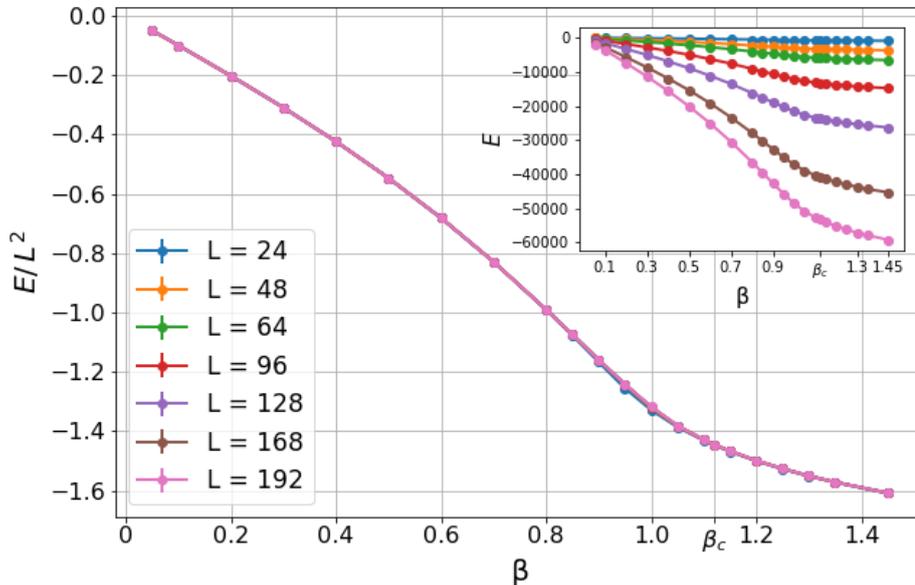


Figura 4.1: La gráfica principal muestra la densidad de energía del sistema para distintos tamaños de L . Conforme β aumenta, los espines tienden más fuertemente a alinearse con sus vecinos, lo que causa un decrecimiento en los valores de la energía. Además, vemos que la densidad de energía no depende del valor de L .

El calor específico C_V , el cual cuantifica las fluctuaciones de la energía,

$$C_V = \frac{\beta^2}{L^2} [\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2], \quad (4.2)$$

se muestra en la Fig. 4.2. Presenta un máximo cerca de $\beta \approx 0.9$, y la altura del máximo es similar para los distintos tamaños del sistema. El modelo no presenta

4. RESULTADOS

una divergencia en el calor específico, a diferencia, por ejemplo, del modelo Ising en $d \geq 2$. Por lo que el calor específico no es una observable que sea susceptible a la transición BKT.

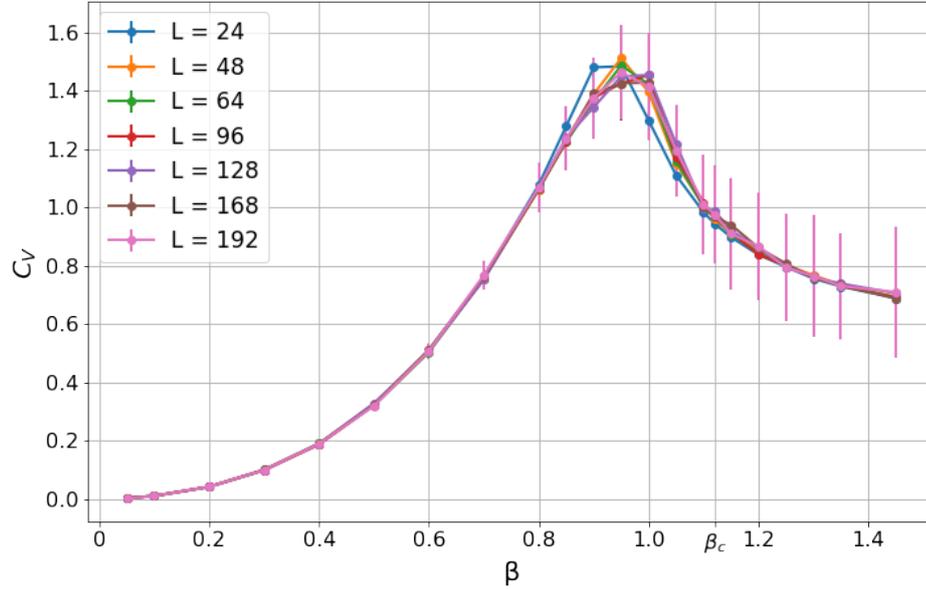


Figura 4.2: Se muestra el calor específico para distintos tamaños de L . No tiene una tendencia a divergir como lo sería en una transición de segundo orden.

La susceptibilidad magnética “verdadera” dada por $\tilde{\chi} = \frac{\beta}{L^2} \left(\langle \vec{\mathcal{M}}^2 \rangle - \langle \vec{\mathcal{M}} \rangle^2 \right)$ no es completamente útil para sistemas finitos por la simetría que presenta el sistema, $\langle \vec{\mathcal{M}} \rangle = \vec{0}$. En las simulaciones lo que es de utilidad es la magnitud de $\vec{\mathcal{M}}$. Para tratar de capturar el comportamiento, χ se expresa como

$$\chi = \frac{\beta}{L^2} \left(\langle \vec{\mathcal{M}}^2 \rangle - \langle |\vec{\mathcal{M}}| \rangle^2 \right). \quad (4.3)$$

En la Fig. 4.3 se muestra la susceptibilidad magnética χ , a pesar de no ser exactamente el comportamiento de la susceptibilidad “verdadera”, en el límite termodinámico produce los mismos resultados. La presencia del máximo se debe a los efectos de tamaño finito. La altura del máximo aumenta conforme aumentamos el tamaño del sistema. Además, el valor de β donde ocurre dicho máximo, tiene a acercarse a β_c . En el límite termodinámico, $\chi \rightarrow \infty$ para $\beta \geq \beta_c$.

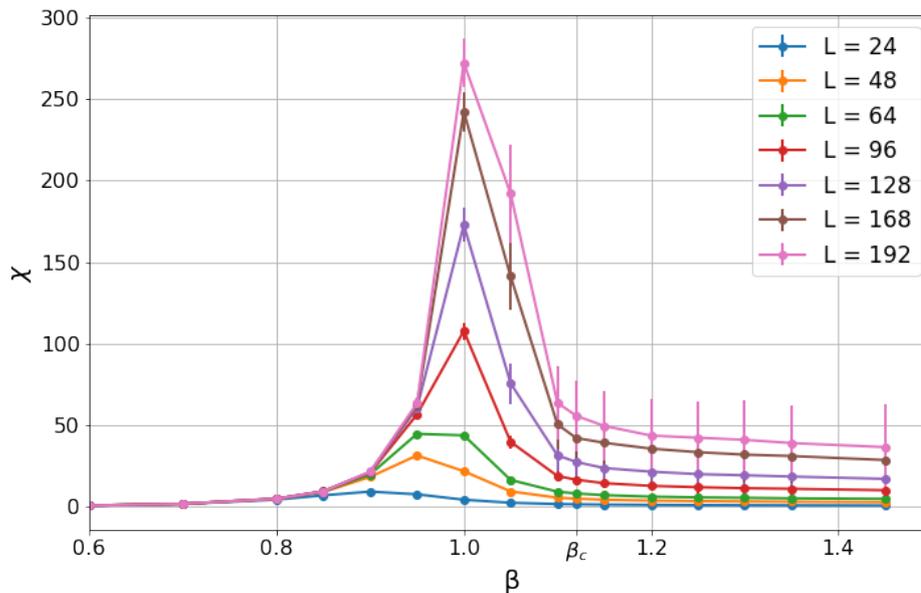


Figura 4.3: Se muestra la susceptibilidad χ en función de β para distintos tamaños de L . La presencia del máximo se debe a los efectos de tamaño finito. La altura del máximo aumenta conforme aumentamos el tamaño del sistema. Además, el valor de β donde ocurre dicho máximo, tiene a acercarse a β_c . En el límite termodinámico, $\chi \rightarrow \infty$ para $\beta \geq \beta_c$.

4.2. Configuraciones típicas

En la Fig. 4.4 se muestra el número promedio de clusters por unidad de volumen. Para valores de β cercanos a cero, el número de clusters tiende a ser grande, pues la probabilidad de formar un bond es baja, como se ve en la ec. (2.6), por lo tanto, los clusters tienden a ser pequeños. Para $\beta = 0$ (temperatura infinita) la probabilidad de formar un bond es cero, por lo que cada cluster es de tamaño uno. Por lo tanto, conforme $\beta \rightarrow 0$, $\langle N_c \rangle / L^2 \rightarrow 1$. Conforme β aumenta, el número de clusters tiende a reducirse. En el límite $\beta \rightarrow \infty$ (temperatura cero), la probabilidad de formar un bond es uno, por lo que todos los espines forman un cluster. Esto hace que $\langle N_c \rangle / L^2 \rightarrow 1/L^2$ conforme $\beta \rightarrow \infty$.

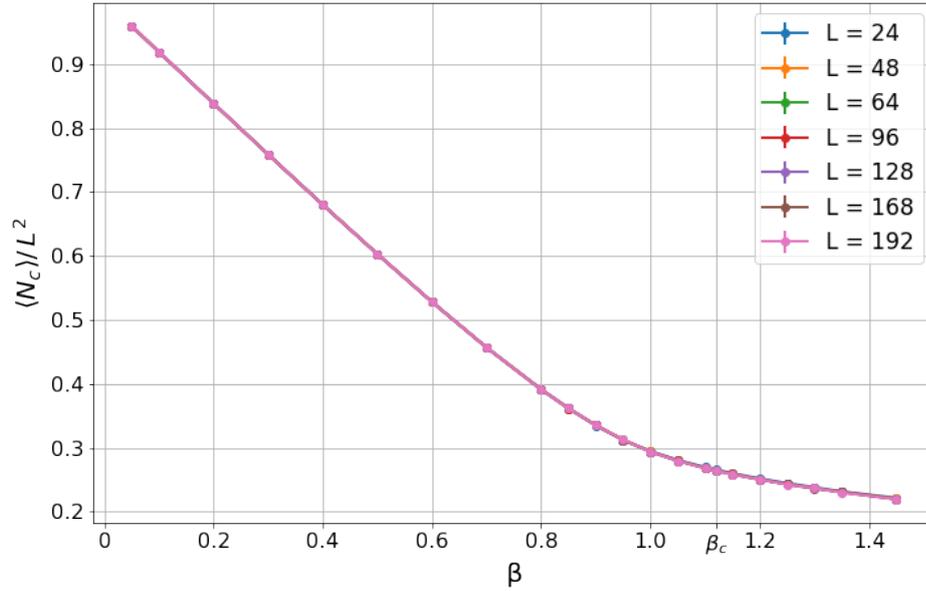


Figura 4.4: Se muestra el número promedio de clusters por unidad de volumen en función del inverso de la temperatura.

A continuación se muestran tres configuraciones de espines y los clusters identificados, las cuales ayudarán a describir algunos de los resultados que se explican a lo largo de esta sección. Las plaquetas que cargan un vórtice están de color azul, mientras que las plaquetas que cargan un anti-vórtice están de color rojo. El número en cada espín hace referencia a la etiqueta del cluster a la que pertenece. A pesar de que en las imágenes se muestran los vórtices y anti-vórtices, estos sirven para dar una noción del comportamiento de los mortices y anti-mortices.

En la Fig. 4.5 se muestra una configuración típica de espines para un lattice de 12×12 , con $\beta = 0.1$. Hay 136 clusters, lo cual es un número grande si consideramos que en el lattice sólo hay 144 espines. La mayoría de los clusters son de tamaño uno. En estos casos, cada espín está rodeado por su “propia frontera”. En este régimen es probable hallar múltiples vórtices y anti-vórtices alrededor de un espín, por lo tanto, hay un mayor número de vórtices y anti-vórtices en la configuración completa.

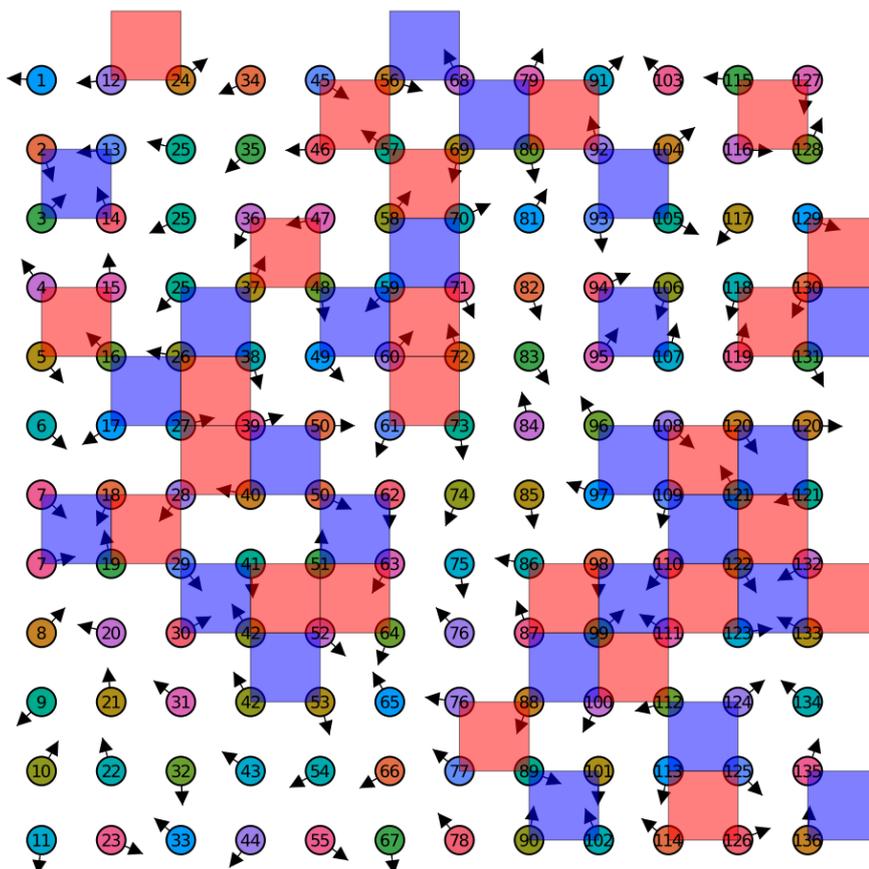


Figura 4.5: Se muestra una configuración típica de espines para un lattice de 12×12 , con $\beta = 0.1$. En esta configuración se formaron 136 clusters, 24 vórtices (azul) y 24 anti-vórtices (rojo).

Conforme β aumenta, la frecuencia de clusters y de vórtices y anti-vórtices empieza a disminuir. En la Fig. 4.6 se muestra una configuración típica de espines para un lattice de 12×12 , con $\beta = 0.7$. En este régimen, los clusters empiezan a aumentar de tamaño (comparado con $\beta = 0.1$ mostrado en la Fig. 4.5) pero no son lo suficientemente grandes como para abarcar la mayor parte del lattice.

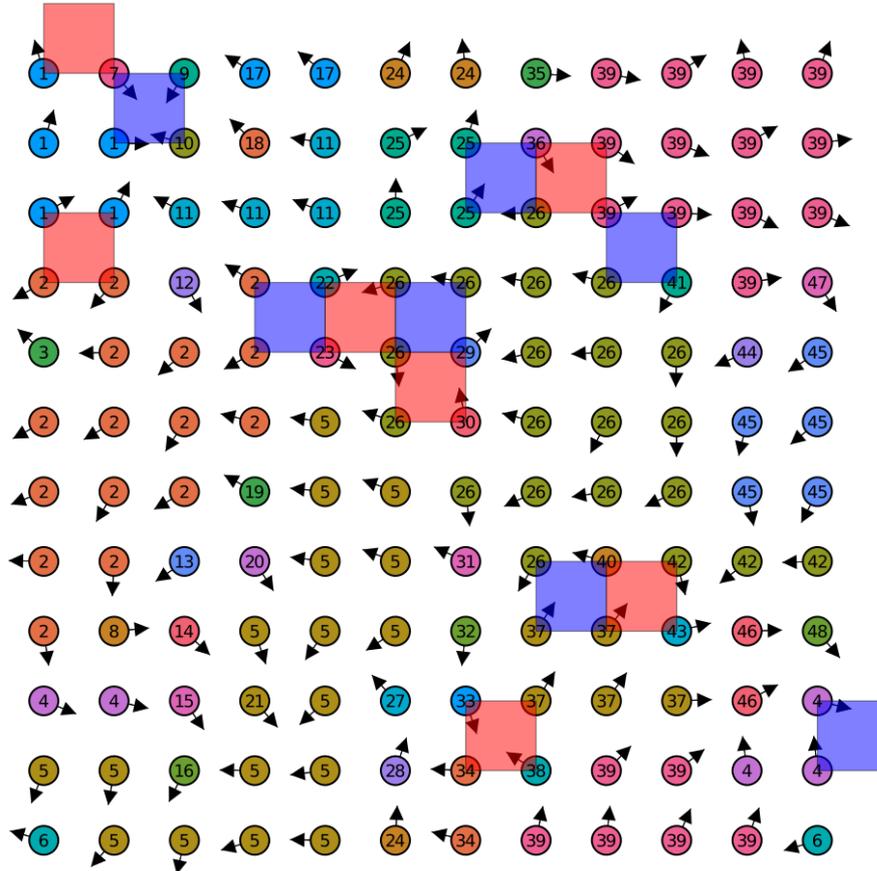


Figura 4.6: Se muestra una configuración típica de espines para un lattice de 12×12 , con $\beta = 0.7$. En esta configuración se formaron 48 clusters, 7 vórtices (azul) y 7 anti-vórtices (rojo).

En el régimen de bajas temperaturas, la aparición de vórtices y anti-vórtices es poco frecuente. En la Fig. 4.7 se muestra una configuración típica de espines para un lattice de 12×12 , con $\beta = 1.4$. En este régimen, la probabilidad de crear un bond entre dos espines es cercana a uno, de manera que la mayoría de los espines pertenecen a un sólo cluster. A pesar de que el tamaño de un cluster sea muy grande, no sucede lo mismo con la frontera del cluster debido a que estamos considerando condiciones periódicas sobre las fronteras. Por ejemplo, si todos los espines de un renglón pertenecen a un cluster, tenemos un cluster de tamaño L y el tamaño de la frontera del cluster es $2L$. De manera general, si los espines de l renglones consecutivos, con $1 \leq l < L$, pertenecen a un cluster, el tamaño del cluster es $l \times L$, pero la frontera sigue siendo de tamaño $2L$. En el caso en que todos los espines pertenezcan a un sólo cluster, el tamaño del cluster es L^2 , sin embargo, no tiene frontera.

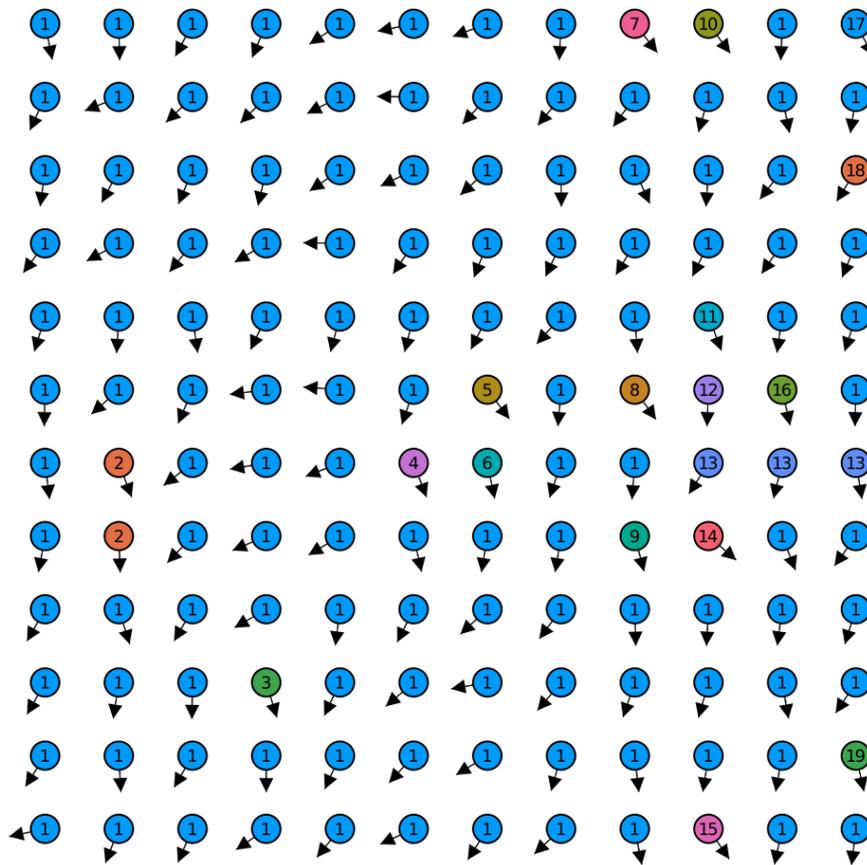


Figura 4.7: Se muestra una configuración típica de espines para un lattice de 12×12 , con $\beta = 1.4$. En esta configuración se formaron 19 clusters y no se encuentra ningún vórtice o anti-vórtice.

4.3. Vórtices y semi-vórtices

Decimos que los clusters \mathcal{C}_i y \mathcal{C}_j tienen orientación opuesta, si los espines de \mathcal{C}_i están en un semi-plano de Wolff y los espines de \mathcal{C}_j están en el otro semi-plano. Asimismo, decimos que dos clusters tienen orientación igual si los espines de ambos clusters se encuentran en el mismo semi-plano de Wolff.

Como mencionamos en la sección 3.4.1, los semi-vórtices falsos son semi-vórtices que están situados en plaquetas que no presentan vorticidad en la configuración original. Esto quiere decir que los clusters en la configuración original tienen orientación similar por lo que las plaquetas situadas en la frontera entre dichos clusters no presentan vorticidad. Sin embargo, al analizar la semi-vorticidad partiendo de la configuración de referencia, donde aseguramos que los clusters van a tener orientación opuesta, surgen los semi-vórtices que estamos denotando como falsos.

Los semi-vórtices verdaderos se encuentran en plaquetas que presentan vorticidad en la configuración original. Esto quiere decir que en la configuración original los clusters tienen orientación opuesta. Entonces, cuando analizamos la semi-vorticidad partiendo de la configuración de referencia, los clusters siguen teniendo orientación opuesta, por lo tanto, las plaquetas que presentaban vorticidad en la configuración original, siguen presentando vorticidad. Por lo cual, los denotamos como verdaderos.

Ahora, lo que estamos considerando como configuración original, no es más que una de las 2^n posibles configuraciones que se obtienen del sub-ensamble generado por n clusters, las cuales son estadísticamente equivalentes. Entonces, podríamos denotar como “nueva” configuración original a la configuración donde los semi-vórtices falsos sean considerados verdaderos, y los verdaderos sean considerados falsos. Ambas configuraciones son equivalentes, de manera que nada indica alguna preferencia entre semi-vórtices verdaderos y falsos. Para comprobar lo anterior mencionado, en la Fig. 4.8 se muestra el promedio de la razón de semi-vórtices falsos sobre verdaderos. Dentro del error obtenido, la razón de semi-vórtices falsos sobre verdaderos es igual a uno.

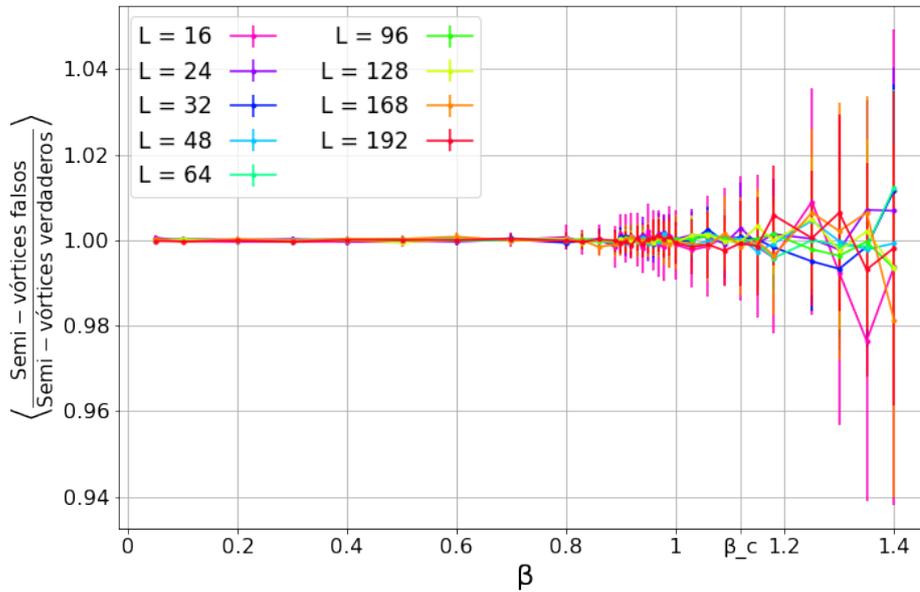


Figura 4.8: Se muestra el promedio de la razón de semi-vórtices falsos sobre verdaderos. Dentro de los errores, obtenemos que la razón es igual a uno. Esto nos dice que en promedio, cada configuración presenta la misma cantidad de semi-vórtices falsos y semi-vórtices verdaderos.

En la Fig. 4.9 se muestra la densidad promedio del número de vórtices y de semi-vórtices para distintos tamaños del sistema. Como se aprecia, el comportamiento es el mismo. De hecho, tenemos un factor de 4, es decir, la densidad promedio de semi-vórtices es cuatro veces la densidad promedio de vórtices. Esto sucede por dos razones:

- Los semi-vórtices están asociados a dos clusters. Entonces, toda plaqueta que contenga un vórtice o anti-vórtice genera dos semi-vórtices. Esto genera un factor de dos.
- Los semi-vórtices falsos también están asociados a dos clusters. Entonces, cuando analizamos la semi-vorticidad, la plaqueta presenta vorticidad para dos clusters, de manera que es contado doble, por lo que generan un factor de dos.

Los resultados mostrados en la Fig. 4.8 muestran que los semi-vórtices falsos y verdaderos surgen con la misma frecuencia. Por lo tanto, los dos puntos anteriores generan el factor de cuatro antes mencionado.

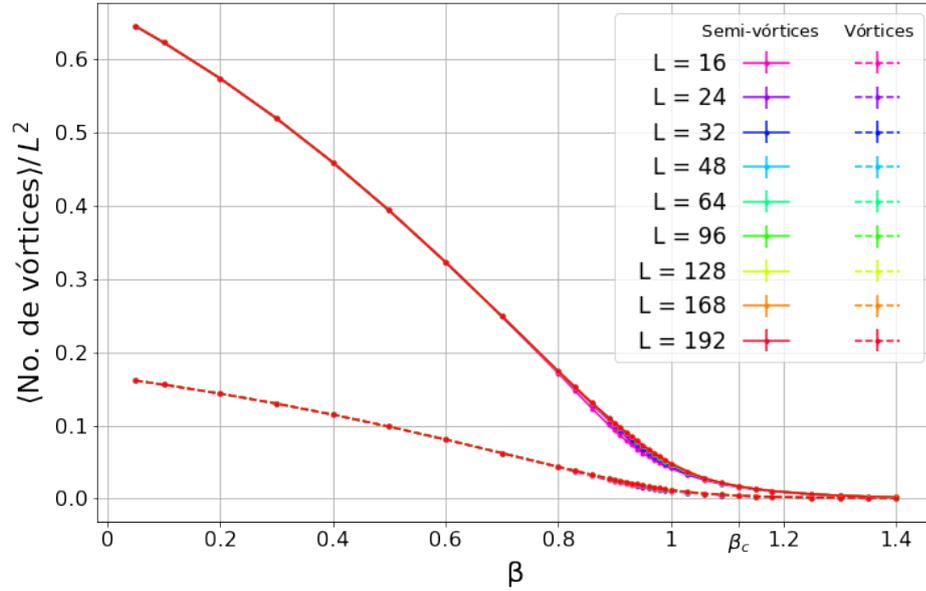


Figura 4.9: Las líneas punteadas representan la densidad promedio de vórtices y las líneas sólidas representan la densidad promedio de semi-vórtices.

En la Fig. 4.10 se muestra la densidad promedio de los semi-vórtices libres verdaderos. La sub-gráfica ilustra que la densidad converge asintóticamente a una curva “maestra”, conforme aumentamos el tamaño del sistema. La curva decae más rápidamente conforme menor es el tamaño del sistema porque el tamaño de los clusters alcanza con mayor rapidez el tamaño del lattice.

El número de semi-vórtices libres verdaderos no puede ser considerado como un parámetro de orden pues su valor es mayor que cero incluso para $\beta > \beta_c$. Sin embargo, notamos que cerca de β_c su valor es cercano a cero, lo cual nos da la información de que la aparición paulatina de semi-vórtices verdaderos libres es sensible a la transición BKT.

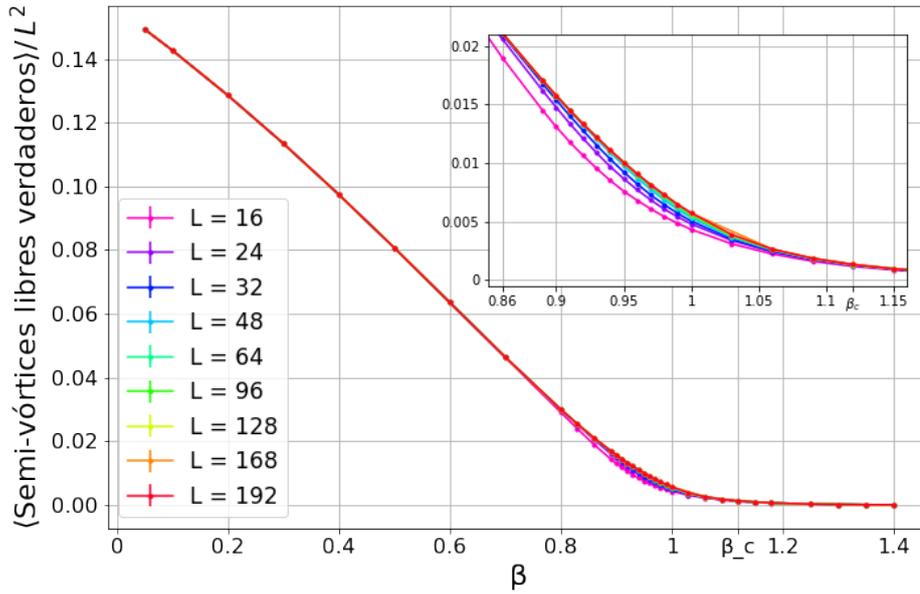


Figura 4.10: Se muestra la densidad de los semi-vórtices libres verdaderos en función del inverso de la temperatura. El número de semi-vórtices libres verdaderos no puede ser considerado como un parámetro de orden pues su valor es mayor que cero incluso para $\beta > \beta_c$. Sin embargo, notamos que cerca de β_c su valor es cercano a cero, lo cual nos da la información de que la aparición paulatina de semi-vórtices verdaderos libres es sensible a la transición BKT.

En la Fig. 4.11 se muestra la densidad promedio de pares ligados en función de β . La curva tiene un máximo cerca de $\beta \approx 0.5$. Este efecto se lo asociamos al tamaño de la frontera que comparten los clusters y al número de semi-vórtices.

Un par ligado son dos plaquetas cuya semi-vorticidad está asociada a los mismos clusters, como se explicó en la sección 3.4.1. Entonces, entre mayor sea la frontera que comparten dos clusters, es más probable encontrar un par ligado.

Conforme β aumenta, los clusters tienden a crecer, por consiguiente, también lo hace la frontera que comparten dos clusters, generando que la probabilidad de encontrar un par ligado incremente. Sin embargo, si aumenta β , el número de semi-vórtices disminuye. Esto causa que la probabilidad de encontrar un par ligado disminuya. El sistema pasa de un régimen como se muestra en la Fig. 4.5 a uno como en la Fig. 4.6.

Por consiguiente, al aumentar β hasta $\beta \lesssim 0.5$, el efecto del incremento del tamaño de los clusters domina sobre el efecto de la disminución de semi-vórtices. Esto hace que la frecuencia de pares ligados aumente. Para $\beta \gtrsim 0.5$, la disminución de semi-vórtices tiene mayor impacto que el aumento del tamaño de los clusters, causando que la curva decrezca. Además, si β sigue aumentando, pasamos a un

régimen donde un sólo cluster tiende a cubrir todo el lattice, como se muestra en la Fig. 4.7, por lo que encontrar un par ligado resulta imposible.

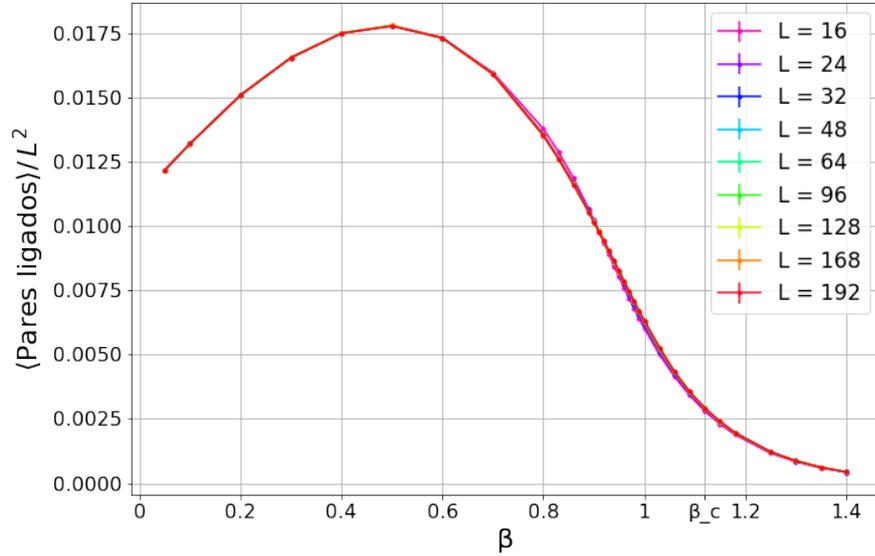


Figura 4.11: Se muestra la densidad de pares ligados en función de β para distintos tamaños de sistema. La curva tiene un máximo debido a la relación entre los efectos del aumento de tamaño de los clusters y la disminución de semi-vórtices.

4.4. Vorticidad promedio por cluster

V_c cuantifica el número promedio de semi-vórtices por cluster, como se expresa en la ec. (3.42). En la Fig. 4.12 se muestra el valor promedio de V_c en función de β . Como hemos mencionado anteriormente, la aparición de semi-vórtices decrece conforme aumentamos β , esto causa que $\langle V_c \rangle$ decrezca. La relación entre los efectos del aumento del tamaño de los clusters y la disminución de los semi-vórtices afecta de maneras diferentes al valor de V_c y al número de pares ligados. En el caso de los pares ligados notamos un máximo, pero el efecto es causado por la frontera que comparten dos clusters, en cambio, V_c sólo nos da una noción del número de semi-vórtices en la frontera de los clusters, sin importar la forma de éstos. Es por ello que en el último caso, la curva sólo decrece y no presenta ningún máximo.

En la Fig. 4.13 se muestra V_{c2} , dada por la ec. (3.43), en función de β . Se observa que V_{c2} presenta un máximo y su altura aumenta conforme aumentamos el tamaño del sistema. Además, el valor de β donde ocurre dicho máximo tiende a acercarse a β_c conforme aumentamos el tamaño del sistema.

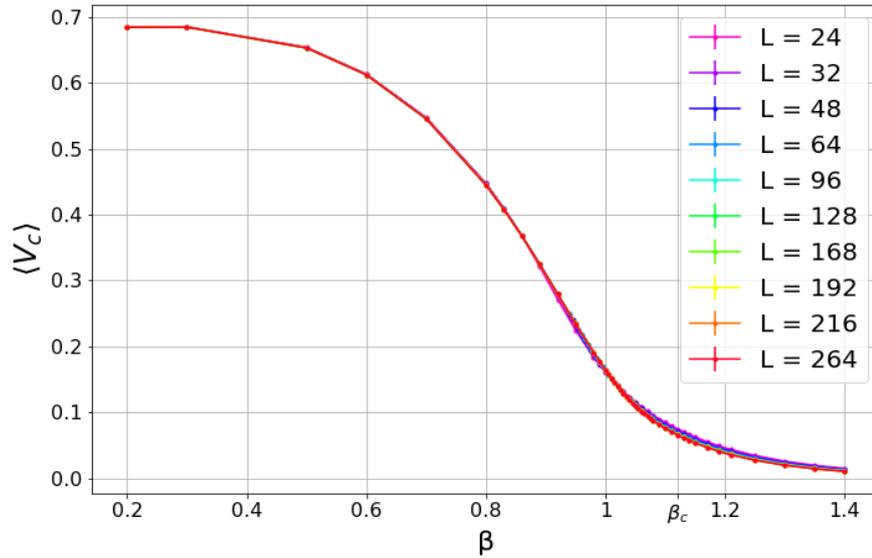


Figura 4.12: Se muestra el número promedio de semi-vórtices por cluster, en función de β para distintos tamaños del sistema.

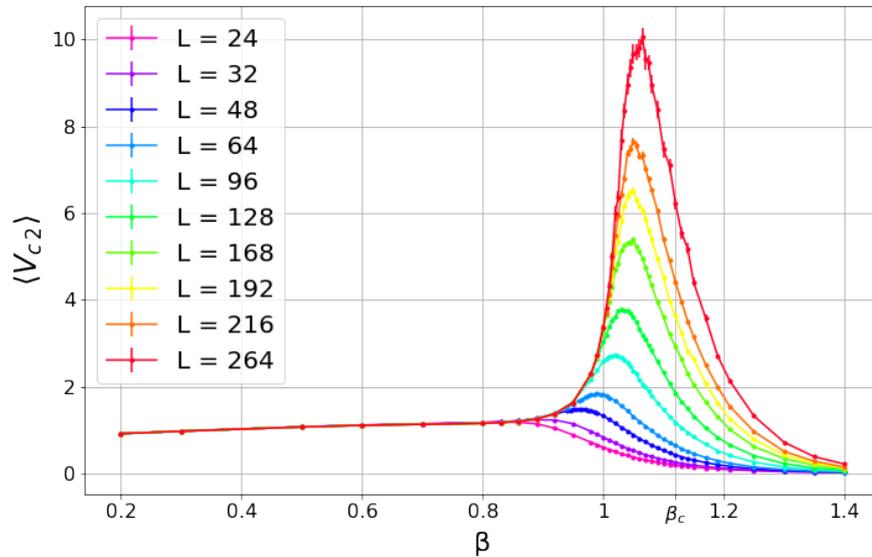


Figura 4.13: Se muestra el valor promedio de V_{c2} , dada por la ec. (3.43), en función de β para distintos tamaños del sistema. Notamos que el valor de V_{c2} presenta un máximo e incrementa conforme aumentamos el tamaño del sistema. Además, el valor de β donde ocurre dicho máximo tiende a recorrerse hacia β_c , como vamos a discutir más adelante.

4. RESULTADOS

En la Fig. 4.14 se muestra χ_{V_c} , dada por la ec. (3.44), notamos que el efecto de $\langle V_{c2} \rangle$ no se ve afectado por $\langle V_c \rangle^2$, debido a que es de dos ordenes de magnitud menor.

Para valores de $\beta \lesssim 0.8$, las curvas para los distintos tamaños del sistema convergen a una sola curva. Esto se debe a que χ_{V_c} cuantifica la dispersión de la vorticidad por cluster y, en general, ningún cluster se acerca al tamaño del sistema, por lo que no hay ningún efecto de tamaño finito. Por lo tanto, el valor de χ_{V_c} es el mismo para los diferentes tamaños del sistema.

Conforme β aumenta, partiendo de valores de β pequeños, χ_{V_c} crece hasta llegar a un máximo, esto se debe a que conforme nos vamos acercando a β_c , los clusters tienden a crecer, generando más diversidad de tamaños, produciendo que las fluctuaciones de la vorticidad por cluster aumente. Además, conforme aumentamos el tamaño del sistema, los clusters tienen más “libertad” de crecer por lo que la altura del máximo de la curva tiende a ser más grande. En el límite termodinámico, $L \rightarrow \infty$, se esperaría que χ_{V_c} tienda a infinito para $\beta = \beta_c$, como vamos a discutir a continuación. Notemos que χ_{V_c} no diverge para todo el rango $\beta > \beta_c$ debido a que la probabilidad de formar un bond entre dos espines tiende a uno. Por lo tanto, el número de clusters tiende a convergir a uno, lo cual causa que χ_{V_c} tienda a cero para $\beta \rightarrow \infty$.

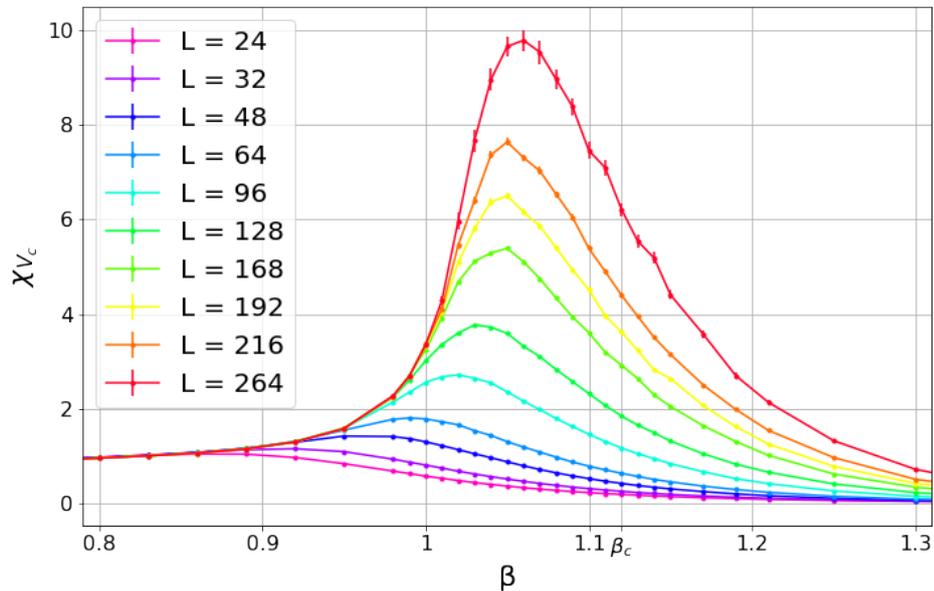


Figura 4.14: Se muestra el valor de χ_{V_c} , el cual nos cuantifica las fluctuaciones de la vorticidad por cluster. Conforme aumentamos el tamaño del sistema, el máximo de la curva es más alto y más cercano a β_c .

Procedemos a hacer un ajuste polinomial de segundo grado para obtener los valores estimados de β donde ocurren los máximos para las curvas correspondientes a $L \geq 96$ mostradas en la Fig. 4.14; y para $L = 312$ que no se muestra debido a que sólo se obtuvieron datos para $1 < \beta < 1.15$. Denotamos como $\beta_{\text{máx}}$ al valor de β donde ocurre el máximo y $\chi_{V_c \text{ máx}} = \chi_{V_c}(\beta_{\text{máx}})$.

El primer aspecto a revisar es la altura del máximo. En este caso hacemos un ajuste de la forma

$$\chi_{V_c \text{ máx}} = \frac{a}{\frac{1}{L^2} + b} + c, \quad (4.4)$$

donde a , b y c son parámetros a ajustar.

Debido a que no existe algún antecedente teórico que nos indique el comportamiento que debe seguir $\chi_{V_c \text{ máx}}$, la ec. (4.4) es una propuesta que nosotros consideramos apropiada. Al realizar una prueba de *bondad de ajuste* χ^2/dof ,¹ obtenemos un valor $\chi^2/\text{dof} \approx 1.5$, lo cual nos indica que el ajuste mostrado en la Fig. 4.15 logra capturar el comportamiento de los datos y por lo tanto puede ser considerado válido.

La forma propuesta para el ajuste permite que en el límite $L \rightarrow \infty$, $\chi_{V_c \text{ máx}}$ pueda divergir o tomar un valor finito, dependiendo del valor de b . En nuestro caso, obtuvimos un valor de $b = 2.2(17) \times 10^{-6}$, el cual difiere de cero por menos de dos veces el error obtenido, lo cual no parece ser una coincidencia. Por lo tanto, es compatible con una divergencia en el límite termodinámico.

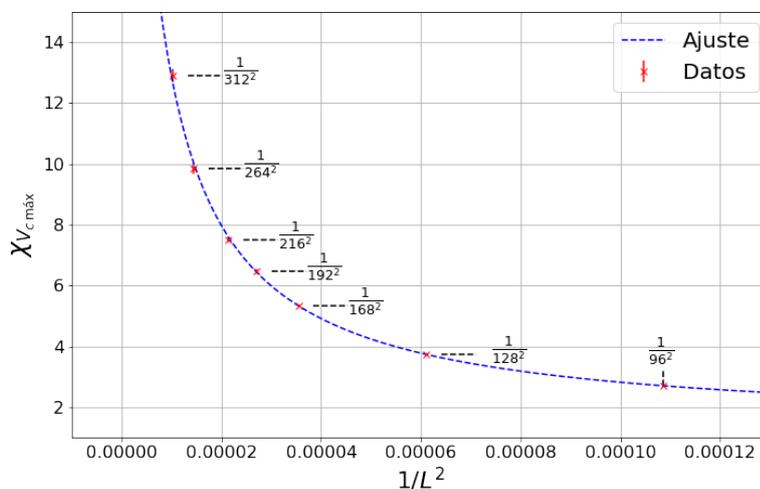


Figura 4.15: Los puntos rojos representan el valor máximo de χ_{V_c} , en cada punto está señalado el valor de $\frac{1}{L^2}$. La línea punteada azul representa el ajuste expresado en la ec. (4.4). El límite $\frac{1}{L^2} \rightarrow 0$, es compatible con $\chi_{V_c \text{ máx}} \rightarrow \infty$.

¹La definición de χ^2/dof se puede encontrar en el apéndice B.2

En el límite termodinámico se esperaría que χ_{V_c} tienda a infinito para $\beta = \beta_c$. Para poner a prueba dicha hipótesis, procedemos a hacer un ajuste de la forma

$$\beta_{\text{máx}} = a \ln \left(\frac{b}{L^2} + c \right), \quad (4.5)$$

donde a , b y c son parámetros a ajustar. De esta manera, es posible extrapolar los datos y obtener un valor aproximado de $\beta_{\text{máx}}$ para volumen infinito, el cual será nuestro primer estimador de β_c , denotado como $\hat{\beta}_{c1}$. En la figura 4.16 se muestra el valor $\beta_{\text{máx}}$ en función del inverso del tamaño del sistema. Los datos se muestran en color rojo. La línea punteada azul representa el ajuste hecho para el cual se obtuvo un valor $\chi_{\nu}^2/\text{dof} \approx 0.016$. En el límite $1/L^2 \rightarrow 0$, la curva interseca el eje vertical en $\hat{\beta}_{c1} = 1.081 \pm 0.013$. Si lo comparamos con el valor de $\beta_c = 1.1199(1)$ reportado en Ref. [39], tenemos que $(\beta_c - \hat{\beta}_{c1})/\hat{\sigma}_1 \approx 2.9$, donde $\hat{\sigma}_1 = 0.013$. De igual manera que $\chi_{V_{c\text{máx}}}$, no tenemos un antecedente que nos indique el tipo de convergencia que debería de tener $\beta_{\text{máx}} \rightarrow \beta_c$, por lo que el ajuste de la ec. (4.5) sólo es una propuesta que nosotros consideramos adecuada.

Si bien el estimador $\hat{\beta}_{c1}$ no corresponde al valor reportado en Ref. [39], podemos realizar el mismo ajuste, pero agregando el valor conocido de β_c , es decir, al momento de realizar el ajuste también consideramos el punto $(\frac{1}{L^2} = 0, \beta_{\text{máx}} = \beta_c)$. En la Fig. 4.17 se muestra el resultado de dicho ajuste, donde se obtiene el estimador $\hat{\beta}_{c2} = 1.111 \pm 0.001$. Al considerar β_c estamos “forzando” al ajuste a que el estimador $\hat{\beta}_{c2}$ sea similar a β_c . La razón de considerar β_c es para realizar una prueba de bondad de ajuste χ_{ν}^2/dof . Para los resultados mostrados en la Fig. 4.17 obtenemos un valor $\chi_{\nu}^2/\text{dof} \approx 0.15$, lo cual nos indica que el ajuste propuesto sí logra capturar el comportamiento de los datos. Si bien $\hat{\beta}_{c1} = 1.081 \neq \beta_c$, lo anteriormente mencionado nos deja abierta la posibilidad de que conforme se obtengan datos para sistemas de mayor tamaño, las correcciones al estimador $\hat{\beta}_{c1}$ hagan que éste converja al valor de β_c .

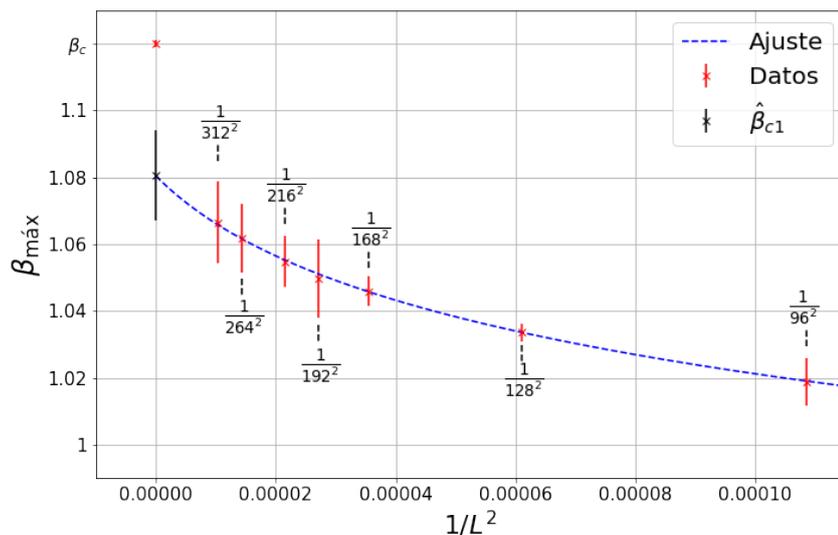


Figura 4.16: Los puntos rojos corresponden al valor de β donde ocurre el máximo de χ_{V_c} , en cada punto está señalado el valor de $\frac{1}{L^2}$. La línea punteada azul representa el ajuste dado por la ec. (4.5) y el punto de color negro corresponde al estimador $\hat{\beta}_{c1} = 1.081 \pm 0.013$. Además, se obtuvo un valor $\chi^2_{\nu}/\text{dof} \approx 0.016$.

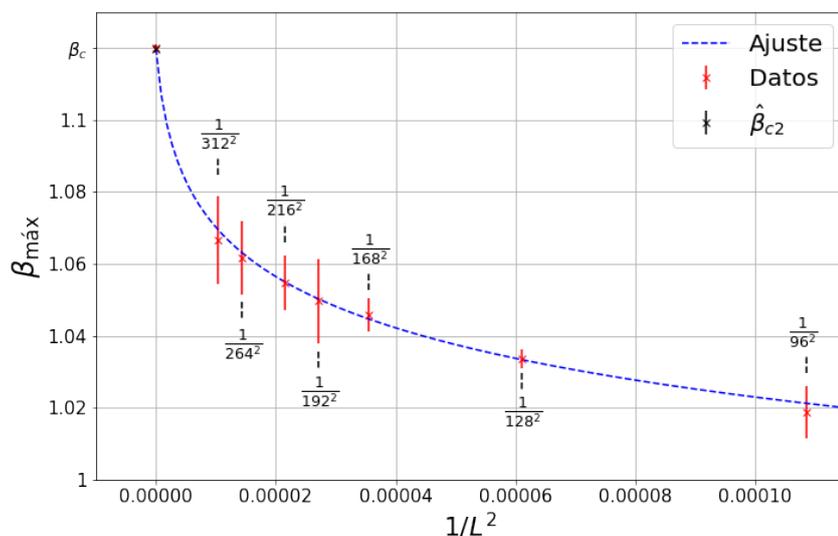


Figura 4.17: Los puntos rojos corresponden al valor de β donde ocurre el máximo de χ_{V_c} , en cada punto está señalado el valor de $\frac{1}{L^2}$. La línea punteada azul representa el ajuste dado por la ec. (4.5), cuando se considera el valor de β_c reportado en Ref. [39]. Se obtiene el estimador $\hat{\beta}_{c2} = 1.111 \pm 0.001$. Además, se obtuvo un valor $\chi^2_{\nu}/\text{dof} \approx 0.15$.

Conclusiones

En este trabajo se presentó un estudio numérico del modelo XY bidimensional usando simulaciones de Monte Carlo. Principalmente se estudió el papel que juega la vorticidad en la transición BKT. Además, se introdujo la nueva idea de los semi-vórtices y la forma de identificarlos.

En el capítulo 3 vimos que los vórtices que forman pares ligados no son perceptibles a largas distancias y conforme aumenta la temperatura, los vórtices se separan, de manera que son considerados “libres”, dando lugar a la transición BKT. Una de las primeras expectativas fue que la aparición semi-vórtices libres verdaderos sucediera en $\beta = \beta_c$ y que la frecuencia aumentara conforme β disminuyera. Esto no sucedió así, como se muestra en la Fig. 4.10, donde se observa que la aparición es de manera paulatina y el valor de $\langle \text{Semi-vórtices libres verdaderos} \rangle / L^2$ es ligeramente mayor que cero incluso para $\beta \geq \beta_c$, por lo que no puede ser considerado un parámetro de orden que indique la transición BKT. A pesar de esto, los resultados ayudan a comprender mejor la relación entre la semi-vorticidad y el tamaño de los clusters, como se obtuvo del análisis de los resultados mostrados en la Fig. 4.11.

La observable χ_{V_c} presenta un máximo que parece ser divergente en el límite termodinámico. Esto indica que la vorticidad por cluster es sensible a la transición BKT.

A partir de la información mostrada en la Fig. 4.14 fue posible obtener un estimador de β_c . En la Fig. 4.16 se muestra una extrapolación, a volumen infinito, de los valores de β donde ocurre el máximo de χ_{V_c} , obtenemos que $(\beta_c - \hat{\beta}_{c1}) / \hat{\sigma}_1 \approx 2.9$. A pesar de que el resultado de $\hat{\beta}_1$ difiera de β_c por casi 3 veces el error obtenido, los resultados mostrados en la Fig. 4.17 nos dejan abierta la posibilidad de que surjan correcciones al estimador $\hat{\beta}_{c1}$ si se estudian tamaños más grandes.

El análisis de la vorticidad por cluster nos ha dado bastante información sobre el comportamiento del modelo XY bidimensional. Algunas de las posibilidades para darle continuidad a este proyecto son:

-
- Optimizar el código para la medición de observables.

A pesar de haber implementado el algoritmo de Hoshen-Kopelman el cual es el más eficiente para la identificación de clusters en el sistema, un aspecto que toma bastante tiempo es la medición de observables. Por ejemplo, identificar los semi-vórtices requiere mayor tiempo de cómputo debido a que se necesitan generar la configuración de referencia y las configuraciones para cada cluster, además del hecho de calcular la diferencia angular de espines para cada plaqueta.

- Estudiar sistemas de mayor tamaño.

El hecho de estudiar sistemas de mayor tamaño permite que los efectos de tamaño finito afecten en menor medida. Esto permitiría obtener un mayor número de datos de χ_{V_c} , de manera que las correcciones al estimador $\hat{\beta}_{c1}$ verifiquen si $\hat{\beta}_{c1} \rightarrow \beta_c$.

- Calcular la correlación vórtice-vórtice, es decir, $\langle q_i q_j \rangle$, donde q_i y q_j representan la vorticidad de las plaquetas identificadas con el índice i y j , respectivamente, y ver si es un indicador de la transición BKT.

Cadenas de Markov

En este apéndice se mostrará de manera más formal las propiedades que debe cumplir la cadena de Markov para asegurar que converge a la distribución deseada. Seguimos el esquema de Ref. [46]. Empezamos con la definición de la sección 2.1.

Sea $\mathbf{X} = \{X_n\}_{n \geq 1}$ un proceso estocástico, el cual vamos a suponer numerable. Sea \mathcal{S} el conjunto de posibles configuraciones del sistema.

Definición A.1 *Decimos que se trata de una cadena de Markov si satisface*

$$P(X_{n+1} = \mathbf{x}_{n+1} \mid X_n = \mathbf{x}_n, \dots, X_1 = \mathbf{x}_1) = P(X_{n+1} = \mathbf{x}_{n+1} \mid X_n = \mathbf{x}_n),$$

tal que $n \in \mathbb{N}$ y $\mathbf{x}_i \in \mathcal{S}$.

Definición A.2 *Se define la matriz de transición $P := \{P_{ij}\}$, donde P_{ij} es la probabilidad de ir de la configuración \mathbf{x}_i a la configuración \mathbf{x}_j ,*

$$P_{ij} = P(X_{n+1} = \mathbf{x}_j \mid X_n = \mathbf{x}_i),$$

$$P_{ij}^{(m)} = P(X_{n+m} = \mathbf{x}_j \mid X_n = \mathbf{x}_i).$$

Definición A.3 *Sea $\mathbf{X} = \{X_n\}_{n \geq 1}$ una cadena de Markov. Decimos que es homogénea si $\forall n \geq 1$ cumple que*

$$P(X_{n+1} = \mathbf{x}_j \mid X_n = \mathbf{x}_i) = P(X_2 = \mathbf{x}_j \mid X_1 = \mathbf{x}_i).$$

Lo anterior nos dice que las probabilidades de transición son invariantes en el “tiempo” de la cadena.¹

Definición A.4 Sea $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \mathcal{S}$. Decimos que la configuración \mathbf{x}_i comunica a \mathbf{x}_j , $\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j$, si existe $m \in \mathbb{N}$, tal que

$$P(X_{n+m} = \mathbf{x}_j \mid X_n = \mathbf{x}_i) > 0.$$

Esto significa que es posible ir de la configuración \mathbf{x}_i a la configuración \mathbf{x}_j en una cantidad finita de pasos.

Definición A.5 Sea $\mathbf{X} = \{X_n\}_{n \geq 1}$ una cadena de Markov. Decimos que es irreducible si todas las configuraciones se comunican entre sí,

$$\mathbf{x}_i \leftrightarrow \mathbf{x}_j, \quad \forall \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \mathcal{S},$$

lo cual nos dice que el sistema es *ergódico*.

Definición A.6 El período de una configuración $\mathbf{x}_i \in \mathcal{S}$ se define como

$$d(\mathbf{x}_i) = \text{M.C.D.}\{n \geq 1 : P_{ii}^{(n)} > 0\}.$$

Las iniciales M.C.D. hacen referencia al *mínimo común divisor*.

Definición A.7 Se dice que una cadena de Markov es *aperiódica* si $\forall \mathbf{x}_i \in \mathcal{S}$ $d(\mathbf{x}_i) = 1$.

Teorema A.1 Sea \mathbf{X} una cadena de Markov homogénea, irreducible y aperiódica, con distribución estacionaria π

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P^{(n)}(i, j) = \pi(j).$$

¹No nos referimos al tiempo físico ni al tiempo euclidiano. El tiempo de la cadena es el tiempo del algoritmo, es decir, el número de actualizaciones.

Dadas las hipótesis del teorema anterior, podemos asegurar que la cadena de Markov tiende a seguir una distribución específica para n suficientemente grande. Para mayor definiciones, ejemplos y la demostración del teorema véase Ref. [46].

B.1. Algoritmo Hoshen-Kopelman

El algoritmo de Hoshen-Kopelman es la forma más eficiente conocida de identificar los clusters de una red, su eficiencia es proporcional al volumen del lattice. Particularmente fue propuesto para la identificación de clusters para fenómenos percolativos en lattices regulares [23]. Actualmente es un algoritmo muy usado incluso para redes no regulares [47]. A continuación se da una breve explicación del algoritmo, basado en que estamos trabajando con un lattice regular cuadrangular.

El algoritmo consiste en generar dos listas `EtiquetaNodo` y `EtiquetaCluster`. `EtiquetaCluster` guarda las etiquetas de los clusters creados. El i -ésimo elemento de `EtiquetaNodo` guarda la etiqueta del elemento que debe ser revisado en `EtiquetaCluster`, es decir, si $\text{EtiquetaNodo}[i] = N_i$ y $\text{EtiquetaCluster}[N_i] = C$, entonces el i -ésimo espín pertenece al cluster con la etiqueta C . Así, cuando dos clusters con etiquetas diferentes “se unan”, no es necesario revisar los L^2 espines e ir cambiando las etiquetas de los espines que pertenezcan a alguno de los dos clusters. Sólo es necesario modificar la etiqueta de ambos clusters en `EtiquetaCluster`, la cual siempre es una lista de tamaño menor a L^2 . Esto hace que sea más rápido el proceso de identificar clusters. A continuación se da una explicación técnica del procedimiento.

- Empezamos creando las siguientes variables: Una lista `EtiquetaNodo = [0, 0, ..., 0, 0]` de tamaño L^2 ; una lista vacía `EtiquetaCluster = []`; y las variables $n_c = 0$ y $l_c = 0$. `EtiquetaCluster` guarda las etiquetas de los clusters creados. El i -ésimo elemento de `EtiquetaNodo` guarda la etiqueta del elemento que debe ser revisado en `EtiquetaCluster`, es decir, si $\text{EtiquetaNodo}[i] = N_i$ y $\text{EtiquetaCluster}[N_i] =$

C , entonces el i -ésimo espín pertenece al cluster con la etiqueta C . La variable n nos ayuda a crear una nueva etiqueta cuando se forma un nuevo cluster; y l_c que es la longitud de la lista EtiquetaCluster.

- Se revisa el i -ésimo espín y a sus vecinos cercanos conectados mediante bonds, denotados por $j_{\{v\}}$, por ejemplo, si el i -ésimo espín está conectado a sus cuatro vecinos cercanos entonces $j_{\{v\}} = j_{\{1,2,3,4\}}$. Existen dos resultados posibles que el i -ésimo espín no pertenezca a ningún cluster o que ya pertenezca a un cluster, visto de otra forma, que $\text{EtiquetaNodo}[i] = 0$ o $\text{EtiquetaNodo}[i] \neq 0$. Y a su vez dos subcasos, que los vecinos ya pertenezcan a algún cluster o que ninguno pertenezca, es decir, que $\text{EtiquetaNodo}[j_{\{v\}}] = 0$ o $\text{EtiquetaNodo}[j_{\{v\}}] \neq 0$.
- Si el i -ésimo espín no pertenece a ningún cluster, $\text{EtiquetaNodo}[i] = 0$.
 - Si ninguno de sus vecinos pertenece a algún cluster, $\text{EtiquetaNodo}[j_{\{v\}}] = 0$.
 - Entonces creamos la etiqueta para un nuevo cluster $n_{\text{new}} \leftarrow n + 1$ y la agregamos a EtiquetaCluster, de manera que $\text{EtiquetaCluster} = [n_1, n_2, \dots, n_{\text{new}}]$. Al agregar esta nueva etiqueta, el tamaño de EtiquetaCluster aumenta de tamaño entonces redefinimos $l_c \leftarrow l_c + 1$. Por último, modificamos las etiquetas del i -ésimo espín y sus vecinos j , tal que $\text{EtiquetaNodo}[i] = l_c$ y $\text{EtiquetaNodo}[j_{\{v\}}] = l_c$. De esta manera tenemos que el espín i -ésimo y sus vecinos pertenecen al cluster con la etiqueta n_{new} .
 - Si alguno de sus vecinos pertenece a algún cluster, $\text{EtiquetaNodo}[j_{\{v\}}] \neq 0$.
 - Entonces buscamos el cluster con la etiqueta de menor valor. Si $\text{EtiquetaNodo}[j_{\{v\}}] = N_{j_{\{v\}}}$ y $\text{EtiquetaCluster}[N_{j_{\{v\}}}] = C_{j_{\{v\}}}$, es decir, el j_1 -ésimo espín pertenece al cluster C_{j_1} y así consecutivamente. Entonces encontramos el mínimo $C_{\min} = \min\{C_{j_{\{v\}}}\}$ y cambiamos todas las etiquetas de los clusters por C_{\min} , es decir, $C_i \leftarrow C_{\min}$ y $C_{j_{\{v\}}} \leftarrow C_{\min}$.
- Si el i -ésimo espín pertenece a algún cluster, $\text{EtiquetaNodo}[i] \neq 0$.
 - Si ninguno de sus vecinos pertenece a algún cluster, $\text{EtiquetaNodo}[j_{\{v\}}] = 0$.
 - Debido a que $\text{EtiquetaNodo}[i] \neq 0$, supongamos que $\text{EtiquetaNodo}[i] = N_i$ y $\text{EtiquetaCluster}[N_i] = C_i$, es decir, el i -ésimo espín pertenece al cluster C_i . Entonces modificamos la

etiquetas de sus vecinos de la forma $\text{EtiquetaNodo}[j_{\{v\}}] = N_i$, de esta manera los vecinos del i -ésimo espín, pertenecen al cluster con la etiqueta C_i .

- Si alguno de sus vecinos pertenece a algún cluster, $\text{EtiquetaNodo}[j_{\{v\}}] \neq 0$.
 - Supongamos $\text{EtiquetaNodo}[i] = N_i$ y $\text{EtiquetaNodo}[j_{\{v\}}] = N_{j_{\{v\}}}$; $\text{EtiquetaCluster}[N_i] = C_i$ y $\text{EtiquetaCluster}[N_{j_{\{v\}}}] = C_{j_{\{v\}}}$, es decir, el i -ésimo espín pertenece al cluster C_i , el j_1 -ésimo espín pertenece al cluster C_{j_1} y así consecutivamente. Entonces $C_{\min} = \min\{C_i, C_{j_{\{v\}}}\}$ y todas se cambian por la etiqueta de menor valor, es decir, $C_i \leftarrow C_{\min}$ y $C_{j_{\{v\}}} \leftarrow C_{\min}$.

A continuación se muestra una EtiquetaNodo y EtiquetaCluster para cada paso del algoritmo Hoshen-Kopelman para el ejemplo mostrado en la Fig. B.1.

Paso	EtiquetaNodo	EtiquetaCluster
0	[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]	[]
1	[1, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]	[1]
2	[1, 2, 2, 0, 0, 0, 1, 0, 0]	[1, 2]
3	[1, 2, 2, 0, 0, 2, 1, 0, 0]	[1, 2]
4	[1, 2, 2, 3, 3, 2, 1, 0, 0]	[1, 2, 3]
5	[1, 2, 2, 3, 3, 2, 1, 3, 0]	[1, 2, 2]
6	[1, 2, 2, 3, 3, 2, 1, 3, 0]	[1, 2, 2]
7	[1, 2, 2, 3, 3, 2, 1, 3, 0]	[1, 2, 2]
8	[1, 2, 2, 3, 3, 2, 1, 3, 0]	[1, 2, 2]
9	[1, 2, 2, 3, 3, 2, 1, 3, 4]	[1, 2, 2, 4]
10	[1, 2, 2, 3, 3, 2, 1, 3, 4]	[1, 2, 2, 3]

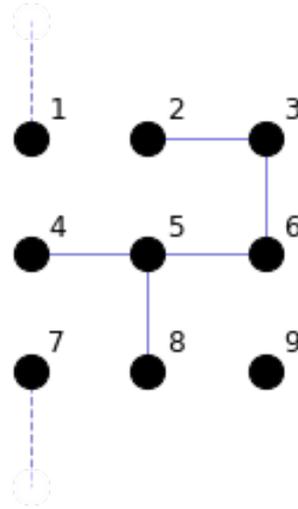


Figura B.1: Se muestra un lattice de 9 espines, las líneas representan los bonds. El número representa el orden en el que los espines fueron revisados.

B.2. Bondad de ajuste

El valor de χ^2/dof es una manera de cuantificar que tan bien se ajusta el modelo de predicción a los datos obtenidos y está dado por

$$\chi^2/\text{dof} = \frac{1}{n - m} \sum_{i=1}^n \left(\frac{o_i - \hat{o}_i}{\sigma_i} \right)^2, \quad (\text{B.1})$$

donde \hat{o}_i es el estimador del i -ésimo dato, o_i es el i -ésimo dato y σ_i su error asociado; $n - m$ son los grados de libertad (dof por sus siglas en inglés), con n el número de datos y m el número de parámetros ajustados. Valores de $\chi^2/\text{dof} \lesssim 1$ indica que los valores estimados por el ajuste son similares a los datos obtenidos, por lo que podemos considerar que el ajuste logra capturar el comportamiento de los datos. Valores de $\chi^2/\text{dof} \gg 1$ indican que los valores de predicción se alejan de los datos obtenidos, por lo que no se puede asegurar que exista alguna relación entre la función del ajuste y los datos obtenidos.

B.3. Método jackknife

El método Jackknife sirve para obtener un estimado del error estándar de un conjunto de datos. Este método es sensible a errores de autocorrelación, además de ser un método no paramétrico, por lo que no es necesaria hacer alguna asunción de la distribución de los datos. En el caso $M = n$, el estimador del error, ec. (B.2), es el error estándar.

Supongamos un conjunto de datos $\mathcal{O}_{\text{data}} = \{\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2, \dots, \mathcal{O}_n\}$ de una observable \mathcal{O} . El algoritmo es el siguiente

- Calcula el promedio del conjunto de datos $\mathcal{O}_{\text{data}}$, al cual denotaremos $\langle \mathcal{O} \rangle$.
- Divide $\mathcal{O}_{\text{data}}$ en M subconjuntos de igual tamaño, es decir, cada subconjunto debe tener $\frac{n}{M}$ elementos.
- Calcula el promedio de $\mathcal{O}_{\text{data}}$ excluyendo los datos del subconjunto m , al cual denotaremos como $\langle \mathcal{O} \rangle_{(m)}$, para cada $m = 1, 2, \dots, M$.
- El estimado del error está dado por

$$\delta\mathcal{O} = \sqrt{\frac{M-1}{M} \sum_{m=1}^M (\langle \mathcal{O} \rangle_{(m)} - \langle \mathcal{O} \rangle)^2}. \quad (\text{B.2})$$

Plaqueta asociada a dos clusters

En este apéndice vamos a mostrar porque una plaqueta siempre está asociada a dos clusters o a ninguno. Primero, tengamos en cuenta lo siguiente:

- Como se explicó en la sección 3.4, un cluster tiene asociado un semi-vórtice si al revisar la trayectoria alrededor de dicho cluster, encontramos que el arco de conexión mínimo entre los espines de dos links consecutivos, respecto a la trayectoria del cluster, pasa por puntos diferentes, es decir, $A-B$ o $B-A$. En el caso que obtenemos $A-A$ o $B-B$, el cluster no tiene un semi-vórtice asociado (véase Fig. C.1). Por lo tanto, una plaqueta sólo está asociada a los clusters cuya trayectoria pasa por $A-B$ o $B-A$. Además, recordemos que la orientación del cluster es tal un observador caminando sobre dicha trayectoria, siempre ve al cluster a su lado izquierdo.

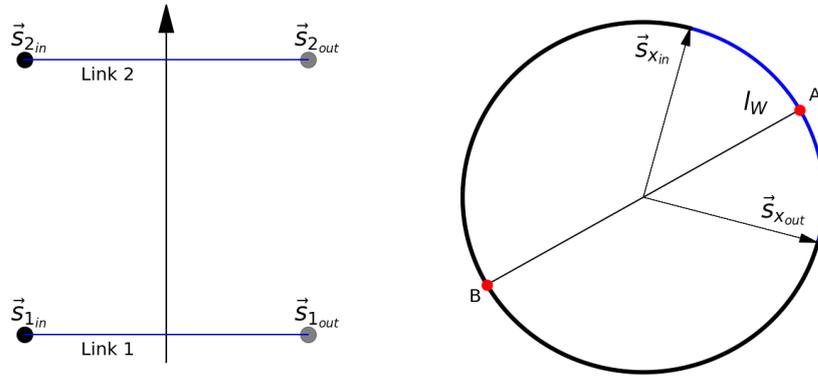


Figura C.1: En la imagen izquierda se muestra el orden de los links respecto a la trayectoria del cluster. $\vec{s}_{1_{in}}$ y $\vec{s}_{2_{in}}$ pertenecen al cluster que estamos considerando, mientras que $\vec{s}_{1_{out}}$ y $\vec{s}_{2_{out}}$ pertenecen a otro cluster u otros clusters. En la imagen derecha se muestra un ejemplo, donde el arco mínimo entre $\vec{s}_{x_{in}}$ y $\vec{s}_{x_{out}}$ pasa por el punto A.

- Para todos los ejemplos a continuación, ocuparemos el orden de los espines mostrado en la Fig. C.2. El link que conecta al espín \vec{s}_1 con \vec{s}_2 lo denotamos como L_1 ; el link que conecta al espín \vec{s}_2 con \vec{s}_3 como L_2 ; el link que conecta al espín \vec{s}_3 con \vec{s}_4 como L_3 ; y el link que conecta al espín \vec{s}_4 con \vec{s}_1 como L_4 .
- Decimos que un link “pasa” por el punto A o B , si el arco de conexión mínimo entre los espines del link, cruza por el punto A o B , respectivamente.

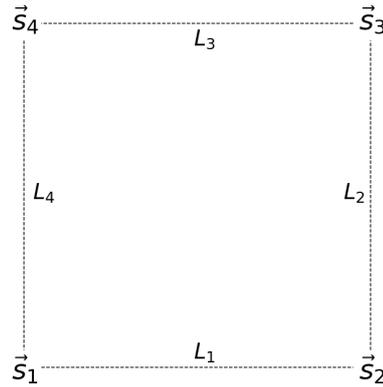


Figura C.2: El link que conecta al espín \vec{s}_1 con \vec{s}_2 lo denotamos como L_1 ; el link que conecta al espín \vec{s}_2 con \vec{s}_3 como L_2 ; el link que conecta al espín \vec{s}_3 con \vec{s}_4 como L_3 ; y el link que conecta al espín \vec{s}_4 con \vec{s}_1 como L_4 .

B.1. Dos clusters

Para fines explicativos, consideraremos un caso en particular, sin embargo, la idea es la misma para las demás configuraciones donde los espines de una plaqueta pertenezcan a dos clusters.

Supongamos que \vec{s}_1 y \vec{s}_2 pertenecen a un cluster denotado por \mathcal{C}_i ; y los espines \vec{s}_3 y \vec{s}_4 pertenecen a un cluster denotado por \mathcal{C}_j . Entonces, la trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_i consiste de los links consecutivos L_2 - L_4 (color rojo) y a trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_j consiste de los links consecutivos L_4 - L_2 (color azul), como se muestra en la Fig. C.3.

La plaqueta sólo está asociada a los clusters cuya trayectoria pasa por A - B o B - A . Si L_2 y L_4 pasan por puntos distintos, es decir, L_2 pasa por A y L_4 por B o viceversa, entonces la plaqueta queda asociada a los dos clusters debido a que estamos pasando por los mismos links sólo que en sentido contrario, esto descarta la posibilidad de que la plaqueta pertenezca a un sólo cluster. En el caso donde

L_2 y L_4 pasen por los mismos puntos, es decir, $A-A$ o $B-B$, la plaqueta no está asociada a ningún cluster.

Por lo tanto, en el caso de que los espines de una plaqueta pertenezcan a dos clusters, la trayectoria alrededor de cada cluster es la misma sólo que en sentido contrario, esto causa que las únicas posibilidades sean: que la plaqueta esté asociada a dos clusters o a ninguno.

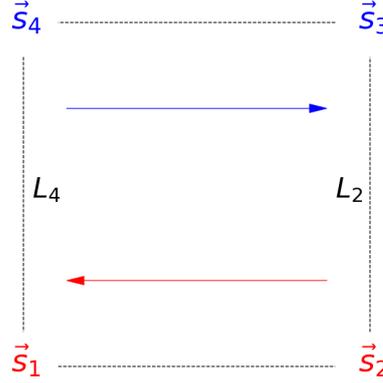


Figura C.3: Se muestra el caso donde los espines \vec{s}_1 y \vec{s}_2 pertenecen a un cluster y los espines \vec{s}_3 y \vec{s}_4 a otro. Las flechas indican la dirección de la trayectoria alrededor de cada cluster.

B.2. Tres clusters

Analicemos el caso donde los espines de una plaqueta pertenecen a tres clusters. Para fines explicativos suponemos que \vec{s}_1 y \vec{s}_2 pertenecen a un cluster denotado por \mathcal{C}_i , y los espines \vec{s}_3 y \vec{s}_4 pertenecen a los clusters \mathcal{C}_j y \mathcal{C}_k , respectivamente. Entonces, la trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_i son los links consecutivos L_2-L_4 (color rojo); la trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_j son los links consecutivos L_3-L_2 (color verde); y la trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_k son los links consecutivos L_4-L_3 (color azul), como se muestra en la Fig. C.4.

Primero, consideremos que la plaqueta está asociada al cluster \mathcal{C}_i , esto indica que los links L_2 y L_4 pasan por puntos distintos. En la Fig. C.4a se muestra el ejemplo donde L_2 pasa por A y L_4 pasa por B ; y el punto por el que pasa el link L_3 está denotado como X para considerar las dos posibilidades. Si el link L_3 pasa por A , entonces la trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_j (color verde) pasa por $A-B$, y la trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_k (color azul) pasa por $A-A$, por lo que la plaqueta queda asociada a los clusters \mathcal{C}_i y \mathcal{C}_j . En cambio, si L_3 pasa por B , la

trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_j (color verde) pasa por $B-B$, y la trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_k (color azul) pasa por $A-B$, entonces la plaqueta queda asociada a los clusters \mathcal{C}_i y \mathcal{C}_k . En ambos casos, la plaqueta queda asociada a dos clusters.

Ahora, supongamos que la plaqueta no está asociada al cluster \mathcal{C}_i , esto indica que el link L_2 y el link L_4 pasan por el mismo punto. En la Fig. C.4b se muestra el caso donde ambos links pasan por A ; y el punto por el que pasa el link L_3 está denotado como X para considerar los dos posibles casos. Si el link L_3 pasa por A , la plaqueta no está asociada a ningún cluster porque la trayectoria alrededor de cada cluster pasa por $A-A$. En cambio, si L_3 pasa por B , la trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_j (color verde) pasa por $B-A$, y la trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_k (color azul) pasa por $A-B$, por lo tanto, la plaqueta queda asociada a los clusters \mathcal{C}_j y \mathcal{C}_k . De igual manera, la plaqueta sólo queda asociada a dos cluster o a ninguno, según sea el caso.

En los dos ejemplos antes mencionados, el punto por el que pasa el link L_3 determina cuales son los clusters asociados a la plaqueta, sin embargo, vemos que siempre son dos o ninguno. A pesar de usar un ejemplo en particular, esto nos da una noción de lo que sucede en las demás posibles configuraciones. Lo cual, nos ayuda a descartar la posibilidad de que una plaqueta quede asociada a uno o tres clusters.

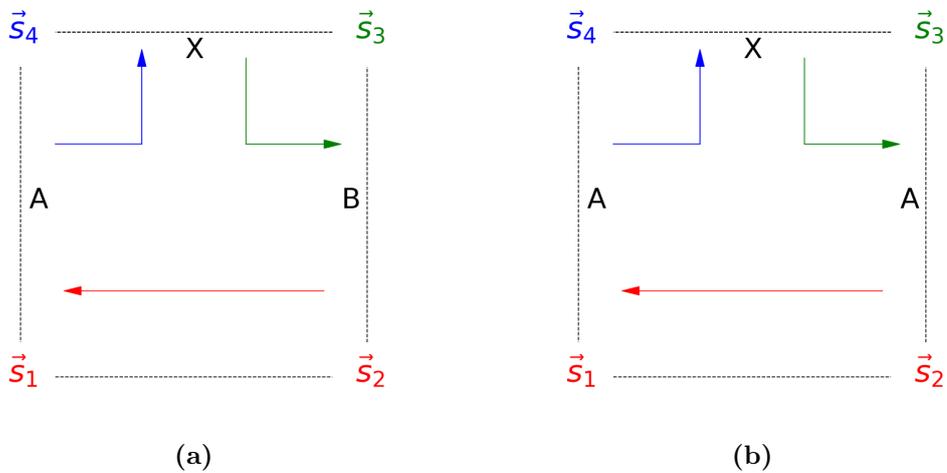


Figura C.4: Se muestra el caso donde los espines \vec{s}_1 y \vec{s}_2 pertenecen a un mismo cluster y los espines \vec{s}_3 y \vec{s}_4 pertenecen a distintos clusters. Las flechas de color indican la trayectoria alrededor de cada cluster.

B.3. Cuatro clusters

Ahora, analicemos el caso donde los cuatro espines de una plaqueta pertenecen a cuatro clusters distintos. Para fines explicativos, decimos que los espines \vec{s}_1 , \vec{s}_2 , \vec{s}_3 y \vec{s}_4 pertenecen a los clusters \mathcal{C}_i , \mathcal{C}_j , \mathcal{C}_k y \mathcal{C}_l , respectivamente. Entonces, la trayectoria alrededor del cluster \mathcal{C}_i consiste de los links consecutivos L_1-L_4 (color rojo); la trayectoria de \mathcal{C}_j consiste de los links consecutivos L_2-L_1 (color magenta); para \mathcal{C}_k consiste de los links consecutivos L_3-L_2 (color verde); y para \mathcal{C}_l consiste de los links consecutivos L_4-L_3 (color azul), como se muestra en la Fig. C.5.

Si todos los links pasan por el mismo punto A o B , entonces la plaqueta no está asociada a ningún cluster.

Recordemos que la plaqueta sólo está asociada a los clusters cuya trayectoria pasa por $A-B$ o $B-A$. Si tres links pasan por el mismo punto y el link restante pasa por el punto contrario a los tres anteriores, como se muestra en la Fig. C.5a, entonces la trayectoria alrededor de los clusters \mathcal{C}_k y \mathcal{C}_l cumplen lo antes mencionado. De manera que la plaqueta queda asociada a estos dos clusters. Las trayectorias de los clusters \mathcal{C}_i y \mathcal{C}_j (rojo y magenta), ambas pasan por $A-A$, por lo que la plaqueta no se le puede asociar a estos clusters.

Si dos links pasan por A y los otros dos por B , como se muestra en la Fig. C.5b, de igual manera la plaqueta sólo está asociada a dos clusters, en el ejemplo mostrado, a los clusters \mathcal{C}_i y \mathcal{C}_k porque su trayectoria pasa por $A-B$ (color rojo) y $B-A$ (color verde), respectivamente. La trayectoria de \mathcal{C}_j (color magenta) pasa por $A-A$ y la trayectoria de \mathcal{C}_l (color azul) pasa por $B-B$, por lo que ambos clusters quedan descartados.

Para configuraciones similares a las mostradas en la Fig. C.5, es evidente que la plaqueta siempre va a estar asociada a dos clusters y quedan descartados los casos donde la plaqueta está asociada a uno o tres clusters.

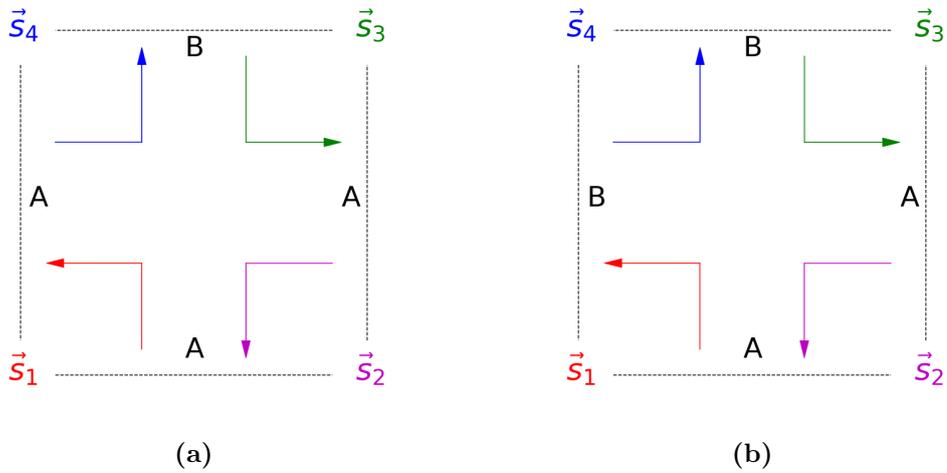


Figura C.5: Se muestran dos ejemplos donde cada espín de la plaqueta pertenece a un cluster distintos. Las flechas de color representan la dirección de la trayectoria alrededor de cada cluster.

Ahora, veamos la configuración que se muestra en la Fig. C.6. En este caso, aparentemente, la trayectoria para cada cluster pasa por $A-B$ o $B-A$, según sea el caso. Esto indica que dicha plaqueta está asociada a los cuatro clusters, lo cual es contradictorio con todo lo antes mencionado. Sin embargo, dicha configuración no es posible.

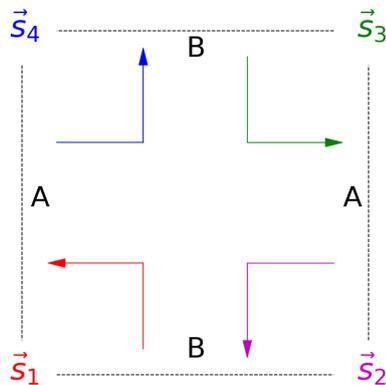


Figura C.6: Se muestra un ejemplo donde cada espín pertenece a un cluster distinto. Las flechas de color representan la dirección de la trayectoria alrededor de cada cluster. Además, está señalado el punto por el que pasa cada link. Esta configuración, aparentemente, causa que la plaqueta esté asociada a los cuatro clusters. Sin embargo, dicha configuración no es posible.

Para mostrar que la configuración de la Fig. C.6 no es posible, iremos “colocando” los espines de manera que vayamos construyendo dicha configuración, para que al final notemos una inconsistencia que causa que dicha configuración no se pueda obtener.

Primero, coloquemos al espín \vec{s}_1 de manera arbitraria, como se muestra en la Fig. C.7a. Para que link L_1 pase por B , necesariamente el espín \vec{s}_2 debe estar en la región sombreada mostrada en la Fig. C.7b, ya que de otro modo el arco de conexión mínimo entre estos dos espines, no pasaría por B . Ahora, fijemos el espín \vec{s}_2 , teniendo en cuenta la restricción antes mencionada. Para que el link L_2 pase por A , el espín \vec{s}_3 necesariamente debe estar en la región sombreada de la Fig. C.7c, ya que de otro modo, el arco de conexión mínimo no pasaría por A . De igual manera, fijamos \vec{s}_3 con la restricción antes mencionada. Para que el link L_3 pase por B , necesitamos que \vec{s}_4 esté en la región sombreada de la Fig. C.7d, pero al fijar \vec{s}_4 en esta región, causa que el arco de conexión mínimo entre el espín \vec{s}_1 y \vec{s}_4 pase forzosamente por B . Entonces, el link L_4 no pasa por el punto A , como sería de esperarse por la Fig. C.6. Por lo tanto, no es posible construir la configuración mostrada en la Fig. C.6, lo cual descarta la posibilidad de que una plaqueta esté asociada a cuatro clusters.

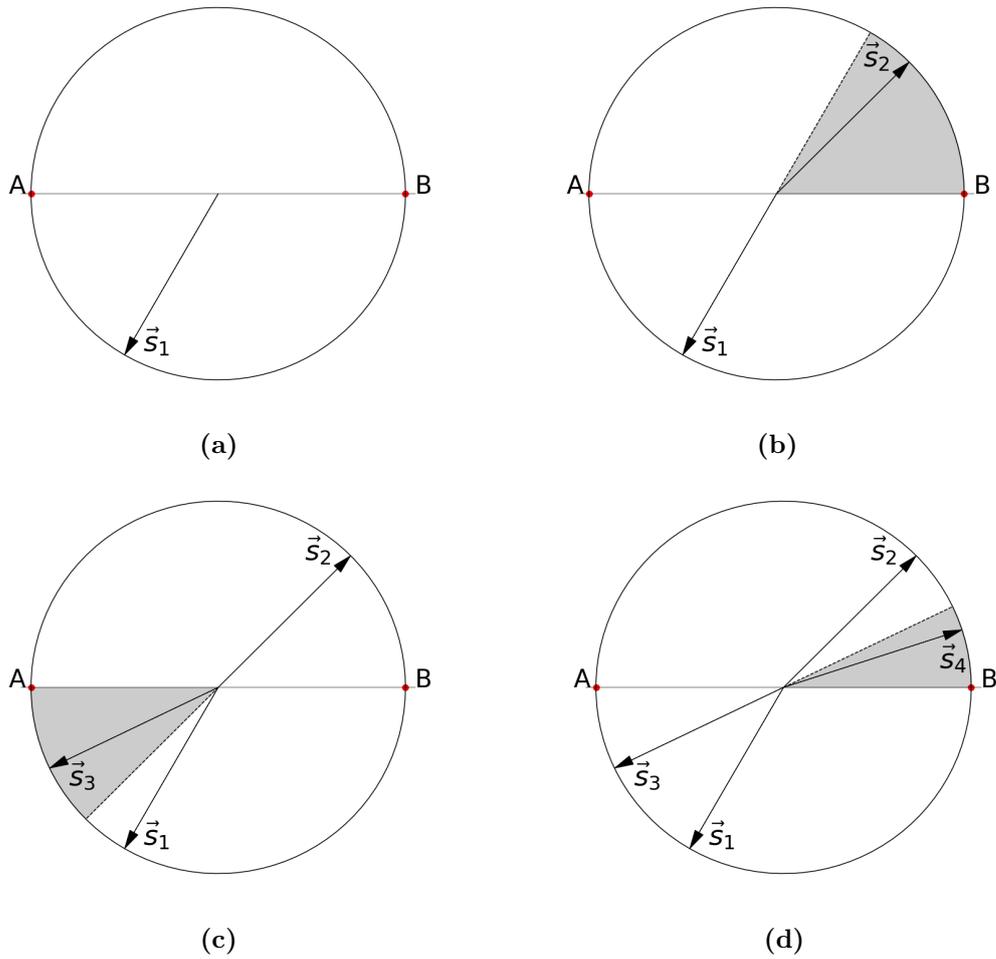


Figura C.7: Se muestra una forma de tratar de crear una configuración que cumpla que los links L_1 , L_2 , L_3 y L_4 pasen por los puntos B , A , B y A , respectivamente, como se muestra en la Fig. C.6. Si fijamos el espín \vec{s}_1 , para que el link L_1 pase por B , el espín \vec{s}_2 está restringido a estar en el área sombreada mostrada en (b). Una vez que hemos fijado los espines \vec{s}_1 y \vec{s}_2 , para que el link L_2 pase por A , el espín \vec{s}_3 debe estar en la región sombreada en (c). De igual manera, si queremos que el link L_3 pase por B , entonces el espín \vec{s}_4 debe estar en la región sombreada en (d). Sin embargo, al hacer esto, notamos que el arco de conexión mínimo entre \vec{s}_4 y \vec{s}_1 pasa forzosamente por B y no por A , como era de esperarse. Lo que ayuda a concluir que no es posible construir una configuración como la que se muestra en la Fig. C.6.

Bibliografía

- [1] J. M. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford University Press, 1992. [2](#), [3](#), [6](#)
- [2] L. Onsager. Crystal Statistics. I. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, **65**, 1944. [3](#), [9](#)
- [3] L. E. Reichl. *A Modern Course in Statistical Physics*. John Wiley and Sons, 1998. [3](#)
- [4] N. Goldenfeld. *Lectures on phase transitions and the renormalization group*. CRC Press, 2018. [10](#), [14](#)
- [5] H. Nishimori y G. Ortiz. *Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 2011. [3](#), [9](#), [10](#), [14](#)
- [6] M. L. Bellac, F. Mortessagne y G. G. Batrouni. *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*. Cambridge University Press, 2004. [4](#)
- [7] D. P. Landau y K. Binder. *A Guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2009. [5](#), [6](#), [16](#), [18](#), [22](#)
- [8] M. E. J. Newman y G. T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 1999. [6](#), [16](#), [18](#)
- [9] V. G. Vaks y A. I. Larkin. On phase transitions of second order. *Sov. Phys.-JETP*, **22**(3):678–687, 1966. [7](#), [32](#)
- [10] R. G. Bowers y G. S. Joyce. Lattice model for the λ transition in a Bose fluid. *Phys. Rev. Lett.*, **19**(11):630–632, 1967. [7](#), [32](#)
- [11] Scientific Background on the Nobel Prize in Physics 2021. *The Royal Swedish Academy of Sciences*, 2021. [8](#)

-
- [12] G. Parisi. Infinite number of order parameters for spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, **43**(23), 1979. [8](#)
- [13] G. Parisi. Toward a mean field theory for spin glasses. *Phys. Lett.*, **73 A**(3), 1979.
- [14] G. Parisi. Order parameter for spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, **50**(24), 1983. [8](#)
- [15] F. Wegner. Spin-ordering in a planar classical Heisenberg model. *Z. Physik*, **206**:465–470, 1967. [8](#), [24](#)
- [16] N. D. Mermin y H. Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, **17**(22):1133–1136, 1966. [10](#)
- [17] P. C. Hohenberg. Existence of long-range order in one and two dimensions. *Phys. Rev.*, **158**(2):383–386, 1966. [10](#)
- [18] S. R. Coleman. There are no Goldstone bosons in two-dimensions. *Commun. Math.*, **31**:259–264, 1973. [10](#)
- [19] 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**(6):1087–1092, 1953. [17](#)
- [20] R. H. Swendsen y J.-S. Wang. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. Lett.*, **58**(2):86–88, 1987. [17](#)
- [21] U. Wolff. Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, **62**(4):361–364, 1989. [18](#), [20](#)
- [22] U. Wolff. Collective Monte Carlo updating in a high precision study of the XY model. *Nuc. Phys*, **B 322**:759–774, 1989. [18](#), [20](#)
- [23] J. Hoshen y R. Kopelman. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Phys. Rev. B.*, **14**(8):3438–3445, 1976. [20](#), [69](#)
- [24] H. E. Stanley. Dependence of critical properties on dimensionality of spins. *Phys. Rev. Lett.*, **20**(12):589–592, 1968. [24](#)
- [25] M. A. Moore. Additional evidence for a phase transition in the plane-rotator and classical Heisenberg models for two-dimensional lattices. *Phys. Rev. Lett.*, **23**(15):861–863, 1968. [24](#)

- [26] B. J. Alder y T. E. Wainwright. Phase transition in elastic disks. *Phys. Rev.*, **127**(2), 1962. [25](#)
- [27] V. L. Berezinskiĭ. Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group I. Classical systems. *Sov. Phys*, **32**(3):493–500, 1970. [25](#)
- [28] V. L. Berezinskiĭ. Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group II. Quantum systems. *Sov. Phys*, **34**(3):610–616, 1971. [25](#)
- [29] J. M. Kosterlitz y D. J. Thouless. Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids. *J. Phys. C:Solid State Phys*, **5**:124–126, 1972. [25](#)
- [30] J. M. Kosterlitz y D. J. Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *J. Phys. C:Solid State Phys*, **6**:1181–1203, 1973. [30](#), [31](#), [32](#)
- [31] J. M. Kosterlitz. The critical properties of the two-dimensional XY model. *J. Phys. C:Solid State Phys*, **7**:1046–1060, 1974. [30](#), [31](#), [32](#)
- [32] W. Bietenholz y U. Gerber. Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless transition and the Haldane conjecture: highlights of the Physics Nobel Prize 2016. *Rev. Cub. Fis.*, **33**:156–168, 2016. [25](#)
- [33] P. M. Chaikin y T. C. Lubensky. *Principles of condensed matter physics*. Cambridge University Press, 1995. [25](#), [33](#)
- [34] P. Minnhagen. The two-dimensional Coulomb gas, vortex unbinding and superfluid-superconducting films. *Rev. Mod. Phys*, **59**(4):1001–1066, 1987. [32](#)
- [35] M. E. Fisher, M. N. Barber y D. Jasnow. Helicity modulus, superfluidity, and scaling in isotropic systems. *Phys. Rev. A.*, **8**(2):1111–1123, 1973. [33](#)
- [36] S. Teitel y C. Jayaprakash. Phase transitions in frustrated two-dimensional XY models. *Phys. Rev. B*, **27**(1):598–601, 1983. [33](#)
- [37] P. Olsson y P. Minnhagen. On the helicity modulus, the critical temperature and Monte Carlo simulations for the two-dimensional XY-model. *Physica Scripta*, **43**:203–209, 1991.
- [38] N. Schultka y E. Manousakis. Finite-size scaling in two-dimensional superfluids. *Phys. Rev. B*, **49**(17):12071–12077, 1994.

- [39] M. Hasenbusch. The two-dimensional XY model at the transition temperature: a high-precision Monte Carlo study. *J. Phys. A*, **381**:5869–5883, 2005. [36](#), [46](#), [62](#), [63](#)
- [40] W. Bietenholz, U. Gerber y F. G. Rejón-Barrera. Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless transition with a constraint lattice action. *J. Stat. Mech.*, P12009, 2013. [33](#)
- [41] D. R. Nelson y J. M. Kosterlitz. Universal jump in the superfluid density of two-dimensional superfluids. *Phys. Rev. Lett.*, **39**(19):1201–205, 1977. [36](#)
- [42] P. Minnhagen y G. G. Warren. Superfluid density of a two-dimensional fluid. *Phys. Rev. B*, **24**(5):2526–2532, 1977. [36](#)
- [43] N. V. Prokof'ev y B. V. Svistunov. Two definitions of superfluid density. *Phys. Rev. B*, **61**(17):11282–11284, 2000. [36](#)
- [44] W. Bietenholz, J. C. Pinto Barros, S. Caspar, M. Hornung y U.-J. Wiese. Meron and semi-vortex-clusters as physical carriers of topological charge and vorticity. *Proceedings of Science Lattice 2019*, 2019. [38](#), [44](#)
- [45] W. Bietenholz, A. Pochinsky y U.-J. Wiese. Meron-Cluster simulation of the θ vacuum in the 2D O(3) model. *Phys. Rev. Lett.*, 75(24):4527, 1995. [44](#)
- [46] P. G. Hoel, S. C. Port y C. J. Stone. *Introduction to Stochastic Processes*. Houghton Mifflin, 1992. [66](#), [68](#)
- [47] A. Al-Futaisi y T. W. Patzek. Extension of Hoshen-Kopelman algorithm to non-lattice environments. *Physica A*, **321**:665–678, 2003. [69](#)