Transición de fase BKT 000		Resultados 0000000

Semi-vórtices: Una nueva perspectiva de la transición BKT para el modelo XY bidimensional

Brandon Gómez, Bryan Juárez & Wolfgang Bietenholz

Instituto de Ciencias Nucleares Universidad Nacional Autónoma de México

2021

A B A B A
 A
 B
 A
 A
 B
 A
 A
 B
 A
 A
 B
 A
 A
 B
 A
 A
 B
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A

1/18

Modelo XY bidimensional •	Transición de fase BKT 000		Resultados 0000000
	hidimonsional		

Lattice de $L \times L$ sitios con condiciones periódicas sobre las fronteras. En cada sitio hay un espín clásico bidimensional. Cada espín $\vec{s_i} \in S^1$, $\vec{s_i} = (\cos(\theta_i), \sin(\theta_i))$, donde el índice i = (x, y) con $x, y \in \{1, 2, ..., L\}$.



Función hamiltoniana $\mathcal{H}[\vec{s}] = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s_i} \cdot \vec{s_j}.$ $[\vec{s}]: \text{ configuración espines.}$ $\langle ij \rangle: \text{ vecinos inmediatos.}$ J: constante de acoplamiento.

• • • • • • • • • • • •

2021 2 / 18

Transición de fase BKT		
000		

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 $\vec{s_{i+\hat{1}+\hat{2}}}$.



2021

Transición de fase BKT		
000		

• Definimos la diferencia angular entre dos espines $\vec{s_i}$ y $\vec{s_j}$ como

$$\Delta heta_{i,j} = (heta_j - heta_i) \mod 2\pi \in (-\pi,\pi].$$

• Cada plaqueta tiene asociada una vorticidad dada por

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

 $q_i = 0$, ausencia de vorticidad $q_i = 1$, vórtice (V) $q_i = -1$, anti-vórtice (AV).



Image: A math a math

Transición de fase BKT		
000		

El primero en introducir el concepto de vorticidad fue Vadim Berezinskiĭ. En los años posteriores David Thouless y John Kosterlitz estudiaron el mecanismo de lo que hoy se conoce como *la transición de fase de Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless* (*BKT*).

El efecto energético que tiene un par V-AV depende de manera logarítmica de la distancia entre ellos. El término que cuantifica la interacción entre V y AV es

$$E_{
m int} \propto q_i q_j \ln(\left|\vec{r_i} - \vec{r_j}\right|),$$

 $\vec{r_i}$ y $\vec{r_j}$ son las posiciones del V o AV.

- $T < T_c$: Pares fuertemente ligados de una vorticidad total de cero.
- $T > T_c$: La presencia de múltiples V y AV perturba la correlación a largas distancias causando la transición BTK.

Algoritmo de Wolff de Multi-cluster

Este algoritmo implica la creación de múltiples **clusters** en el sistema de manera que la actualización de todos los espines que pertenezcan a un cluster sea colectiva.

Se crea un vector aleatorio \vec{r}_W tal que $|\vec{r}_W| = 1$, y la línea de Wolff I_W perpendicular a \vec{r}_W .



Se elige un espín del lattice si y se revisan los vecinos inmediatos si. Si si y si no están en el mismo semi-plano, no se crea un bond. Si están en el mismo semi-plano, se crea un bond entre los espines con probabilidad P,

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

Transición de fase BKT 000	Simulaciones de Monte Carlo ○●○	Resultados 0000000

- Se repite el paso anterior hasta que todos los links del lattice hayan sido revisados.
- 9 Una vez establecidos todos los bonds del sistema, se identifican los clusters.



Transición de fase BKT 000	Simulaciones de Monte Carlo 00●	Resultados 0000000

- Cada cluster es elegido para ser actualizado con probabilidad $p = \frac{1}{2}$. Si es elegido, todos los espines del cluster son reflejados respecto a I_W .
- Medición de las observables de interés.
- Repetir el proceso hasta obtener la estadística deseada.

Semi-vorticidad

El concepto de semi-vorticidad surge de querer asociar una vorticidad a cada cluster, de manera que dicha vorticidad sea independiente de la orientación de los demás clusters.

Los semi-vórtices son plaquetas cuya presencia de vorticidad está asociada dos clusters.

8/18

	Transición de fase BKT 000	Semi-vórtices ●00	Resultados 0000000
Configuración	de referencia		

Los espines son reflejados respecto a l_W , de manera que todos se encuentren en el mismo semi-plano de Wolff, a lo cual lo llamamos la configuración de referencia.



Izquierda: una configuración de referencia.

Derecha: semi-vórtices asociados al primer cluster. Las plaquetas azules representa los V_M y las plaquetas rojas los AV_M . イロト イヨト イヨト イヨト

Transición de fase BKT	Semi-vórtices	
	000	

Vorticidad de un cluster

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

$$Q_{\mathscr{C}} = \frac{1}{2} \big(V_{\mathcal{M}}^{\mathscr{C}} + \mathcal{A} V_{\mathcal{M}}^{\mathscr{C}} \big),$$

donde $V_M^{\mathscr{C}}$ y $AV_M^{\mathscr{C}}$ es el número de semi-vórtices asociados al cluster \mathscr{C} .

Si se tiene una configuración de n clusters, definimos la vorticidad promedio por cluster V_c como

$$V_c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Q_i.$$

y $V_{c\,2}$ de la forma

$$V_{c\,2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} Q_i^2.$$

1 10/18

Transición de fase BKT 000	Semi-vórtices 00●	Resultados 0000000

La susceptibilidad de la vorticidad denotada por χ_{V_c} ,

$$\chi_{V_c} = \langle V_{c\,2} \rangle - \langle V_c \rangle^2 \,,$$

cuantifica la dispersión del número de semi-vórtices. 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.

Transición de fase BKT		Resultados
		000000

Semi-vórtices libres



Se muestra la densidad de los semi-vórtices libres en función del inverso de la temperatura. En la sub-gráfica se muestra el efecto de tamaño finito. 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.

Transición de fase BKT		Resultados
		000000

Vorticidad de un cluster



Se muestra el número promedio de semi-vórtices por cluster.

Transición de fase BKT		Resultados
		0000000

Susceptibilidad de la vorticidad



 χ_{V_c} 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 .

Transición de fase BKT 000		Resultados 000●000

En el límite termodinámico $L \to \infty$, se esperaría que χ_{V_c} tienda a infinito para $\beta_c = 1.199$ (Hasenbusch, 2005). Para poner a prueba dicha hipótesis, procedemos a hacer un ajuste de la forma

$$\beta_{\max} = a \ln \left(b \frac{1}{L^2} + c \right),$$

donde *a*, *b* y *c* son parámetros a ajustar. De esta manera, es posible extrapolar los datos y obtener un valor aproximado de $\beta_{máx}$ para volumen infinito, el cual será nuestro primer estimador de β_c , denotado como $\hat{\beta}_{c1}$.

イロト イヨト イヨト イヨト



Puntos rojos: valor de β donde ocurre el máximo de χ_{V_c} .

Línea punteada: ajuste

Punto negro: estimador $\hat{\beta}_{c1} = 1.081 \pm 0.013$.

Si lo comparamos con el valor de β_c , tenemos que $(\beta_c - \hat{\beta}_{c1})/\hat{\sigma}_1 \approx 3$, donde $\hat{\sigma}_1 = 0.013$.

2021



Ajuste alternativo considerando β_c . Se obtiene el estimador $\hat{\beta}_{c2} = 1.111 \pm 0.001$.

Resumen y conclusiones

- En este trabajo se presentó un estudio numérico del modelo XY bidimensional usando simulaciones de Monte Carlo.
- A partir de los clusters formados con el algoritmo de Wolff fue posible introducir la nueva idea de los semi-vórtices.
- La susceptibilidad de la vorticidad χ_{V_c} es sensible a la transición BKT.
- Los resultados sugieren que el estimador $\hat{\beta}_{c1}$ es compatible con el valor de β_{c} .