

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE

FACULTAD DE CIENCIA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA



Simulación Vía Algoritmos de Cluster de Sistemas Magnéticos con Transición de Fase Cuántica

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

Alejandro Riveros Rodríguez

Profesor guía:	Dr. Guillermo Palma
Profesores Comisión:	Dr. Miguel Kiwi
	Dr. Gonzalo Gutiérrez
	Dr. Iaroslav Ispolatov
	Dr. Norman Cruz

SANTIAGO – CHILE

10 de Marzo de 2015

Simulación Vía Algoritmos de Cluster de Sistemas Magnéticos con Transición de Fase Cuántica

Alejandro Riveros Rodríguez

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

- Dr. Guillermo Palma
- Dr. Miguel Kiwi
- Dr. Gonzalo Gutiérrez
- Dr. Iaroslav Ispolatov
- Dr. Norman Cruz

.....
Director Departamento de Física

Agradecimientos

Este trabajo de tesis pudo ser llevado a cabo gracias al apoyo de instituciones y de valiosas personas. En este contexto quiero agradecer especialmente a la universidad de Bern, Suiza, por facilitarnos el cluster computacional para poder realizar las simulaciones numéricas presentadas en este trabajo. También quiero agradecer a los profesores que integran el comité, gracias por todos sus comentarios y disposición que ayudaron a contribuir para la presentación final de este trabajo. A mi tutor y profesor guía de este trabajo de tesis, el Dr. Guillermo Palma por su inmensa disposición y apoyo para mi formación como investigador. A mi compañero y amigo David Zambrano, quien siempre estuvo dispuesto para ayudar a optimizar los códigos complejos empleados para las simulaciones numéricas.

A mi familia, en particular a mi madre, padre y hermano, por la bonita convivencia de familia mostrando en todo momento apoyo incondicional, sin duda son los actores principales de mis valores humanos.

Al apoyo financiero entregado por CONICYT durante gran parte de este trabajo de tesis.

Por supuesto, también quiero agradecer a mis compañeros y amigos Vicente (Monkey), Juan Luis (Kbz), Daniela (Dani), Juan Francisco (Juanfra), Alejandro (Chico), Romina (Romí), Sebastián (Seba), con quien he disfrutado momentos muy agradables de convivencia dentro y fuera de la universidad, siempre se puede contar con ustedes para pasar una tarde agradable, tomar un café con una buena charla para discutir un poco de física o salir a un carrete, tomar un par de tragos, desconectándose derechamente del trabajo. Gracias por todos los lindos momentos que hemos pasado juntos.

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

A. Riveros

Resumen

Las simulaciones numéricas de sistemas antiferromagnéticos de espines cuánticos en presencia de un campo magnético externo se ven generalmente obstaculizados por el conocido problema del signo cuando son cuantizados en la dirección perpendicular del campo magnético. En efecto, desde el punto de vista de la representación de la integral de camino de la función partición, algunos términos de la matriz de transición resultan ser negativos, los cuales no pueden ser interpretados como factores de Boltzmann o probabilidades, y por lo tanto, esto dificulta seriamente poder realizar simulaciones numéricas eficientes para estos sistemas. Este problema del signo es esencial en las simulaciones numéricas, e imposibilita la aplicación de algoritmos de cluster estándar para el estudio de estos sistemas que presentan frustración, incluyendo sistemas con acoplamiento con fermiones.

La competencia entre las diferentes interacciones presentes en el Hamiltoniano de un sistema conduce a la no unicidad del estado fundamental, pudiendo generar un quiebre espontáneo de simetría y produciendo una transición de fase cuántica en los límites de volumen infinito y temperatura cero. Estas transiciones de fases cuánticas, a diferencia de las clásicas, ocurren a temperatura cero y poseen una correlación adicional que no poseen las clásicas. Dicha correlación conocida como entrelazamiento es la fuente que permite el almacenamiento de información y es clave para el desarrollo de la computación cuántica.

Motivado por la simulación numérica de los sistemas que presentan transiciones de fase cuánticas, en este trabajo de tesis, se escribió un código en C++ basado en el algoritmo de meron-cluster para simular los modelos cuánticos de Heisenberg antiferromagnético acoplados a un campo magnético externo constante B en una y dos dimensiones espaciales y también para escaleras de espines cuánticos en presencia de un campo magnético externo constante. En el límite de volumen infinito, se encontró evidencia numérica de una transición de fase

cuántica a temperatura muy cercana a cero, para valores muy cercanos a los puntos críticos $B_c = 2,0$ y $B_c = 4,0$, para el sistema en una y dos dimensiones espaciales, respectivamente. Los resultados numéricos obtenidos mediante este algoritmo coinciden notablemente con las predicciones analíticas de la magnetización en función del campo externo, obtenidas por el análisis del comportamiento de escala junto con las técnicas del Ansatz de Bethe, como también con simulaciones usando diferentes algoritmos como el de directed loop. Lo que confirma que el algoritmo de meron-cluster es un algoritmo seguro y confiable para simulaciones cuánticas tipo Monte Carlo y aplicable tanto para una como dos dimensiones espaciales

Además se estudió la eficiencia del algoritmo de meron cluster, estimando el tiempo de autocorrelación integrado de la densidad de la magnetización para el modelo estudiado en una dimensión, mediante un análisis de binning, aplicado a una gran serie de tiempo estocástica de dicho estimador.

El presente trabajo evidencia de manera precisa que el algoritmo de meron cluster puede ser utilizado para estudiar sistemas magnéticos de espines cuánticos que presentan competencia entre las interacciones descritas en el hamiltoniano. Más aún, el algoritmo permite el estudio para todo rango de la temperatura, lo cual incluye temperaturas muy bajas $T \rightarrow 0$. En este contexto el presente trabajo confirma que el método de simulación numérica tipo Monte Carlo cuántico permite estudiar transiciones de fases cuánticas, lo que representa una generalización al estudio numérico de transiciones de fases clásicas vía simulaciones con algoritmos de cluster o Grupo de Renormalización.

Respecto a la parte técnica numérica, aunque el problema del signo no tenga solución general, en este trabajo de tesis se pudo resolver para los modelos que fueron estudiados, preservando una ventaja esencial de los algoritmos de cluster: realizar un update de cada uno de los cluster en forma independiente con probabilidad $1/2$.

*Equations are more important to me,
because politics is for the present,
but an equation is something for eternity.*
(Albert Einstein)

*One never notices what has been done;
one can only see what remains to be done.*
(Marie Curie)

Índice general

1. Introducción	1
2. Algoritmo de Loop Cluster (LCA) y Estimadores Mejorados	9
2.1. Matriz de transferencia para sistemas magnéticos en $d = 2$	12
2.2. LCA para el modelo de Heisenberg anisotrópico de espín $s = 1/2$	15
2.3. Observables y Estimadores Mejorados.	18
3. Competencia entre Interacciones y Transición de Fase Cuántica	21
3.1. Modelo de Heisenberg en presencia de un campo magnético	22
3.2. 2 espines cuánticos acoplados a un campo magnético externo	25
3.3. Cadena de Ising en un campo transversal	27
4. Simulación Numérica de Sistemas de Espines Cuánticos con Frustración	33
4.1. Algoritmo de Meron Cluster (MCA)	37
4.2. Meron Cluster y Sectores Meron.	44
4.3. Parámetro de orden y observable mejorado.	47
5. Aplicaciones del MCA	51
5.1. Cadena de Heisenberg Antiferromagnética con Campo Magnético.	53
5.2. Red de Heisenberg Antiferromagnética en $d = 2$ con Campo Magnético.	56
5.3. Escaleras de Espines Cuánticos Antiferromagnética con Campo Magnético.	60
5.4. Proceso de Binning y Eficiencia del MCA	64
6. Conclusiones	72

Apéndices

A. Error estadístico y tiempo de autocorrelación en una simulación MC. 76

Capítulo 1

Introducción

Sistemas fuertemente acoplados son la base para describir muchos tipos de fenómenos físicos interesantes. Por ejemplo la superconductividad a alta temperatura puede ser descrita por electrones fuertemente acoplados, materiales magnéticos como los magnetos pueden ser estudiados como sistemas de espines fuertemente acoplados; la viscosidad de grupo y de cizalle de un plasma de gluones y quarks pueden ser estudiados en cromodinámica cuántica por quarks y gluones altamente acoplados. Sin embargo, la complejidad del estudio analítico de problemas de muchos cuerpos en física siempre ha sido un enorme desafío, lo que ha conducido a los físicos a estudiar estos problemas mediante simulaciones numéricas.

Mediante el método Monte Carlo se ha podido estudiar en diversas áreas de la física una gran variedad de problemas físicos, que involucran muchas partículas. Usando simulaciones tipo Monte Carlo para las interacciones microscópicas, se pueden obtener propiedades macroscópicas de los sistemas físicos, como, por ejemplo, promedios térmicos de observables en un tiempo que escala de manera polinomial con el número de partículas microscópicas que componen el sistema. La eficiencia de estas simulaciones radica en la idea de muestreo por importancia, con lo cual se evita generar todas las configuraciones permitidas por el sistema, el cual escala típicamente de manera exponencial con el número de partículas, sino más bien se generan un determinado número de configuraciones, generalmente del orden de 10^6 , en las

cuales las configuraciones más probables (configuraciones con mayor factor de Boltzmann) son generadas más a menudo en la simulación. En este proceso de muestreo por importancia una nueva configuración del sistema es generada a partir de la configuración anterior, generando una cadena de Markov.

A través de los años se han desarrollado para este método diferentes tipos de algoritmos, los primeros de update local como el de Metrópolis, han sido muy eficientes para el estudio numérico de sistemas físicos de muchos cuerpos, sin embargo, este tipo de update local resulta muy ineficiente para simulaciones cercanas a un punto crítico del sistema, lo cual se conoce como el famoso problema de critical slowing down, este problema fue solucionado para algunos sistemas físicos por los algoritmos de update no local propuestos por Swendsen-Wang [1] y U. Wolff [2] aplicados al modelo de Ising y al modelo clásico $O(N)$. A partir de éstos, diferentes tipos de algoritmos de cluster se han convertido en una herramienta cada vez más importante en el estudio de sistemas estadísticos complejos [3]-[7] y en el estudio de las propiedades fundamentales de teoría de campo en la red. [8],[9].

Por otro lado las simulaciones tipo Monte Carlo cuánticas realizadas en sistemas magnéticos frustrados sufren generalmente del severo problema del Signo [10], [11], ejemplos bien conocidos para esta clase de sistemas son sistemas antiferromagnéticos en redes no bipartitas, fermiones en dimensiones espaciales mayores que uno, sistemas antiferromagnéticos en presencia de un campo magnético externo en redes bipartitas cuando son cuantizados en la dirección perpendicular del campo, entre muchos otros. En todos estos modelos, el problema del signo se manifiesta en la representación de integral de camino de la función partición del sistema, en la cual algunos elementos de la matriz transferencia resultan ser negativos, por lo que no pueden ser interpretados como factores de Boltzmann ni como probabilidades [12]; sumado a esto, las fluctuaciones del signo en las configuraciones generadas producirían fuertes cancelaciones de los observables físicos, lo que imposibilitaría poder medir con precisión cualquier observable físico del sistema [13]. Este problema, el cual destruye completamente la ventaja del muestreo por importancia en la simulación, ha sido catalogado como un problema de clase no polinomial (NP) [14] y de acuerdo a la conjetura de que un problema de clase NP no puede ser reducido

a uno de clase polinomial (P) ($NP \neq P$) lo que significa que no existe un algoritmo que escale en un tiempo polinomial de cálculo en la simulación, que pueda resolver uno de clase NP, y por consiguiente imposibilita la existencia de una solución general para el problema del signo. Cabe destacar que la prueba rigurosa de la conjetura $NP \neq P$ sigue siendo uno de los problemas no resueltos en matemáticas.

Con el objetivo de resolver el problema del signo para algunos casos particulares, se ha propuesto diferentes algoritmos, entre los cuales podemos mencionar el algoritmo de meron-cluster (MCA) [13], [15] y el algoritmo de loop operador [12]. Estos algoritmos tienen la característica importante de la inclusión de cluster en el procedimiento de update de las configuraciones del sistema, lo cual es esencial para vencer o al menos reducir considerablemente el problema de critical slowing down [1], [2].

Además de esta dificultad técnica en el estudio de sistemas cuánticos magnéticos frustrados, estos sistemas presentan una riqueza física muy grande debido a que la competencia que se genera entre las interacciones del hamiltoniano puede provocar una transición de fase cuántica (QPT) a temperatura cero, en el límite de volumen infinito del sistema. Esta transición de fase es conducida por fluctuaciones cuánticas que prevalecen a medida que disminuye la temperatura. Dado que esta transición de fase ocurre a temperatura cero, es reflejada en el estado base del sistema, y de manera particular en la energía del estado base del sistema, el cual deja de ser una función analítica en términos de algún parámetro g del hamiltoniano, produciendo un entrecruzamiento del estado base con el primer estado excitado del sistema para un valor crítico del parámetro $g = g_c$ [16]. El parámetro externo g puede ser por ejemplo la magnitud de la interacción de campo-espín que compite con la interacción de espín-espín o bien una anisotropía en la interacción espín-espín.

Debido a que las transiciones de fase en un modelo clásico son producidas únicamente por fluctuaciones térmicas, no puede existir una transición de fase cuántica en un modelo clásico a temperatura cero; ya que a medida que disminuye la temperatura hasta ser igual a cero el sistema se congela en el estado base y estas fluctuaciones térmicas gradualmente desaparecen. Por otro lado, los sistemas cuánticos si evidencian fluctuaciones cuánticas, las

cuales son determinadas por el principio de incerteza de Heisenberg, inclusive a temperatura cero. Por lo tanto para un modelo cuántico la región $T > 0$ en la cercanía de una transición de fase ofrece una interesante interacción entre los efectos producidos por fluctuaciones cuánticas y térmicas. Al igual que las transiciones de fases clásicas (CPT), QPT se caracterizan por la divergencia de la longitud de correlación ξ del sistema en el punto crítico y comportamiento de invarianza de escala en las vecindades del punto crítico [17], sin embargo a diferencia de las transiciones de fases clásicas, QPT poseen una correlación adicional que no poseen las CPT, dicha correlación conocida como entrelazamiento es la fuente que permite la información y computación cuántica [17], [18], [19], [20].

Debido a que QPT ocurren a temperatura cero, pareciese ser sólo un problema académico teórico, sin embargo existen varios estudios experimentales de transiciones de fases cuánticas observados, entre los cuales podemos mencionar:

- La transición de fase cuántica del estado ferromagnético a un estado paramagnético en el aislante LiHoF_4 en presencia de un campo magnético transversal al eje cristalino de los iones Ho. En ausencia de este campo magnético el estado base es ferromagnético. Bitko, Rosenbaum y Aeppli [21], colocaron un campo magnético transversal al eje cristalino de este material. Dicho campo magnético produjo una competencia entre las interacciones entre los iones Ho y la interacción del campo con estos iones, y a suficiente magnitud de este campo se destruyó el orden magnético de largo alcance, produciéndose una QPT.

- Experimentos de átomos ultra fríos en redes ópticas realizadas por Greiner, Bloch y colaboradores [22] evidenciaron, por medio de un potencial periódico aplicado mediante una red óptica sobre los átomos de ^{87}Rb , una transición de fase cuántica desde un condensado de Bose de estado superfluido a una fase aislante

En esta tesis se realizó mediante el MCA una simulación numérica para el modelo cuántico antiferromagnético de Heisenberg (AFH) de espín $1/2$ acoplado a un campo magnético uniforme en una y dos dimensiones espaciales, el cual experimenta una transición de fase cuántica [17], [23], [24] y para una escalera antiferromagnética de espines cuánticos en presencia de

un campo magnético externo uniforme. Numerosos estudios se han realizado en el modelo de Heisenberg antiferromagnético de espín $1/2$, ya que este modelo puede describir bastante bien varios sistemas físicos, entre los cuales podemos mencionar los cupratos sin dopar, los cuales poseen planos Cu – O bidimensionales con interacciones antiferromagnéticas. Más aún, nuevas fluctuaciones cuánticas en los planos CuO_2 (comunes para todos estos cupratos dopados) pueden ser la causa de superconductividad para altas temperaturas [25], [26]. Debido a que hay muchos materiales quasi bidimensionales que poseen una estructura de red cuadrada, por ejemplo los cupratos $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ y $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, entonces realizar estudios de la física a bajas energías de estos sistemas considerando el modelo AFH en dos dimensiones podría dar luz al estudio estos materiales. Aunque un estudio riguroso de materiales dopados es extremadamente difícil de realizar, los precursores no dopados son ordenados en forma antiferromagnética y pueden ser modelados mediante el modelo AFH.

Desde el punto de vista numérico, la eficiencia del MCA, como cualquier algoritmo de cluster estandar, se basa en la independencia de flip con probabilidad $1/2$ de cada uno de los clusters construidos por el algoritmo. Esta característica fundamental se rompe de manera explícita para el modelo en estudio si se elige la dirección de cuantización en la misma dirección del campo magnético aplicado; lo que genera que a bajas temperaturas y/o para grandes valores de campo magnético, solo puedan ser invertidos los valores de espines de algunos clusters con probabilidades exponencialmente pequeñas, lo que estropea la eficiencia del algoritmo. Al escoger el eje de cuantización en una dirección perpendicular a la del campo magnético, se restaura la simetría $Z(2)$ con esto, se permite invertir los valores de espines de cada cluster con probabilidad $1/2$ de forma independiente entre clusters, pero aparece un severo problema del signo, lo que constituye un obstáculo para la eficiencia de los algoritmos de clusters estándar; este problema del signo puede ser resuelto mediante el MCA.

Cabe mencionar, que en el artículo [27] se propuso un algoritmo alternativo, el cual supera la dificultad mencionada de update de clusters. De hecho, en dicha referencia se introduce el concepto de directed loop tanto para expansiones en series estocásticas como para integrales de camino de la función partición tipo Monte Carlo cuántico y lo aplican con éxito al modelo

de Heisenberg anisotrópico XXZ $s = 1/2$ en presencia de un campo magnético externo. Este algoritmo que es técnicamente muy complicado de implementar, funciona de manera eficaz en todas las regiones de los parámetros de campo y anisotropía uniaxial, y debiera ser más eficiente que el algoritmo de gusanos [28]. Los autores proponen como pregunta abierta, si el concepto de directed loop propuesto podría ser usado para ampliar el concepto de meron con el objetivo de abordar el problema del signo.

En el mismo espíritu, el MCA [13] fue propuesto como una extensión natural del algoritmo de Loop Cluster (LCA) [29],[30] para solucionar el problema del signo presente en sistemas con frustración dinámica. Aunque el MCA fue propuesto hace más de una década y represente una solución para la discontinuidad del algoritmo en el sentido discutido en [27], su eficiencia no ha sido medida y reportada de manera adecuada. Con el objetivo de realizar dicho estudio, en este trabajo de tesis se implementó el algoritmo de meron-cluster ([15],[13]) para solucionar el problema del signo para el modelo AFH en presencia de un campo externo, para todo rango de magnitud del campo magnético. Se combinó el algoritmo con el concepto de estimadores mejorados para medir la densidad de la magnetización del sistema, el cual corresponde al parámetro de orden del modelo. Los resultados numéricos obtenidos en este trabajo concuerdan notablemente con los valores obtenidos en el artículo de Chandrasekharan et al [15] para escaleras de espines AFH, con los obtenidos por medio de leyes de comportamiento de escala y extrapolaciones de estas para el modelo AFH en una y dos dimensiones espaciales ([31], [32]), como también con los resultados numéricos para la densidad de la magnetización en una y dos dimensiones, obtenidas mediante el algoritmo alternativo de directed loop [27].

Con el objetivo de medir la independencia estadística de las configuraciones generadas por el MCA, en este trabajo de tesis, también se estimó el tiempo de autocorrelación integrado τ_{int} por medio de un método de binning [33]. Para esto se analizó una gran serie de tiempo estadística para la densidad de la magnetización, obtenida mediante la dinámica estocástica del MCA, y de esta forma se pudo obtener un valor estimado para τ_{int} . Este análisis entrega una cota inferior del número de pasos Monte Carlo (sweeps) requeridos para estimar de manera confiable y segura los valores de expectación de los observables mediante promedios aritméticos

de los estimadores de dichos observables durante la cadena de Markov.

Finalmente cabe destacar, que uno de los intereses principales del estudio de estos sistemas son el estudio de QPTs que se generan por la competencia entre las interacciones (como fue discutido anteriormente). En este trabajo se estudió el comportamiento de la densidad de la magnetización y de su primera derivada para el modelo AFH y se encontró evidencia numérica de una transición de fase cuántica de segundo orden para valores muy cercanos a los valores críticos de campo magnético $B_c = 2$ y $B_c = 4$, para el sistema en una y dos dimensiones espaciales, respectivamente, lo cual son consistentes con los puntos críticos de segundo orden conjeturados en [23] y [24], respectivamente.

Todas las simulaciones numéricas presentadas en este trabajo de tesis fueron realizadas utilizando el código C++ (escrito por el autor de este manuscrito) basado en el algoritmo de meron cluster. Estas simulaciones fueron llevadas a cabo utilizando el cluster de computadores de la Universidad de Bern, en Suiza. Este cluster computacional cuenta con 96 nodos de 8 núcleos (NCPU) de 23,5 Gb de memoria ram cada uno de ellos, lo que genera un total de 768 procesadores y un total de 2256 Gb de memoria ram. Este cluster computacional fue compartido con diferentes grupos de investigadores, por lo cual se pudo contar con 100 de estos procesadores para simular numéricamente. Cada uno de los valores numéricos presentados en este manuscrito (cada punto de un gráfico) produjo, para el caso del modelo en una dimensión espacial, tiempos de cálculo computacional entre uno a dos meses. Para para el caso bidimensional la duración de los tiempos de calculo variaron entre uno a tres meses.

El presente trabajo de tesis está organizado de la siguiente manera: en el capítulo 2 se explica el algoritmo de Loop Cluster (LCA) [29], [30], el cual es la base del algoritmo de meron-cluster empleado en esta tesis. El LCA está basado en el método de Monte Carlo cuántico y resulta muy eficiente para el estudio de sistemas magnéticos de espines cuánticos no frustrados. En el capítulo 3 se muestra de manera explícita estudiando analíticamente el modelo de Ising en un campo transversal [34] como la competencia entre las interacciones microscópicas del sistema generan una transición de fase cuántica en el límite termodinámico a temperaturas cercanas a cero. Esta bien conocida solución es a través de la famosa transformación

de Jordan-Wigner [35], la cual es una herramienta muy poderosa para transformar modelos de espines $1/2$ a modelos de fermiones sin espines. En el capítulo 4, se explica en detalle el algoritmo de meron cluster, propuesto hace una década [13], [15], el cual fue implementado en esta tesis para el estudio de algunos sistemas frustrados de espines cuánticos, además se explica como el MCA soluciona el problema del signo que se podría generar en sistemas de espines cuánticos frustrados dinámicamente. En el capítulo 5 se muestran resultados numéricos obtenidos mediante el MCA implementado en este trabajo para el modelo antiferromagnético de Heisenberg acoplado a un campo magnético externo, en una y dos dimensiones espaciales y para escaleras antiferromagnéticas de espines cuánticos. Finalmente en el capítulo 6 se habla de las conclusiones de los resultados obtenidos y se plantean problemas abiertos para estudiar en futuros trabajos de investigación.

Con respecto a las unidades de los parámetros y variables físicas, en esta tesis se utilizó el método estándar adimensional, teniendo en cuenta que las dimensiones están implícitas, por ejemplo el valor del campo magnético B estará escrito en unidades de la constante de acoplamiento entre espines J , la temperatura T en unidades de J/k_B , donde k_B es la constante de Boltzmann. Los tamaños de red L_i en unidades del espaciado elemental de red a . Respecto a la notación matemática empleada, se utilizará el acento circunflejo para denotar a los operadores y los vectores serán destacados en negrita, al igual que los vectores unitarios. Por ejemplo \hat{A} es un operador y $\hat{\mathbf{A}}$ es un operador vectorial, sin embargo \mathbf{e}_i es un vector unitario en la dirección i .

Finalmente se considerarán las constantes fundamentales en unidades naturales $\hbar = k_B = 1$, por lo que se utilizarán las relaciones (entre las más utilizadas):

- $\beta = 1/T$, para el inverso de la temperatura.
- $\hat{S}^{(i)} = \hat{\sigma}^{(i)}/2$, para la componente i del operador de espín $S = 1/2$ donde $\hat{\sigma}^{(i)}$ corresponde a la i -ésima matriz de Pauli.

Capítulo 2

Algoritmo de Loop Cluster (LCA) y Estimadores Mejorados

En el artículo [29] se desarrolló un algoritmo muy poderoso para estudiar numéricamente sistemas de espines cuánticos, el cual está basado en una simulación del tipo Monte Carlo. Este algoritmo se basa principalmente en transformar un sistema de espines cuánticos $\hat{\mathbf{S}}_x$, definidos en una red $\bar{\Lambda}$ de d dimensiones espaciales, en un sistema de espines clásicos S_x definidos en una red auxiliar Λ de $d + 1$ dimensiones, la cual está formada por un conjunto de time slices $\{\Lambda_\tau\}$, i.e: $\Lambda = \sum_\tau \Lambda_\tau$. En la Figura 2.1 se muestra gráficamente esta transformación para el caso $d = 2$.

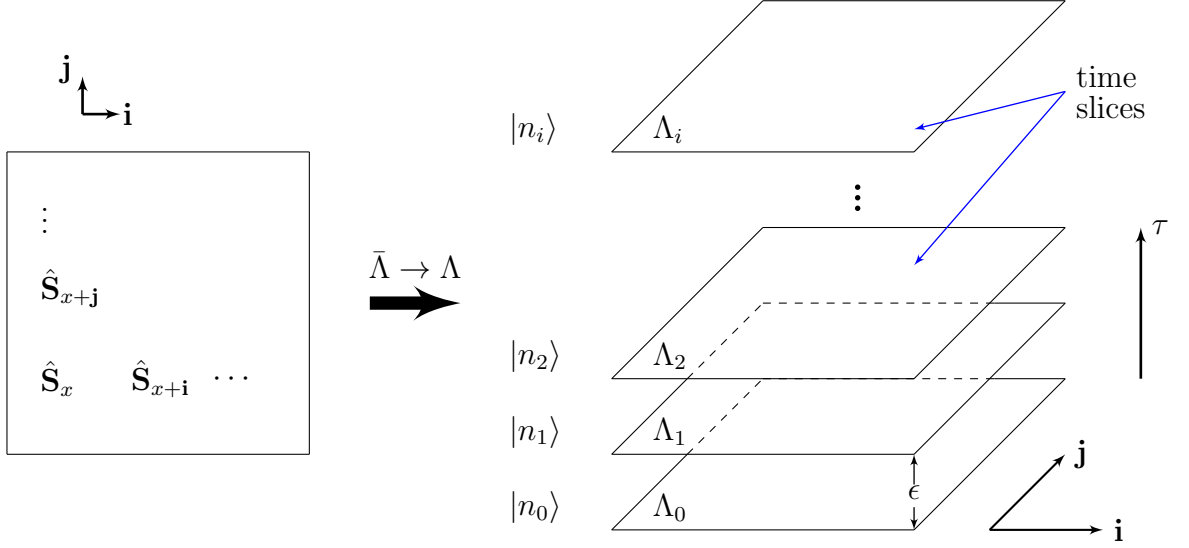


Figura 2.1: Esquema de la transformación desde una red $\bar{\Lambda}$ de d dimensiones de espines cuánticos a una red auxiliar Λ de $d + 1$ dimensiones de espines clásicos, que realiza el LCA para el caso $d = 2$, a la izquierda se muestra la red original de espines cuánticos y a la derecha la red auxiliar formada por un conjunto de time slices Λ_i . El estado $|n_i\rangle$ denota la configuración de los espines en el time slice Λ_i de la red auxiliar.

La configuración de los espines en la red auxiliar entre 2 time slices consecutivos $|n_i\rangle$, $|n_{i+1}\rangle$ vienen determinadas por la matriz de transferencia $\hat{\mathcal{T}}$ del sistema definida en la función partición al ser escrita como una integral de camino.

$$\begin{aligned}
 Z &= \text{Tr}[\exp(-\beta\hat{\mathcal{H}})] \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr} \left[\prod_{i=1}^k \exp(-\epsilon\hat{H}_i) \right]^N, \tag{2.1}
 \end{aligned}$$

acá $\epsilon = \beta/N$ corresponde al espaciado elemental de red en la dimensión extra de la red auxiliar. Para obtener esta última igualdad, se ha separado el hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ en k términos: $\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^k \hat{H}_i$ y posteriormente se ha aplicado una generalización de la fórmula de Trotter [36]. La manera de descomponer el hamiltoniano del sistema en k términos no es única, el objetivo es asegurar que cualquier término perteneciente a un determinado \hat{H}_j conmute con el propio \hat{H}_j .

Para escribir la función partición del sistema como una integral de camino dividimos el intervalo $[0, \beta]$ en Nk intervalos de tamaño ϵ , cada uno de estos intervalos están definidos por un determinado time slice conformado por el dominio Λ_α , $\alpha = 0, 1, 2, \dots, Nk$. El conjunto de los $Nk + 1$ time slices forman el dominio total de la red auxiliar Λ de $d + 1$ dimensiones (Figura 2.1). Formalmente esto se logra al introducir Nk identidades de la forma $\sum_{n_\tau} |n_\tau\rangle \langle n_\tau|$ entre los Nk términos $\exp(-\epsilon \hat{H}_i)$, donde:

$$|n_\tau\rangle = \prod_{x \in \Lambda_\tau} |S_x\rangle \equiv \prod_{x \in \bar{\Lambda}} |S(x, \tau)\rangle \quad , \quad (2.2)$$

claramente la elección de la base $|S_x\rangle$ no es única, depende de la dirección de cuantización realizada, sin pérdida de generalidad podemos elegir la base $|S_x\rangle$ como aquella compuesta por los estados en los cuales los operadores \hat{S}_x^3 son diagonales.

Por propiedad de la traza el último time slice definido por el estado $|n_{kN}\rangle$ es equivalente al primer time slice definido por el estado $|n_0\rangle$.

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n_0, n_1, \dots, n_{kN-1}} \langle n_0 | e^{-\epsilon \hat{H}_1} | n_1 \rangle \langle n_1 | e^{-\epsilon \hat{H}_2} | n_2 \rangle \dots \langle n_{k-1} | e^{-\epsilon \hat{H}_k} | n_k \rangle \langle n_k | e^{-\epsilon \hat{H}_1} | n_{k+1} \rangle \dots \langle n_{kN-1} | e^{-\epsilon \hat{H}_k} | n_0 \rangle \quad , \quad (2.3)$$

la Ecuación (2.3) determina la manera como interactúan los espines cuánticos del modelo original en la red auxiliar Λ . La interacción descrita por \hat{H}_i aparece en la red auxiliar de $d + 1$ dimensiones entre los time slices consecutivos definidos en τ_{i-1+kl} y τ_{i+kl} , donde $l = 0, 1, \dots, N - 1$; por ejemplo la interacción de espines descrita por el operador \hat{H}_1 se manifiesta entre 2 time slices definidos en τ_0 y τ_1 . Esta misma interacción \hat{H}_1 se hace patente nuevamente entre los 2 time slices definidos por τ_k y τ_{k+1} y así sucesivamente con un intervalo de k time slices.

2.1. Matriz de transferencia para sistemas magnéticos interactuando entre primeros vecinos en $d = 2$.

Consideremos una red de \mathcal{N} espines cuánticos ubicados en cada sitio de una red rectangular de volumen $\bar{V} = L_x L_y$, de longitudes pares, interactuando entre primeros vecinos y con condiciones de borde periódicas.

En el caso de una red rectangular, para poder escribir la función partición aplicando una generalización de la fórmula de Trotter como la realizada en la Ecuación (2.1), basta con separar el hamiltoniano en 4 términos:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\langle x,y \rangle} \hat{h}_{x,y} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 + \hat{H}_4 \quad , \quad (2.4)$$

los diferentes operadores \hat{H}_i pueden ser escogidos como:

$$\hat{H}_1 = \sum_{\substack{x=(m,n) \\ m+n \text{ par}}} \hat{h}_{x,x+\hat{j}}, \quad \hat{H}_2 = \sum_{\substack{x=(m,n) \\ m+n \text{ par}}} \hat{h}_{x,x+\hat{i}}, \quad \hat{H}_3 = \sum_{\substack{x=(m,n) \\ m+n \text{ impar}}} \hat{h}_{x,x+\hat{j}}, \quad \hat{H}_4 = \sum_{\substack{x=(m,n) \\ m+n \text{ impar}}} \hat{h}_{x,x+\hat{i}} \quad (2.5)$$

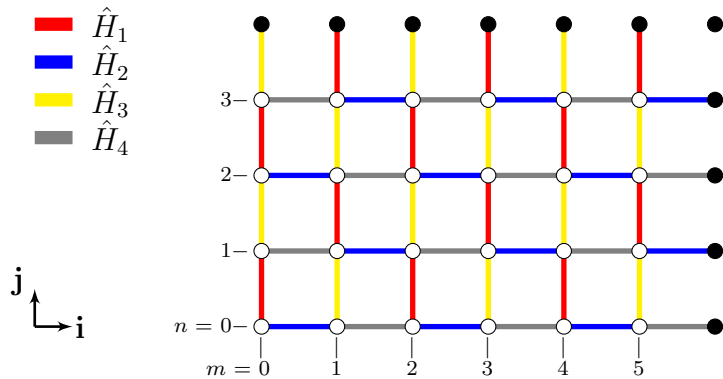


Figura 2.2: Esquema de la descomposición del hamiltoniano de la Ecuación (2.5) para una red de tamaño $L_x = 6$, $L_y = 4$ de espines cuánticos interactuando entre primeros vecinos. Los espines se han denotado por círculos blancos y la condición de borde periódica mediante círculos negros. Cada uno de los términos \hat{H}_i se han denotado por líneas de colores entre los espines vecinos. La interacción de \hat{H}_1 por color rojo, \hat{H}_2 por azul, \hat{H}_3 por amarillo y \hat{H}_4 por color gris.

donde $\hat{h}_{x,y}$ es el operador que denota la interacción entre 2 espines localizados en x, y , por ejemplo para el modelo de Heisenberg isotrópico: $\hat{h}_{x,y} = J \hat{\mathbf{S}}_x \cdot \hat{\mathbf{S}}_y$. En la Figura 2.2 se muestra gráficamente la descomposición del hamiltoniano de la Ecuación (2.5) para una red rectangular $\bar{\Lambda}$ de dimensiones $L_x = 6$ y $L_y = 4$. En esta figura se puede apreciar que cada una de las interacciones \hat{H}_i contienen todos los operadores de espín definidos en $\bar{\Lambda}$, también se cumple que cualquier término $\hat{h}_{x,y}$ perteneciente a un determinado \hat{H}_i conmuta con \hat{H}_i . De esta manera podemos escribir el término genérico de la Ecuación (2.3) como:

$$\langle n_\tau | e^{-\epsilon \hat{H}_i} | n_{\tau+1} \rangle = \prod_{\langle x,y \rangle \in \bar{\Lambda}_i} \langle S(x, \tau) S(y, \tau) | e^{-\epsilon \hat{h}_{x,y}} | S(x, \tau + 1) S(y, \tau + 1) \rangle \quad . \quad (2.6)$$

En consecuencia, cada uno de los términos $\langle n_\alpha | \exp[-\epsilon \hat{H}_j] | n_{\alpha+1} \rangle$ que aparecen en la Ecuación (2.3) pueden ser escritos como una multiplicación de términos de la forma de la Ecuación (2.6). Cada uno de estos factores son elementos de la matriz transferencia del sistema $\hat{\mathcal{T}}$

$$\hat{\mathcal{T}} = e^{-\epsilon \hat{h}_{x,y}} \quad , \quad (2.7)$$

con elementos de matriz:

$$\langle S(x, \tau) S(y, \tau) | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | S(x, \tau + 1) S(y, \tau + 1) \rangle \quad , \quad (2.8)$$

por lo tanto la interacción entre 2 espines cuánticos, descrita por el el operador $\hat{h}_{x,y}$, ubicados en la red original $\bar{\Lambda}$ es realizada mediante interacciones de 4 espines en la red auxiliar Λ , 2 espines vecinos $\langle x, y \rangle$ ubicados en el time slice Λ_τ con 2 espines vecinos $\langle x, y \rangle$ pero ubicados en el siguiente time slice $\Lambda_{\tau+1}$. cada una de estas interacciones entre cuatro espines en la red auxiliar es un elemento de la matriz transferencia. Se define a cada una de estas 4 interacciones de espines definidas en la red auxiliar Λ como plaquetas.

En otras palabras la interacción entre 2 time slices consecutivos Λ_τ y $\Lambda_{\tau+1}$ es realizada mediante interacciones de cuatro espines en la red auxiliar, 2 espines vecinos $\langle x, y \rangle$ ubicados en el time slice Λ_τ con 2 espines vecinos $\langle x, y \rangle$ pero ubicados en el siguiente time slice $\Lambda_{\tau+1}$, los posibles valores de estos cuatro espines vienen determinados por los elementos de la matriz

transferencia $\hat{\mathcal{T}}$. Dichas interacciones de cuatro espines pueden ser representadas gráficamente mediante plaquetas como se muestra en la Figura 2.3. En la Figura 2.3 se ha graficado (en

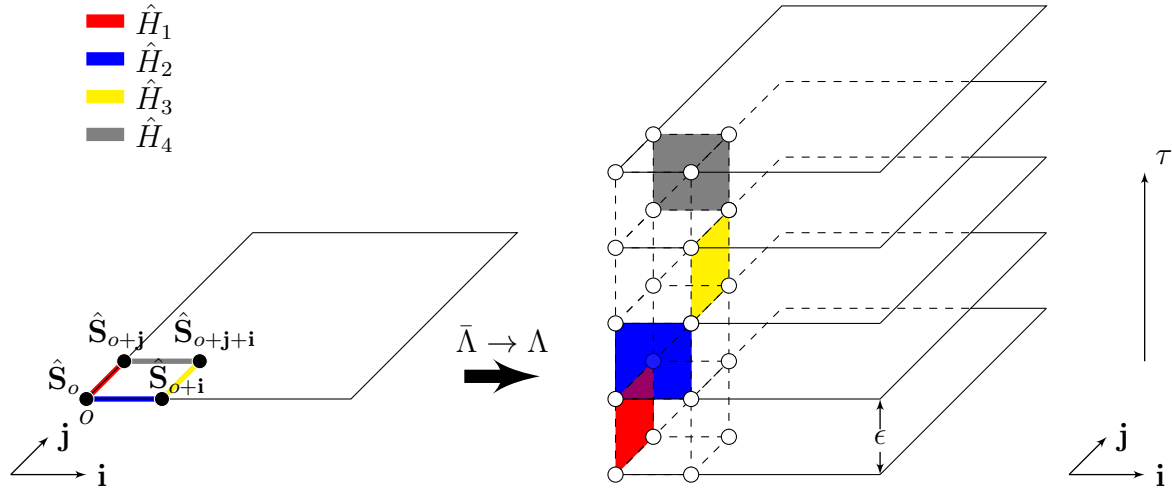


Figura 2.3: Esquema que muestra como se realizan las interacciones \hat{H}_i en forma de plaquetas en la red auxiliar para el caso $d = 2$. A la izquierda se ha esquematizado mediante círculos de color negro 4 de los espines cuánticos de la red original, parte de las interacciones \hat{H}_i se han denotado por líneas de color entre estos espines, la interacción de \hat{H}_1 por línea de color rojo, \hat{H}_2 por línea azul, \hat{H}_3 por línea amarilla y \hat{H}_4 por línea gris. A la derecha se muestra la red auxiliar formado el conjunto de time slices para el caso $N = 1$, los espines de esta red se han denotado por círculos de color blanco, se puede apreciar como las interacciones entre 2 espines cuánticos de la red original se realiza en forma de plaquetas entre 4 espines de la red auxiliar, las plaquetas activas se han denotado por colores respetando el utilizado para cada \hat{H}_i . por ejemplo la interacción entre los espines \hat{S}_o y \hat{S}_{o+j} (línea roja) que forma parte de \hat{H}_1 se realiza en forma de plaqueta entre los time slice Λ_0 y Λ_1 (en la plaqueta roja)

la parte izquierda) 4 espines cuánticos definidos en una red rectangular $\bar{\Lambda}$. Las interacciones entre esos 4 espines se han graficado con diferentes colores. En la parte derecha de la figura, se muestra como se realizan en forma de plaquetas estas 4 interacciones en la red auxiliar Λ para el caso $N = 1$.

Para realizar una simulación numérica usando este algoritmo es necesario que dicho algoritmo genere una dinámica estocástica tal que las probabilidades de transición de un estado a otro satisfaga balance detallado, completitud y también que el algoritmo sea ergódico. Esta cadena de Markov se logra construir definiendo diferentes tipos de breakups en cada una de las plaquetas activas de la red Λ de $d + 1$ dimensiones. La elección probabilística de alguno

de los breakups en cada una de las plaquetas activas formarían bonds entre los espines de la red auxiliar, el conjunto de todos los bonds definidos determinan diferentes tipos de cluster que por construcción corresponden a cluster cerrados. la cadena de Markov es producida al realizar un update de cada uno de los clusters definidos con probabilidad $1/2$.

El tipo de plaquetas activas y breakups dependen del modelo físico de espines cuánticos y de la cuantización utilizada en la representación de integral de camino de la función partición del sistema.

Para poder definir las probabilidades de generar cada uno de los breakups sobre las plaquetas activas, es necesario que cada uno de los elementos no nulos de la matriz transferencia sean positivos, ya que de lo contrario se podrían generar algunas configuraciones de espines en la red auxiliar que tengan un factor de Boltzmann negativo. Este problema conocido como problema del signo [10] imposibilita medir observables debido a las fluctuaciones de signos de las configuraciones de espines generadas en la cadena de Markov. Este problema será abordado en detalle en el capítulo 4.

2.2. LCA para el modelo de Heisenberg anisotrópico.

Para tener un ejemplo concreto, consideremos el modelo de Heisenberg anisotrópico de espín $s = 1/2$ descrito por la interacción: $\hat{h}_{x,y} = J(\hat{S}_x^{(1)}\hat{S}_y^{(1)} + \hat{S}_x^{(2)}\hat{S}_y^{(2)}) + J_3\hat{S}_x^{(3)}\hat{S}_y^{(3)}$ en una red rectangular de longitudes pares y con condiciones de borde periódicas. Cuantizando en términos de la base de $\hat{S}^{(3)}$ los posibles estados son $|\uparrow\rangle$ $|\downarrow\rangle$, de esta manera la matriz de transferencia $\hat{\mathcal{T}}$ del sistema puede ser representada por:

$$\hat{\mathcal{T}} \equiv e^{-\epsilon\hat{h}_{x,y}} := \begin{bmatrix} \mathcal{A} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{B} & \mathcal{C} & 0 \\ 0 & \mathcal{C} & \mathcal{B} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathcal{A} \end{bmatrix} \begin{matrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{matrix} \quad (2.9)$$

el signo “ := ” corresponde a una representación matricial del operador $\hat{\mathcal{T}}$, los elementos no nulos de la matriz de transferencia son:

$$\begin{aligned}\mathcal{A} &= \langle \uparrow \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \uparrow \rangle = \langle \downarrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \downarrow \downarrow \rangle = \exp(-\epsilon J_3/2) \quad , \\ \mathcal{B} &= \langle \uparrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \downarrow \rangle = \langle \downarrow \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \downarrow \uparrow \rangle = \cosh(\epsilon J/2) \quad , \\ \mathcal{C} &= \langle \uparrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \downarrow \uparrow \rangle = \langle \downarrow \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \downarrow \rangle = -\sinh(\epsilon J/2) \quad ,\end{aligned}\tag{2.10}$$

(En la matriz de transferencia se ha omitido un prefactor común $e^{\epsilon J_3/4}$ irrelevante).

De los 16 elementos de la matriz de transferencia sólo 6 elementos son no nulos, por lo tanto muy pocas configuraciones de espines en la red auxiliar son permitidas, Estas restricciones hacen que algoritmos de update local no resulten eficaces para simulaciones de este tipo de sistemas, incluso para una simulación realizada en una región de parámetros físicos lejos de un punto de transición de fase.

Los elementos de matriz transferencia diferentes de cero determinan las posibles configuraciones de espines en la red auxiliar. Para este caso sólo existen 3 tipos de plaquetas activas (interacciones de 4 espines): la plaqueta del tipo \mathcal{A} , descrita por la interacción de 4 espines iguales en la red auxiliar, la plaqueta del tipo \mathcal{B} , formada por 2 espines iguales en la dirección temporal τ y 2 espines distintos en la dirección espacial en la red auxiliar y la plaqueta del tipo \mathcal{C} , formada por 2 espines con diferentes signos en la dirección τ y 2 espines distintos en la dirección espacial en la red auxiliar.

Además de la Ecuación (2.10) vemos que el elemento de matriz \mathcal{C} es negativo para el caso antiferromagnético ($J > 0$). En este caso el problema de signo aparente puede ser solucionado realizando una transformación unitaria rotando cada segundo espín en un ángulo π , lo cual no modifica la función partición del sistema, esta rotación en ángulo π es equivalente a redefinir $J \rightarrow -J$, lo que evidencia que la física del modelo ferromagnético y antiferromagnético para este modelo son equivalentes, pero con los límites de temperatura cambiados, lo cual es válido sólo en una red bipartita. Cabe destacar que en el caso de incluir un campo magnético externo al sistema dicha transformación unitaria ya no es válida (fenómeno que será estudiado en detalle en el capítulo 4). Como ya se había mencionado el algoritmo de cluster se realiza

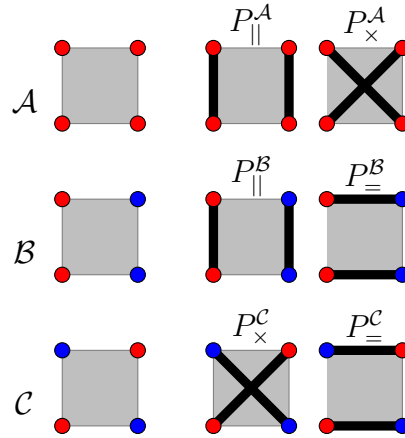


Figura 2.4: Posibles breakups para cada una de las plaquetas activas para el modelo de Heisenberg anisotrópico. A la izquierda se han dibujado las posibles configuraciones de espines de la matriz transferencia \hat{T} con sus respectivos breakups. Estados de espines up $s = 1$ se han denotado con círculos de color rojo y valor de espín down $s = -1$ mediante círculos de color azul, los posibles breakups se han denotado por líneas gruesas de color negro, con sus respectivas probabilidades

escogiendo diferentes tipos de breakups en cada una de las plaquetas activas de la red auxiliar de $d + 1$ dimensiones. Los posibles breakups que se pueden escoger para cada una de las 3 plaquetas activas se muestran en la Figura 2.4. Por ejemplo, para una plaqueta del tipo \mathcal{A} se puede escoger breakups temporales o tipo cruz con probabilidades $P_{||}^{\mathcal{A}}$ y $P_{\times}^{\mathcal{A}}$, respectivamente. Donde cada una de estas probabilidades de transición $\mathcal{W}(\mathcal{C}_i \rightarrow \mathcal{C}_j)$ desde una plaqueta permitida i o otra j definida en la red auxiliar deben satisfacer la condición de micro-reversibilidad (balance detallado):

$$P(\mathcal{C}_i)\mathcal{W}(\mathcal{C}_i \rightarrow \mathcal{C}_j) = P(\mathcal{C}_j)\mathcal{W}(\mathcal{C}_j \rightarrow \mathcal{C}_i) \quad , \quad (2.11)$$

$P(\mathcal{C}_i)$ es esencialmente el factor de Boltzmann de la configuración \mathcal{C}_i . Por ejemplo $P_{\times}^{\mathcal{C}}$ es la probabilidad de transición desde la plaqueta \mathcal{C} a la plaqueta \mathcal{A} y $P_{=}^{\mathcal{C}}$ es la probabilidad de transición desde la plaqueta \mathcal{C} a la plaqueta \mathcal{B} .

2.3. Observables y Estimadores Mejorados.

La gran efectividad que presenta este algoritmo en el estudio de sistemas no frustrados de espines cuánticos, radica en calcular los observables físicos de interés del modelo en estudio mediante estimadores mejorados haciendo uso de las propiedades topológicas generales de los loop-cluster (cluster cerrados) como el winding number temporal W_t , espacial W_l y tamaños $|C_i|$ de cada uno de estos cluster cerrados definidos en la red auxiliar, con esto se pueden obtener resultados muy precisos de las propiedades físicas del sistema en simulaciones que generan una cadena de markov relativamente pequeña, esto es sweeps o pasos estocásticos del orden de los 100000, estos estudios fueron realizados en los artículos [37], [38], [39], entre muchos otros.

A continuación se muestran algunos de estos resultados. En referencia [37], M. Troyer y S. Sachdev, utilizando el LCA, calcularon mediante escalamiento de tamaño finito el valor del número universal κ que determina la temperatura crítica de la transición de fase de Kosterlitz-Thouless (KT) $T_{KT} = \kappa B$ en el modelo de espín cuántico de dos redes, el cual posee un diagrama de fase estrechamente relacionado con el del sistema Hall cuántico de doble capa de fracción total de llenado $\nu = 2$ tal como los sistemas Hall cuánticos de doble capa, los autores conjeturan que en base a sus resultados numéricos el valor $\kappa \approx 0,38 \pm 0,06$ obtenido corresponde a un resultado universal para estos tipos de modelos por lo que dicho valor de κ debería ser también aplicado a los sistemas Hall cuánticos de doble capa, lo cual debiera ser verificado mediante futuros estudios experimentales de estos sistemas.

Sistemas antiferromagnéticos de espines cuánticos acoplados a un campo magnético como el estudiado en [37] sufren del problema del signo [10], si se realiza una cuantización del sistema en la dirección perpendicular al campo magnético aplicado. Para evitar esta dificultad numérica, los autores en ref [37] cuantizaron el sistema en la dirección del campo magnético, sin embargo esto destruye la libertad de update de cada cluster con probabilidad $1/2$ en forma independiente, perdiendo la enorme ventaja que presenta los algoritmos de cluster, lo que genera un incremento exponencial del tiempo de autocorrelación de la forma $\tau = \exp(B/T)$, el cual se vuelve dramático para muy bajas temperaturas y a medida que el campo B aumenta.

Afortunadamente los autores en [37] pudieron obtener este resultado de κ para valores de temperatura T no muy bajas y campo magnético B no muy grande $B/T < 4$. No obstante, en esta tesis se pudo estudiar numéricamente con gran precisión utilizando el MCA algunos sistemas magnéticos cuánticos acoplados a un campo magnético a valores de temperaturas muy bajas hasta $T = 0,03$ para todo el rango del campo magnético aplicado.

En referencia [38] U. Gerber, C. P. Hofmann, F.-J. Jiang, G. Palma, P. Stebler y U.-J. Wiese mostraron mediante el LCA, utilizando un estimador mejorado para la distribución de probabilidad $p(\Phi)$ de la magnitud del vector de magnetización $\hat{\Phi}$, que los parámetros de baja energía calculados analíticamente mediante teoría de campo efectivo hasta 2 loops [40], [41] (en particular, el primero y segundo momento de la distribución: $\langle \hat{\Phi} \rangle$ y $\langle (\hat{\Phi} - \langle \hat{\Phi} \rangle)^2 \rangle$) coinciden con una alta precisión con los valores numéricos obtenidos en [38] para el modelo XY cuántico de espines $1/2$ de dos dimensiones espaciales de tamaño $L \times L$, el cual puede ser descrito mediante la (2+1)-d teoría de campo efectivo para una red bipartita de volumen $L \times L \times L/c$, donde c es la velocidad de la onda de espín. Mediante esta comparación de resultados, los autores conjeturan que la teoría de campo efectivo para los magnones describe correctamente la física del modelo XY cuántico a baja energía. Para incluir predicciones confiables a mayor energía, es necesario considerar correcciones de más alto orden en la expansión de loops. Más aún, en [38] realizando un ajuste de los resultados numéricos de la forma predicha por los resultados analíticos pero incluyendo además un nuevo parámetro del orden $1/L^3$ equivalente a 3 loops, el cual no ha sido calculado analíticamente en la teoría de campo efectivo, los autores demuestran que las pequeñas desviaciones entre los valores numéricos y analíticos se deben a correcciones de la teoría efectiva hasta 3 loops.

Desde el punto de vista técnico el modelo estudiado en [38] definido en una red bipartita al no estar acoplado a un campo magnético externo B , describe la misma física ya sea un sistema ferromagnético o antiferromagnético, ya que ambos sistemas están relacionados por una transformación unitaria, por lo que no presenta el problema del signo. Debido a que el LCA funciona con gran eficiencia para este tipo de modelos, los autores pudieron obtener resultados muy precisos de los parámetros de muy baja energía del modelo, mediante simulaciones a muy bajas temperaturas, hasta $\beta = 56,4$, donde beta es el inverso de la temperatura. Lo

anterior pareciera ser muy costoso para este algoritmo, ya que recordemos que en el LCA el espaciado elemental ϵ de la dirección temporal de la red auxiliar es proporcional al inverso de la temperatura $\epsilon = \beta/N$, por lo que para reducir el error de la discretización frente al error estadístico se debe aumentar L_t a medida que β aumenta. Esta dificultad, que se refleja en el aumento de tiempo de la simulación, fueron compensadas en [38] gracias al estimador mejorado usado para $p(\Phi)$, el cual aumenta la eficiencia de la estadística por un factor de 2^{N_c} el cual es exponencial en el volumen, donde N_c es el número de cluster definidos en la red auxiliar.

Utilizando el LCA, esta misma ganancia en la estadística que se obtiene por el observable mejorado de la función densidad de probabilidad de la magnetización también fue utilizada en [39], por D. Zambrano, para calcular la magnetización del modelo cuántico de Heisenberg de espín 1/2 definido en una red de dimensión $L \times L$, para el rango de temperatura $0,1 \leq T \leq 1$ con el objetivo de estudiar si el fenómeno de invarianza de escala se presenta no solo en una vecindad de un punto crítico definido a temperatura T_c , sino que en toda la región $[0, T_c]$, como fue propuesto en [42]. La conclusión obtenida en [39] es que el aparente escalamiento corresponde a una expansión perturbativa orden a orden en la dinámica entre las ondas de espín o magnones como los realizados en referencias [43] y [44].

El modelo de Heisenberg, a diferencia del modelo XY, posee una simetría continua de rotación $SU(2)$, por lo que no puede tener un valor de la magnetización distinta de cero para dimensión espacial $d \leq 2$, como lo exige el teorema de Mermin-Wagner [45], lo cual indicaría que el estudio numérico realizado en [39] sería inviable. Sin embargo, en dicha referencia se pudo estudiar un comportamiento no trivial de la magnetización para este modelo debido a que el autor estudio el promedio del modulo de la magnetización, obteniendo un comportamiento no trivial de este observable en la región de temperatura estudiada.

Capítulo 3

Competencia entre Interacciones y Transición de Fase Cuántica

Los algoritmos más eficientes para la simulación numérica de espines cuánticos son los algoritmos de cluster, en particular usando el LCA [29], [30] estudiado en el capítulo anterior se han obtenido resultados muy precisos, como los mostrados en el capítulo anterior.

Este algoritmo, sin embargo puede sufrir severos problemas de signos [10] para sistemas magnéticos frustrados, ya sea por frustración geométrica de la red (redes no bipartitas) o por frustración del sistema debido a la competencia que se generan entre diferentes tipos de interacciones en el hamiltoniano. En este capítulo se estudiará en detalle este último problema, en particular las consecuencias que se generan en los niveles de energía al aplicar un campo magnético externo sobre el sistema cuántico de espines, el cual está íntimamente relacionado con el fenómeno de transiciones de fases cuánticas [16].

Cuando existen diferentes tipos de interacciones en el hamiltoniano se produce una competencia entre los términos de este; esta competencia se manifiesta produciendo fluctuaciones cuánticas en el sistema a nivel microscópico. Estas fluctuaciones generadas por los distintos tipos de interacciones se agudizan a medida que la temperatura disminuye, llegando a ser máxima para $T = 0$, en dicho momento, generalmente, los distintos tipos de interacciones

microscópicas en el sistema, generan un quiebre en la simetría del sistema, pudiendo generar una transición de fase cuántica (QPT) en el límite de volumen infinito. Esta transición de fase es caracterizada por algún parámetro externo g que actúa sobre el sistema (por ejemplo un campo magnético aplicado), el cual podría competir con el estado base fundamental del sistema, acá se denota estado base fundamental del sistema, como aquel estado base del sistema sin la interacción externa g . Por lo tanto para cierto valor crítico del parámetro externo $g = g_c$ con $g_c \neq 0$ se podría producir un overlap entre el estado base y el primer nivel excitado del sistema generando un punto de no analiticidad en la energía del estado base en el punto $g = g_c$. dicho punto de no analiticidad de la energía base produce una transición de fase cuántica en el sistema en el límite de volumen infinito para el valor $g = g_c$ [16].

Al igual que las transiciones de fases clásicas (CPT), QPT se caracterizan por la divergencia de la longitud de correlación ξ del sistema en el punto crítico y comportamiento de invarianza de escala en las vecindades del punto crítico [17], sin embargo a diferencia de las transiciones de fases clásicas, QPT poseen una correlación adicional que no poseen las CPT, dicha correlación conocida como entrelazamiento es la fuente que permite la información y computación cuántica [17], [18], [19], [20]. Por dicha razón el estudio de transiciones de fases cuánticas es un área de investigación de gran interés y de actualidad.

3.1. Modelo de Heisenberg en presencia de un campo magnético

Para ser más claro, consideremos el modelo de Heisenberg isotrópico en presencia de un campo magnético externo.

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{N}} &= J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - B \sum_{i \in \Lambda} \hat{S}_i^{(3)} \\ &= \hat{\mathcal{H}}_{nn} + \hat{\mathcal{H}}_B \quad , \end{aligned} \tag{3.1}$$

$\hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{N}}$ describe un sistema de \mathcal{N} espines cuánticos interactuando entre primeros vecinos (nn) y en presencia de un campo magnético externo constante \mathbf{B} orientado en la dirección \mathbf{e}_3 . Consideramos, además, condiciones de borde periódicas en la red, $\hat{S}_i^{(\alpha)}$ es la componente α del operador de espín $\hat{\mathbf{S}}_i$, definido en el punto i de la red $\bar{\Lambda}$. J es la constante de interacción entre espines vecinos, para $J < 0$ un alineamiento paralelo es favorecido entre los espines y describe un modelo ferromagnético. Para $J > 0$ un alineamiento antiparalelo es energéticamente favorecido entre espines y por lo tanto describe un sistema antiferromagnético.

Es interesante notar que el hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{N}}$ posee simetría $SU(2)$ y es invariante bajo rotaciones en torno a \mathbf{e}_3 . Esta simetría viene descrita por el conmutador $[\hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{N}}, \hat{S}_{tot}^{(3)}] = 0$, donde

$$\hat{S}_{tot}^{(3)} = \sum_{i \in \bar{\Lambda}} \hat{S}_i^{(3)} \quad . \quad (3.2)$$

El campo magnético que apunta en la dirección \mathbf{e}_3 rompe la simetría esférica y la simetría $SU(2)$ es restaurada completamente sólo en el caso $B \rightarrow 0$, esto es: $[\hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{N}}, \hat{\mathbf{S}}_{tot}]_{B \rightarrow 0} = 0$, donde $\hat{\mathbf{M}} \equiv \hat{\mathbf{S}}_{tot}$ es la magnetización total del sistema:

$$\hat{\mathbf{S}}_{tot} = \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i \in \Lambda} \hat{S}_i^{(\alpha)} \mathbf{e}_\alpha \quad . \quad (3.3)$$

Debido a la simetría del problema, el cálculo del estado base $|0\rangle$ para el sistema descrito por la Ecuación (3.1) para el caso ferromagnético ($J < 0$) es un problema trivial y es análogo a la solución del modelo clásico:

$$|0\rangle^F = \prod_{i \in \bar{\Lambda}} |S_i^{(3)} = S\rangle, \quad E_0 = JS^2 \sum_{\langle i,j \rangle} -BSN \quad , \quad (3.4)$$

donde E_0 es la energía del estado base y S es el máximo autovalor del operador de espín \hat{S} . Es importante destacar que aún cuando las componentes 1 y 2 del operador de espín contribuya localmente en aumentar y disminuir en 1 el autoestado de $\hat{S}^{(3)}$, el estado descrito en la Ecuación (3.4) es autoestado del operador que describe la interacción de espines entre primeros vecinos del hamiltoniano: $\hat{\mathcal{H}}_{nn} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$, esto queda de manifiesto al escribir las componentes

1 y 2 del operador de espín en términos de los operadores:

$$\hat{S}_i^\pm = (\hat{S}_i^{(1)} \pm i\hat{S}_i^{(2)})/2 \quad , \quad (3.5)$$

y al utilizar la propiedad:

$$\hat{S}_i^\pm | S_i^{(3)} \rangle = \sqrt{(S \mp S_i^{(3)})(S \pm S_i^{(3)} + 1)} | S_i^{(3)} \pm 1 \rangle \quad , \quad (3.6)$$

y por lo tanto:

$$\hat{\mathcal{H}}_{nn} = J \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{S}_i^{(3)} \hat{S}_j^{(3)} + 4\hat{S}_i^- \hat{S}_j^+) \quad , \quad (3.7)$$

el cual es autoestado de $|0\rangle^F$.

Por otro lado si en el hamiltoniano de la Ecuación (3.1) hubiesemos considerado una interacción anisotrópica entre primeros vecinos:

$$\hat{\mathcal{H}}_{nn}^a = \sum_{\langle i,j \rangle} (J_1 \hat{S}_i^1 \hat{S}_j^1 + J_2 \hat{S}_i^2 \hat{S}_j^2 + J_3 \hat{S}_i^3 \hat{S}_j^3) \quad , \quad (3.8)$$

al escribir $\hat{\mathcal{H}}_{nn}^a$ en termino de \hat{S}^\pm , permanecen términos de la forma $\hat{S}_i^- \hat{S}_j^-$, con lo cual el estado descrito por Ecuación (3.4) ya no es autoestado del hamiltoniano del sistema. Sin embargo si se tiene $J_1 = J_2 \neq J_3$ el estado $|0\rangle^F$ sigue siendo autoestado del hamiltoniano total del sistema, esto se debe que para $J_1 = J_2$, se mantiene la simetría $SO(2)$ y se cumple $[\hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{N}}^a, \hat{S}_{tot}^{(3)}]_{J_1=J_2} = 0$, por otro lado para el caso general $J_1 \neq J_2 \neq J_3$, se rompe la simetría $SO(2)$, esto es $[\hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{N}}^a, \hat{S}_{tot}^{(3)}] \neq 0$.

Todo este análisis es válido sólo para el caso ferromagnético; el cálculo del estado base del modelo antiferromagnético es un problema abierto y sólo ha sido resuelto por Bethe para el caso de una cadena de Heisenberg de espines $S = 1/2$ sin campo externo [46]. La dificultad del cálculo radica en el hecho que el estado base de Néel no es autoestado del hamiltoniano, incluso si consideramos un modelo isótropico en una red bipartita; en este caso el estado de

Néel puede ser escrito por:

$$|0\rangle^{AF} = \prod_{i \in \Lambda_A} |S_i^{(3)} = S\rangle \prod_{j \in \Lambda_B} |S_j^{(3)} = -S\rangle , \quad (3.9)$$

acá, $\bar{\Lambda} = \bar{\Lambda}_A + \bar{\Lambda}_B$, esto es, el estado descrito por una subred $\bar{\Lambda}_i$ en un estado base ferromagnético y la otra subred en un estado ferromagnético pero con los espines opuestamente orientados respecto a la subred anterior. Sin embargo debido a los términos $S_i^- S_j^+$ que aparecen en $\hat{\mathcal{H}}_{nn}$ el estado descrito en la Ecuación (3.9) no es autoestado del hamiltoniano del sistema.

3.2. 2 espines cuánticos acoplados a un campo magnético externo

A pesar de la dificultad del cálculo del estado base del modelo antiferromagnético, es interesante estudiar un caso particular de la Ecuación (3.1), el problema académico de 2 espines cuánticos acoplados a un campo magnético externo, el cual es descrito por el hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = J\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 - B(\hat{S}_1^{(3)} + \hat{S}_2^{(3)}), \quad B > 0 . \quad (3.10)$$

Este hamiltoniano puede ser diagonalizado usando la base de suma de momento angular $|\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 \mathcal{J} \mathcal{M}\rangle \equiv |.. \mathcal{J} \mathcal{M}\rangle$, donde $\hat{\mathcal{J}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ y \mathcal{M} es el autovalor de la proyección de $\hat{\mathcal{J}}$ en la dirección \mathbf{e}_3 . Los autovalores de energía de $\hat{\mathcal{H}}_2$ son:

$$E_{\mathcal{J} \mathcal{M}} = \frac{J}{2} (\mathcal{J}(\mathcal{J} + 1) - S_1(S_1 + 1) - S_2(S_2 + 1)) - B\mathcal{M} , \quad (3.11)$$

los valores de \mathcal{J} y \mathcal{M} vienen dados por las siguientes desigualdades:

$$|S_1 - S_2| \leq \mathcal{J} \leq S_1 + S_2, \quad -\mathcal{J} \leq \mathcal{M} \leq \mathcal{J} . \quad (3.12)$$

Para el caso de 2 espines $1/2$ acoplados a un campo magnético externo: $S_1 = S_2 = 1/2$, el sistema posee 4 niveles de energía: $E_{00} = -3J/4$, $E_{10} = J/4$, $E_{11} = J/4 - B$ y $E_{1-1} = J/4 + B$. Como se aprecia en la parte izquierda de la figura 3.1, para el caso antiferromagnético

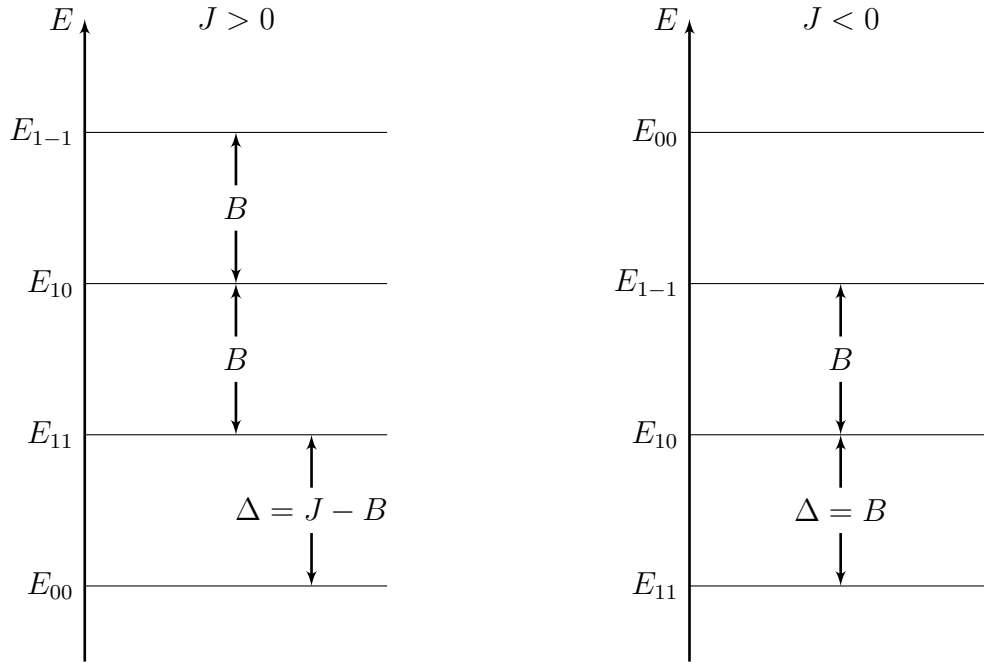


Figura 3.1: *Espectro de energía del sistema de 2 espines $S = 1/2$ acoplados a un campo externo. La figura de la izquierda corresponde a una interacción antiferromagnética entre espines $J > 0$, mientras que la figura derecha corresponde al caso ferromagnético $J < 0$*

$J > 0$, cuando $B = B_c = J$, el gap de energía Δ entre el estado base y el primer nivel excitado desaparece y por lo tanto el estado base en función del campo externo deja de ser una función analítica, en consecuencia este sistema a medida que los límites de volumen infinito y temperatura cero son alcanzados, atravesaría por una transición de fase cuántica. Esto se debe a que en el sistema antiferromagnético existe una competencia entre las interacciones, por un lado la interacción entre espines con magnitud $J > 0$, favorece un alineamiento antiparalelo entre espines, pero por otro lado la interacción debida al campo magnético B favorece un alineamiento paralelo a B .

Por otro lado una situación muy distinta ocurre para el caso ferromagnético (derecha Figura 3.1), cuando $J < 0$, no existe un valor crítico distinto de cero para el cual el estado base deje de ser una función analítica; en consecuencia este sistema en el límite de volumen infinito no posee

una transición de fase cuántica. Esto se debe a que en este caso no existe una competencia entre las interacciones, ambas interacciones favorecen un alineamiento paralelo entre espines, si bien el campo define que dirección es favorecida, no destruye la configuración favorecida por la interacción entre espines, recordemos que el sistema es invariante bajo rotaciones en torno a \mathbf{e}_3

En resumen, el modelo $\hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{N}}$ antiferromagnético puede presentar una transición de fase cuántica, pero como discutido anteriormente no se conoce una solución analítica del estado base para este modelo. Por otro lado, para el caso ferromagnético, si se conoce un resultado analítico del estado base, sin embargo no existe una transición de fase cuántica en el modelo ferromagnético.

Hasta ahora todo parece un poco frustrante para el estudio analítico de transiciones de fases cuánticas, sin embargo existe algunos modelos cuánticos que poseen una transición de fase cuántica que han podido ser estudiados analíticamente en una dimensión, en particular el modelo de Ising en un campo transversal en una dimensión.

3.3. Cadena de Ising en un campo transversal

La cadena de Ising en presencia de un campo magnético transversal es el sistema cuántico más simple que posee transición de fase cuántica, el hamiltoniano que describe este sistema puede ser escrito como:

$$\hat{\mathcal{H}}_I = - \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \left(J \hat{\sigma}_i^{(1)} \hat{\sigma}_{i+1}^{(1)} + B \hat{\sigma}_i^{(3)} \right) , \quad (3.13)$$

donde $\hat{\sigma}_i^{(\alpha)}$ es la matriz de Pauli α que actúa en el sitio i , además consideramos condiciones de borde periódicas $\hat{\sigma}_{i+\mathcal{N}} = \hat{\sigma}_i$.

Este modelo puede ser usado en el estudio experimental de las propiedades magnéticas a bajas temperaturas del LiHoF4. Este material es un cristal iónico, el cual a suficiente baja temperatura, el único grado de libertad magnético relevante es la orientación de los espines de los

átomos de Holmio, el cual puede ser considerado como un eje fácil del material cristalino, de esta manera los espines apuntan ya sea de manera paralela o antiparalela a dicho eje cristalino. En ausencia de un campo externo, el estado base de este material es ferromagnético.

En 1996 Bitko, Rosenbaum y Aeppli [21] midieron de manera experimental las propiedades magnéticas del LiHoF4 en función de la temperatura y de un campo magnético externo aplicado perpendicular al eje fácil cristalino.

Este modelo posee una transición de fase cuántica cuando $B = J$. En el límite $B \gg J$ el estado base es paramagnético con todos los espines apuntando en la dirección \mathbf{e}_3 del campo, en el otro límite $B \ll J$ el estado base del sistema es degenerado, correspondiente a los estados ferromagnéticos con todos los espines apuntando en la dirección \mathbf{e}_1 o bien todos los espines opuestos al sentido \mathbf{e}_1 . La dinámica entre estos dos estados degenerados cuando el sistema atraviesa por una transición de fase cuántica fue estudiada en [34]. Además este modelo posee el mismo comportamiento crítico que el modelo clásico de Ising en dos dimensiones.

A pesar de la sencillez del modelo, la solución analítica es sutil y se basa principalmente en la transformación de Jordan-Wigner [35] y la transformación de Bogoliubov. La solución consiste en mapear el modelo original compuesto por \mathcal{N} espines $S = 1/2$ que interactúan entre primeros vecinos, en un sistema de partículas fermiónicas, despreciando el espín de estas, las cuales pueden ocupar \mathcal{N} orbitales. Por lo tanto, cada orbital puede estar ocupado por un fermión, o bien, estar vacío.

Por ejemplo si se cuantiza el sistema original usando la base en la cual $\hat{\sigma}^{(3)}$ es diagonal, se puede asociar el estado de espín up, para dicha base, con un orbital vacío en el sitio y un estado de espín down con un orbital ocupado por un fermión. Si se denota \hat{c}_i como el operador que aniquila un fermión en el sitio i , y \hat{c}_i^\dagger como el operador que crea un fermión en el sitio i , entonces $\hat{c}_i \Leftrightarrow \hat{\sigma}_i^+$ y $\hat{c}_i^\dagger \Leftrightarrow \hat{\sigma}_i^-$, por lo tanto:

$$\hat{\sigma}_i^{(3)} = 1 - 2\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \quad , \quad (3.14)$$

sin embargo no se puede igualar trivialmente operadores fermiónicos con operadores de espín en la forma $\hat{c}_i = \hat{\sigma}_i^+$ y $\hat{c}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i^-$, ya que estos operadores obedecen diferentes tipos de álgebra, mientras dos operadores fermiónicos cumplen reglas de anticonmutación estándar, dos

operadores de espín satisfacen reglas de conmutación estándar. La solución de este dilema fue realizado por Jordan y Wigner (J.W.), quienes mostraron que la siguiente transformación satisfacía ambas reglas, la de conmutación y la de anticonmutación.

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_i^+ &= \prod_{j<i} (1 - 2\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j) \hat{c}_i \quad , \\ \hat{\sigma}_i^- &= \prod_{j<i} (1 - 2\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j) \hat{c}_i^\dagger \quad .\end{aligned}\tag{3.15}$$

Recordando la relación $\hat{\sigma}_i^\pm = (\hat{\sigma}_i^{(1)} \pm i\hat{\sigma}_i^{(2)})/2$, entonces:

$$\hat{\sigma}_i^{(1)} = \prod_{j<i} (1 - 2\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j) (\hat{c}_i + \hat{c}_i^\dagger) \quad ,\tag{3.16}$$

esta transformación puede ser invertida fácilmente:

$$\begin{aligned}\hat{c}_i &= \left(\prod_{j<i} \hat{\sigma}_j^{(3)} \right) \hat{\sigma}_i^+ \quad , \\ \hat{c}_i^\dagger &= \left(\prod_{j<i} \hat{\sigma}_j^{(3)} \right) \hat{\sigma}_i^- \quad .\end{aligned}\tag{3.17}$$

En efecto usando las transformaciones de J.W. Ecuaciones (3.15) y (3.17) se cumple:

$$\begin{aligned}[\hat{\sigma}_i^+, \hat{\sigma}_j^-] &= \delta_{i,j} \hat{\sigma}_i^{(3)} \quad , \quad [\hat{\sigma}_i^{(3)}, \hat{\sigma}_j^\pm] = 2\delta_{i,j} \hat{\sigma}_i^\pm \\ \{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} &= \delta_{i,j} \quad , \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0 \quad ,\end{aligned}\tag{3.18}$$

donde $[\hat{A}, \hat{B}]$ y $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ corresponden al conmutador y anticonmutador entre los operadores \hat{A} y \hat{B} , respectivamente. Reemplazando la transformación de la Ecuación (3.15) en $\hat{\mathcal{H}}_I$ obtenemos:

$$\hat{\mathcal{H}}_I = - \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \left(J\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} + J\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1}^\dagger + \frac{B}{2} - B\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i + \mathbf{c.c.} \right) \quad ,\tag{3.19}$$

donde $\mathbf{c.c.}$ corresponde al complejo conjugado de la expresión anterior. El hamiltoniano resultante es hermítico y cuadrático en términos de los operadores fermiónicos, sin embargo posee términos de la forma $\hat{c}_i \hat{c}_{i+1}$, $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1}^\dagger$ los cuales violan la conservación del número de fermiones.

El hamiltoniano de la Ecuación (3.20) puede ser diagonalizado introduciendo la transformada de Fourier de los operadores \hat{c}_i y luego de realizar una transformación de Bogoliubov.

$$\hat{c}_k = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_j \hat{c}_j \exp(-ikr_j) \quad , \quad (3.20)$$

donde $r_j = ja$ y a el espaciado elemental de la cadena, reemplazando la transformada de Fourier definida en la Ecuación(3.20) en $\hat{\mathcal{H}}_I$ obtenemos, luego de algún algebra:

$$\hat{\mathcal{H}}_I = \sum_k \left(2[B - J \cos(ka)] \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k - iJ \sin(ka) \left[\hat{c}_{-k}^\dagger \hat{c}_k^\dagger + \hat{c}_{-k} \hat{c}_k \right] - B \right) \quad . \quad (3.21)$$

El hamiltoniano obtenido sigue siendo hermítico pero el término entre paréntesis cuadrados proporcional a $\sin(ka)$ no es diagonal y sigue violando el número de fermiones con pseudo-momento k , sin embargo se puede cancelar dicho término al introducir una transformación de Bogoliubov:

$$\hat{\gamma}_k = u_k \hat{c}_k - iv_k \hat{c}_{-k}^\dagger \quad , \quad (3.22)$$

con su respectiva transformada inversa:

$$\hat{c}_k = u_k \hat{\gamma}_k + iv_k \hat{\gamma}_{-k}^\dagger \quad , \quad (3.23)$$

donde u_k y v_k son números reales, escogiendo

$$u_k^2 + v_k^2 = 1, \quad u_{-k} = u_k, \quad v_{-k} = -v_k \quad . \quad (3.24)$$

Los nuevos operadores fermiónicos $\hat{\gamma}_k$ satisfacen reglas de anticonmutación estándar:

$$\{\hat{\gamma}_k, \hat{\gamma}_{k'}^\dagger\} = \delta_{k,k'}, \quad \{\hat{\gamma}_k, \hat{\gamma}_{k'}\} = \{\hat{\gamma}_k^\dagger, \hat{\gamma}_{k'}^\dagger\} = 0 \quad . \quad (3.25)$$

De esta manera al reemplazar la transformada de Bogoliubov definida por la Ecuación (3.23) en la Ecuación (3.21) se obtendrá un termino diagonal y otro no diagonal proporcional a $\hat{\gamma}_k^\dagger \hat{\gamma}_{-k}^\dagger + \hat{\gamma}_k \hat{\gamma}_{-k}$, el cual será función de los números u_k y v_k , se pueden escoger dichos números u_k y v_k , tal que cancelen el término no diagonal, en efecto, esto se consigue al satisfacer la

relación:

$$\frac{2u_k v_k}{u_k^2 - v_k^2} = \frac{\sin(ka)}{\cos(ka) - B/J} \quad . \quad (3.26)$$

Definiendo $u_k = \cos(\theta_k/2)$ y $v_k = \sin(\theta_k/2)$, la condición de la Ecuación (3.24) se satisface automáticamente, y se tiene que la condición

$$\tan(\theta_k) = \frac{\sin(ka)}{\cos(ka) - B/J} \quad (3.27)$$

diagonaliza el hamiltoniano del sistema:

$$\hat{\mathcal{H}}_I = \sum_k \epsilon_k \left(\hat{\gamma}_k^\dagger \hat{\gamma}_k - \frac{1}{2} \right) \quad , \quad (3.28)$$

donde ϵ_k es la energía del orbital con momento k :

$$\epsilon_k = 2J \sqrt{1 + (B/J)^2 - 2(B/J) \cos(ka)} \quad . \quad (3.29)$$

De este resultado se puede calcular fácilmente el estado base $|0\rangle$ del sistema para el modelo de Ising ferromagnético ($J > 0$). En efecto dicho estado corresponde al sistema fermiónico con todos los orbitales vacíos, esto es aquel estado sin fermiones: $\hat{\gamma}_k |0\rangle = 0$:

$$|0\rangle = \prod_{k \in \Lambda^*} |n_k = 0\rangle \quad , \quad (3.30)$$

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_{k \in \Lambda^*} \epsilon_k \quad , \quad (3.31)$$

donde Λ^* corresponde al dominio de la red recíproca, E_0 corresponde a la energía del estado base y n_k es el número de fermiones ocupando el orbital con energía ϵ_k . El primer nivel excitado del sistema corresponde a un fermión ocupando el orbital con menor energía $\epsilon_{\bar{k}}$:

$$|1\rangle = |n_{\bar{k}} = 1\rangle \prod_{k \neq \bar{k}} |n_k = 0\rangle \quad , \quad (3.32)$$

con esto se puede calcular el gap de energía Δ entre el estado base y el primer nivel excitado

del sistema:

$$\Delta = \epsilon_{\bar{k}} = 2J\sqrt{1 + (B/J)^2 - 2(B/J)\cos(\bar{k}a)} \quad . \quad (3.33)$$

En el límite de volumen infinito el fermión con menor energía posee pseudomomento $\bar{k} = 0$, con lo cual $\Delta = 2|J - B|$, el cual se anula cuando $B = J$. En dicho punto el estado base deja de ser una función analítica en términos de B , por lo tanto en el modelo de Ising ferromagnético en presencia de un campo transversal ocurre una transición de fase cuántica para el valor crítico $B_c = J$ desde un estado ferromagnético a uno paramagnético.

Capítulo 4

Simulación Numérica de Sistemas de Espines Cuánticos con Frustración

Como se vió en el capítulo anterior, el estudio analítico de transición de fase cuántica es un problema complejo que requiere lograr obtener información del estado fundamental y de los primeros estados del espectro, por ejemplo vía diagonalización del hamiltoniano. Desgraciadamente tampoco se puede estudiar este tipo de transición que ocurre a $T = 0$ usando teoría de Renormalización y grupo de renormalización [47] ya que esta teoría no es aplicable a $T = 0$ dado que corresponde a una transición de fase cuántica y no clásica. A pesar de las dificultades descritas, este fenómeno cuántico se ha podido estudiar numéricamente con gran precisión para distintos tipos de modelos utilizando diagonalización exacta [23], [31], [48], [49], [32], entre otros. Si bien este método no sufre del conocido problema del signo, está fuertemente limitado con la dimensión y tamaño de la red. Por otro lado, simulaciones del tipo Monte Carlo cuántico (como el estudiado en el capítulo 2) aplicado a sistemas magnéticos frustrados pueden sufrir severos problemas de signos, ejemplos bien conocidos que presentan dichos problemas al utilizar este método son: sistemas de fermiones en dimensión $d > 1$, sistemas antiferromagnéticos en redes no bipartitas, sistemas magnéticos antiferromagnéticos en presencia de un campo externo en redes bipartitas al ser cuantizados en la dirección perpendicular al campo magnético,

entre muchos otros. En todos estos modelos, los factores de Boltzmann asociados a las posibles configuraciones en la representación de integral de camino pueden ser negativos, y por lo tanto no pueden ser interpretados como probabilidades [12]. Aún si se lograra definir probabilidades de transición positivas que satisficieran balance detallado y accesibilidad, las fluctuaciones del signo de las configuraciones generarían fuertes cancelaciones a algunas contribuciones al observable físico, con lo cual sería imposible lograr medirlo con precisión usando estos métodos numéricos.

Algunos de los muchos problemas de signos que presentan los sistemas fermiónicos han sido solucionados utilizando el algoritmo de meron cluster (MCA) [13], [15] dicho algoritmo fue desarrollado en primera instancia con el objetivo de solucionar el problema de signo asociado a la fase del factor de Boltzmann $\exp(i\theta Q)$ que se manifiesta en la teoría cuántica de campo simétrica $(1+1) - dO(3)$, para un ángulo $\theta = \pi$ [50]. En este caso el problema del signo se hace patente al realizar el update de algunos cluster, aquellos que generan un cambio en el signo de la configuración de una forma $(-1)^Q$, donde Q es la carga topológica, propiedad del instanton que aparece en la solución semi-clásica de la teoría de Yang-Mills.

Una solución ingenua para este problema numérico mediante algoritmos de cluster sería no permitir el update de aquellos cluster que modifiquen el signo de la configuración, sin embargo dicho procedimiento quebraría la libertad de update de cada uno de los cluster con probabilidad $1/2$, la cual es la principal ventaja que presentan los algoritmos de cluster [1], [2] al incluir el concepto de observables mejorados y evitan el problema conocido de critical slowing down, esto es la incapacidad de poder generar en la simulación configuraciones estadísticamente independientes entre sí. Otra razón por la cual no se debe perder la libertad de update de cada uno de los cluster con probabilidad $1/2$ es relativa a una ganancia estadística ya que se perdería el factor de ganancia exponencial 2^{N_c} donde N_c es el número de cluster generados en la configuración, lo cual permite obtener resultados muy precisos con pocos pasos estocásticos. Dicha ganancia estadística se utilizó para medir la función densidad de probabilidad de la magnetización en los modelos de espines cuánticos XY y de Heisenberg [38], [39].

Otros métodos numéricos interesantes capaces de simular algunos sistemas magnéticos frus-

trados son el bien conocido algoritmo de gusano (WA) [28] y el método estocástico (SSE) de expansión en serie. El primero no sufre problemas de critical slowing down, y con este método se ha logrado obtener resultados muy precisos para la cadena de Ising con campo magnético transversal [51]. El segundo método es aplicable para una expansión del factor $\exp(-\beta\hat{\mathcal{H}})$ definido de manera positiva y ha sido aplicado con gran éxito para el modelo de Heisenberg anisotrópico antiferromagnético sin campo externo [12] y para el modelo de Heisenberg anisotrópico XXZ $s=1/2$ en presencia de un campo magnético externo [27].

Si bien, con estos diferentes métodos numéricos se ha logrado estudiar algunos sistemas frustrados de espines cuánticos, cabe destacar que el problema del signo que se podría generar al simular sistemas magnéticos frustrados no tiene una solución general, sólo puede ser resuelto en algunos casos particulares. La principal dificultad que se genera al simular sistemas magnéticos con problemas de signos está íntimamente relacionado con la gran ventaja que presenta una simulación del tipo Monte Carlo. En efecto, en una simulación tipo Monte Carlo se generan diferentes configuraciones del sistema $[s_i]$ cada una de ellas generadas con probabilidad $p[s_i] = \exp(-\mathcal{S}[s_i])/Z$, donde $\mathcal{S}[s_i]$ corresponde a la acción de la configuración $[s_i]$ de espines del sistema; con esto durante la simulación un conjunto de r configuraciones son visitadas: $[s_1] \rightarrow [s_2] \rightarrow \dots [s_i] \rightarrow \dots \rightarrow [s_r]$ después del proceso de termalización, utilizando las configuraciones generadas en esta cadena de Markov se puede calcular algún observable físico \mathcal{O} como un promedio de las contribuciones al observable de cada una de estas configuraciones:

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mathcal{O}[s_i] \quad . \quad (4.1)$$

En este proceso se generan con mayor probabilidad aquellas configuraciones que tienen mayor peso estadístico $p[s_i]$, criterio conocido como muestreo por importancia (importance sampling). Si el algoritmo satisface microreversibilidad y ergodicidad, entonces el promedio del observable medido durante la simulación corresponde al promedio térmico usando Mecánica Estadística (Teorema cuasi ergódico):

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{[s]} \mathcal{O}[s] \exp(-\mathcal{S}[s]) \quad . \quad (4.2)$$

Por lo tanto, la principal ventaja de una simulación tipo Monte Carlo en sistemas de muchas partículas es que se logra obtener promedios de observables físicos con alta precisión en un tiempo que escale en forma polinomial con el número de partículas \mathcal{N} del sistema, con lo cual se logra reducir de manera importante el enorme tiempo que se gastaría al generar todo el espacio de configuraciones $[s_i]$ de la Ecuación [4.2], el cual escala de manera exponencial con el número de partículas \mathcal{N} . Por ejemplo para el caso más simple, i.e. el modelo de Ising, el espacio de configuraciones del sistema crece con el número de sitios del sistema en la forma $2^{\mathcal{N}}$. Desafortunadamente cuando existe un problema de signo en la simulación tipo Monte Carlo, la ganancia del tipo polinomial en el tiempo estocástico desaparece, lo que conduce a que el problema del signo sea un problema de clase no polinomial determinista (NP) [14], [52].

Aunque el problema del signo al ser un problema de clase NP no posea una solución general, como se mencionó anteriormente si se puede solucionar para algunos casos específicos [12], [13] entre otros. En el presente capítulo se describe el algoritmo de meron cluster [13] aplicado a sistemas de espines cuánticos frustrados debido a la interacción con un campo magnético, en particular aplicado al modelo de Heisenberg anisótropico definido en una cadena para el caso unidimensional y en una red rectangular para el caso de dos dimensiones espaciales, en presencia de un campo magnético externo de magnitud constante. Este algoritmo al igual que el LCA [29], [30], estudiado en el capítulo 2, se basa principalmente en la representación de integral de camino del hamiltoniano con lo cual se logra mapear el sistema de espines cuánticos de d dimensiones en un sistema de espines clásicos tipo Ising de $d + 1$ dimensiones, como este método ya fue descrito en detalle en el capítulo 2, omitiremos algunos detalles del formalismo y nos enfocaremos en especial de los aspectos técnicos para solucionar el problema del signo que aparece para el caso antiferromagnético al utilizar el MCA. En el capítulo 5 se utiliza este algoritmo como herramienta para poder estudiar el modelo de Heisenberg antiferromagnético acoplado a un campo magnético externo uniforme en una y dos dimensiones espaciales, al igual que en escaleras antiferromagnéticas de espines cuánticos en presencia de un campo magnético externo uniforme.

4.1. Algoritmo de Meron Cluster (MCA) para el modelo de Heisenberg anisotrópico en un campo externo.

Se considera un sistema antiferromagnético de espines cuánticos $s = 1/2$, donde los operadores de espines están denotados por las etiquetas de sitio x, y que pertenecen a una red tanto en una dimensión espacial como en una red rectangular de dos dimensiones, se considera la interacción entre primeros vecinos y la interacción de un campo magnético externo, también se considera condiciones de borde periódicas para las interacciones. El hamiltoniano que describe este sistema puede ser escrito como:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \sum_{\langle x,y \rangle} \left(J(\hat{S}_x^{(1)}\hat{S}_y^{(1)} + \hat{S}_x^{(2)}\hat{S}_y^{(2)}) + J_3\hat{S}_x^{(3)}\hat{S}_y^{(3)} \right) - B \sum_x \hat{S}_x^{(1)} \\ &= \sum_{\langle x,y \rangle} \hat{h}_{x,y} + \sum_x \hat{h}_{B_x} \quad ,\end{aligned}\tag{4.3}$$

para un sistema antiferromagnético $J > 0$, acá J_3 denota una anisotropía uniaxial que puede ser positiva negativa o nula y B representa el campo magnético externo aplicado al sistema. Las interacciones $\hat{h}_{x,y}$ y \hat{h}_{B_x} están definidas por:

$$\hat{h}_{x,y} = J \left(\hat{S}_x^{(1)}\hat{S}_y^{(1)} + \hat{S}_x^{(2)}\hat{S}_y^{(2)} \right) + J_3\hat{S}_x^{(3)}\hat{S}_y^{(3)}, \quad \hat{h}_{B_x} = -B\hat{S}_x^{(1)} \quad .\tag{4.4}$$

Para escribir la función partición del sistema como una integral de camino utilizando la fórmula de Trotter Suzuki conviene en esta ocasión descomponer el hamiltoniano en $(2d + 1)$ términos \hat{H}_i , donde $d = 1, 2$ corresponde a la dimensión del sistema. Para el caso $d = 1$ se elije:

$$\hat{H}_1 = \sum_{x \text{ par}} \hat{h}_{x,x+\hat{1}}, \quad \hat{H}_2 = \sum_{x \text{ impar}} \hat{h}_{x,x+\hat{1}}, \quad \hat{H}_3 \equiv \hat{H}_B = \sum_x \hat{h}_{B_x} \quad ,\tag{4.5}$$

y para el caso $d = 2$:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \sum_{\substack{x=(m,n) \\ m+n \text{ par}}} \hat{h}_{x,x+\hat{j}}, & \hat{H}_2 &= \sum_{\substack{x=(m,n) \\ m+n \text{ par}}} \hat{h}_{x,x+\hat{i}}, & \hat{H}_3 &= \sum_{\substack{x=(m,n) \\ m+n \text{ impar}}} \hat{h}_{x,x+\hat{j}}, \\ \hat{H}_4 &= \sum_{\substack{x=(m,n) \\ m+n \text{ impar}}} \hat{h}_{x,x+\hat{i}}, & \hat{H}_5 \equiv \hat{H}_B &= \sum_x \hat{h}_{B_x} \quad . \end{aligned} \quad (4.6)$$

De esta forma la función partición del sistema puede ser escrita como:

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} Tr \left[\left(\exp(-\epsilon \hat{H}_1) \exp(-\epsilon \hat{H}_2) \cdots \exp(-\epsilon \hat{H}_{2d+1}) \right)^N \right] \quad . \quad (4.7)$$

Recordar que para la descomposición del hamiltoniano de Ecuaciones. (4.5) y (4.6) es importante notar que cada uno de los términos que componen un determinado \hat{H}_i conmutan entre sí, sin embargo dos términos diferentes \hat{H}_i no conmutan. Para escribir la función partición como una integral de camino, se insertan $(2d+1)N$ identidades entre cada factor exponencial, donde $\epsilon = \beta/N$ representa el espaciado de red elemental a lo largo de la dimensión extra de la red de $d+1$ dimensiones. Con esta manipulación formal, se obtiene una red auxiliar de $d+1$ dimensiones de espines clásicos tipo Ising. En este caso debido a la nueva interacción $\hat{H}_{2d+1} \equiv \hat{H}_B$ de los espines del sistema con el campo magnético aplicado, la red auxiliar de dominio Λ de dimensión $d+1$, de longitudes L_x, L_y y $L_t = (2d+1)N$ que se genera al representar la función partición vía integral de camino, está constituida esta vez por $(2d+1)N$ time slices. Utilizando los autoestados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ del operador $\hat{\sigma}^{(3)}$ las matrices de transferencia que determinan las posibles configuraciones de espines en la red auxiliar pueden ser representadas por:

$$\hat{\mathcal{T}}_1 \equiv e^{-\epsilon \hat{h}_{x,y}} := \begin{bmatrix} \mathcal{A} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{B} & \mathcal{C} & 0 \\ 0 & \mathcal{C} & \mathcal{B} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathcal{A} \end{bmatrix} \begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \quad (4.8)$$

$$\hat{\mathcal{T}}_B \equiv e^{-\epsilon \hat{h}_{B_x}} := \begin{bmatrix} \mathcal{E} & \mathcal{F} \\ \mathcal{F} & \mathcal{E} \end{bmatrix} \begin{array}{l} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{array} \quad (4.9)$$

los elementos no nulos son:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A} &= \langle \uparrow \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \uparrow \rangle = \langle \downarrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \downarrow \downarrow \rangle = \exp(-\epsilon J_3/2) \quad , \\
\mathcal{B} &= \langle \uparrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \downarrow \rangle = \langle \downarrow \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \downarrow \uparrow \rangle = \cosh(\epsilon J/2) \quad , \\
\mathcal{C} &= \langle \uparrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \downarrow \uparrow \rangle = \langle \downarrow \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \downarrow \rangle = -\sinh(\epsilon J/2) \quad , \quad (4.10)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{E} &= \langle \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{B_x}) | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{B_x}) | \downarrow \rangle = \cosh(\epsilon B/2) \quad , \\
\mathcal{F} &= \langle \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{B_x}) | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{B_x}) | \uparrow \rangle = \sinh(\epsilon B/2) \quad . \quad (4.11)
\end{aligned}$$

Acá al igual que en el capítulo 2, se omitió un prefactor común irrelevante $e^{\epsilon J_3/4}$ en $\hat{\mathcal{T}}_1$.

En estas ecuaciones, los vectores bra $\langle \uparrow |$ y $\langle \downarrow |$ son el autoestado dual del operador $\hat{\sigma}^3$ definido en el time slice t , y los vectores ket $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ son los autoestados definidos en el time slice $t+1$ de la red auxiliar de $d+1$ dimensiones. Cabe destacar que se escogió una dirección de cuantización perpendicular a la del campo magnético aplicado, de manera que se pueda realizar el update de cada uno de los clusters de manera independiente con probabilidad $1/2$. Esta elección es esencial, debido a que una probabilidad de flip dependiente del valor de campo externo conduciría raramente al update de los clusters para valores altos del campo magnético B y/o bajas temperaturas, lo cual destruiría la eficiencia de la mayoría de los algoritmos de cluster [51].

En la representación de integral de camino de la función partición, los elementos no nulos $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \mathcal{E}$ y \mathcal{F} de la matrices de transferencia, definen las configuraciones permitidas de la red auxiliar de $d+1$ dimensiones. En particular los elementos no nulos \mathcal{A}, \mathcal{B} y \mathcal{C} de la matriz de transferencia $\hat{\mathcal{T}}_1$ determinan el tipo de plaquetas activas (interacción de 4 espines de la red auxiliar) ubicados entre 2 time slices consecutivos $\Lambda_k \Lambda_{k+1}$, $\forall k \neq (2d+1)i-1$, $i = 1, 2, \dots, N$; mientras que los elementos no nulos \mathcal{E} y \mathcal{F} de la matriz de transferencia $\hat{\mathcal{T}}_B$ (que denota la interacción de los espines de la red original con el campo magnético aplicado B) se realizan en forma de interacción de 2 espines de la red auxiliar ubicados entre 2 time slices consecutivos $\Lambda_k \Lambda_{k+1}$ con $k = (2d+1)i-1$, $i = 1, 2, \dots, N$ (para sencillez de la notación, estas interacciones entre 2 espines de la red auxiliar se denotarán también como plaquetas). Este mecanismo se

muestra gráficamente en la Figura 4.1 para el caso de dos dimensiones y para $N = 1$.

De las Ecuaciones (4.10) y (4.11) se puede apreciar que el problema de signo se genera en

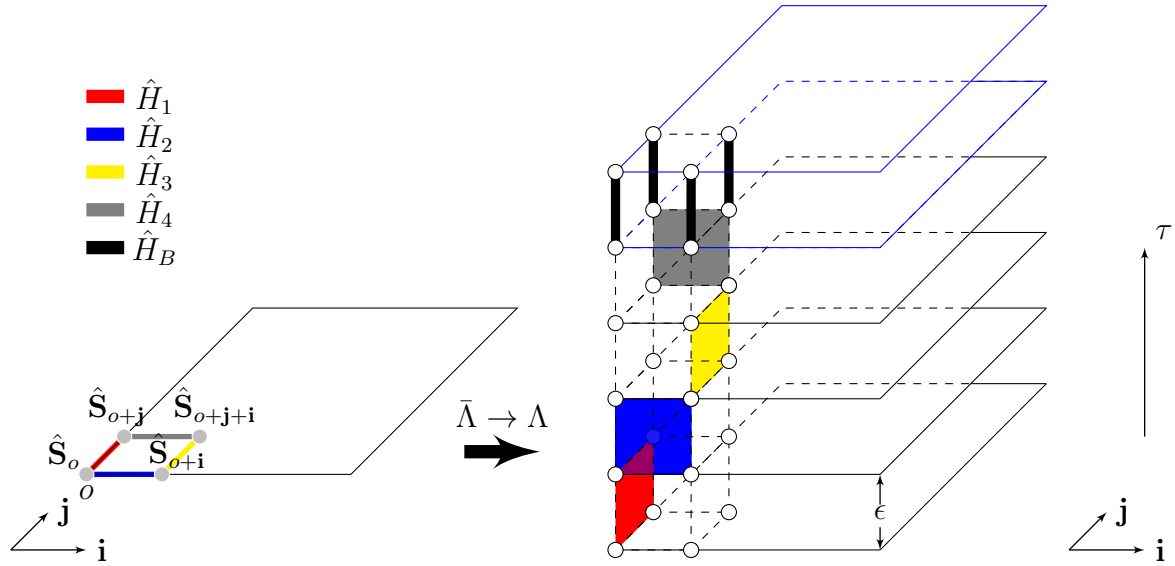


Figura 4.1: Esquema que muestra como se realizan las interacciones \hat{H}_i en forma de plaquetas en la red auxiliar para el caso $d = 2$. A la izquierda se ha esquematizado mediante círculos de color gris claro 4 de los espines cuánticos de la red original, parte de las interacciones \hat{H}_i se han denotado por líneas de color entre estos espines, la interacción de \hat{H}_1 por línea de color rojo, \hat{H}_2 por línea azul, \hat{H}_3 por línea amarilla, \hat{H}_4 por línea gris oscura y la nueva interacción del campo magnético sobre los espines se ha denotado por color negro. A la derecha se muestra la red auxiliar formado el conjunto de time slices para el caso $N = 1$, los espines de esta red se han denotado por círculos de color blanco, se puede apreciar como las interacciones entre 2 espines cuánticos de la red original se realiza en forma de plaquetas entre 4 espines de la red auxiliar, y la nueva interacción del campo con los espines se realiza entre 2 espines de la red auxiliar, las plaquetas activas y la interacción de campo se han denotado por colores respetando el utilizado para cada \hat{H}_i . por ejemplo la interacción entre los espines \hat{S}_o y \hat{S}_{o+j} (línea roja) que forma parte de \hat{H}_1 se realiza en forma de plaqueta entre los time slice Λ_0 y Λ_1 (en la plaqueta roja). La nueva interacción de campo se realiza entre 2 espines entre los time slices Λ_4 y Λ_5 en la red auxiliar

los elementos de matriz \mathcal{C} y \mathcal{F} para valores $J > 0$ y $B < 0$, respectivamente; el problema de signo aparente en \mathcal{F} puede ser solucionado trivialmente escogiendo $B > 0$, lo cual no afecta las propiedades físicas del sistema descrito por el hamiltoniano (4.3). Sin embargo, para una interacción antiferromagnética, J es necesariamente positivo, lo que genera que el elemento de matriz \mathcal{C} sea negativo y en tal caso se imposibilita la interpretación de este término como un factor de Boltzmann (o probabilidad) en el proceso de la simulación.

Con el fin de tener el control sobre el problema del signo es útil primero reescribir cada uno de los elementos no triviales de las matrices de transferencia como el producto entre el signo de la configuración elemental (plaquetas) y el factor de Boltzmann asociado a cada una de ellas:

$$\begin{aligned}\mathcal{A} &= \langle \uparrow \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \uparrow \rangle = \text{Sign} \left[\langle \uparrow \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \uparrow \rangle \right] e^{-\mathcal{S}[\langle \uparrow \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \uparrow \rangle]} , \\ \mathcal{B} &= \langle \uparrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \downarrow \rangle = \text{Sign} \left[\langle \uparrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \downarrow \rangle \right] e^{-\mathcal{S}[\langle \uparrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \uparrow \downarrow \rangle]} , \\ \mathcal{C} &= \langle \uparrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \downarrow \uparrow \rangle = \text{Sign} \left[\langle \uparrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \downarrow \uparrow \rangle \right] e^{-\mathcal{S}[\langle \uparrow \downarrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{x,y}) | \downarrow \uparrow \rangle]} ,\end{aligned}\quad (4.12)$$

y para los elementos de la segunda matriz de transferencia:

$$\begin{aligned}\mathcal{E} &= \langle \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{B_x}) | \uparrow \rangle = \text{Sign} \left[\langle \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{B_x}) | \uparrow \rangle \right] e^{-\mathcal{S}[\langle \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{B_x}) | \uparrow \rangle]} , \\ \mathcal{F} &= \langle \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{B_x}) | \downarrow \rangle = \text{Sign} \left[\langle \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{B_x}) | \downarrow \rangle \right] e^{-\mathcal{S}[\langle \uparrow | \exp(-\epsilon \hat{h}_{B_x}) | \downarrow \rangle]} .\end{aligned}\quad (4.13)$$

Donde $\text{Sign}[x]$ es la función signo:

$$\text{Sign}[x] = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ -1 & \text{si } x < 0 \end{cases}\quad (4.14)$$

así los signos de cada uno de los elementos no trivial de las matrices de transferencia serán:

$$\begin{aligned}\text{Sign}[\mathcal{A}] &= 1 , \\ \text{Sign}[\mathcal{B}] &= 1 , \\ \text{Sign}[\mathcal{C}] &= -\text{Sign}[\mathcal{J}] , \\ \text{Sign}[\mathcal{E}] &= 1 , \\ \text{Sign}[\mathcal{F}] &= \text{Sign}[\mathcal{B}] .\end{aligned}\quad (4.15)$$

Con esto los factores de Boltzmann de cada uno de los elementos de matriz quedan definidos de manera positiva:

$$\begin{aligned}
e^{-\mathcal{S}[\mathcal{A}]} &= \exp(-\epsilon J_3/2) \quad , \\
e^{-\mathcal{S}[\mathcal{B}]} &= \cosh(\epsilon J/2) \quad , \\
e^{-\mathcal{S}[\mathcal{C}]} &= \sinh(\epsilon |J|/2) \quad , \\
e^{-\mathcal{S}[\mathcal{E}]} &= \cosh(\epsilon B/2) \quad , \\
e^{-\mathcal{S}[\mathcal{F}]} &= \sinh(\epsilon |B|/2) \quad .
\end{aligned}
\tag{4.16}$$

Usando los valores de signo de estas configuraciones elementales permitidas (plaquetas activas) podemos definir el signo global de una configuración de espines del sistema auxiliar como el producto de los signos de las plaquetas activas de la cual esta hecha la configuración de espines $[s]$. Por lo tanto los posibles valores del signo de una configuración $[s]$ de la red auxiliar pueden ser $\text{Sign}[s] = 1$ o $\text{Sign}[s] = -1$. De esta manera la función partición también puede ser escrita como:

$$Z = \sum_{[s]} \text{Sign}[s] \exp(-\mathcal{S}[s]) \quad , \tag{4.17}$$

esta ecuación representa la función partición del sistema original de espines cuánticos definido en una red de d dimensiones, escrita como una integral de camino sobre las posibles configuraciones $[s]$ de la red auxiliar de $d + 1$ dimensiones con un factor de Boltzmann asociado $\exp(-\mathcal{S}[s])$ y signo $\text{Sign}[s] = \pm 1$.

A continuación se explica de manera breve cómo el algoritmo de meron-cluster propuesto originalmente en [13] soluciona el problema del signo presente en estos sistemas físicos. La idea principal es calcular valores de expectación de un observable $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle$ del sistema original utilizando un sistema modificado de acción $\mathcal{S}[s]$ que no sufre el problema del signo:

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s \mathcal{O}[s] \text{Sign}[s] \exp(-\mathcal{S}[s]) = \frac{\langle \hat{\mathcal{O}} \text{Sign} \rangle}{\langle \text{Sign} \rangle} \quad . \tag{4.18}$$

Los promedios en esta última igualdad son calculados sobre el sistema modificado que no sufre problema del signo. De ello se desprende que el valor de expectación original $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle$ se calcula

como la división de dos valores de expectación modificados $\langle \hat{O}\text{Sign} \rangle$ y $\langle \text{Sign} \rangle$ los cuales son exponencialmente pequeños tanto en el inverso de la temperatura β como en el volumen del sistema como fue mostrado en [13]. Debido a las fuertes cancelaciones provenientes de las fluctuaciones de signos, ambos términos que aparecen en esta relación son muy pequeños en comparación con sus errores estadísticos por lo que en la práctica resultan imposible de medir con precisión. La solución de este aparente problema involucra un procedimiento de dos etapas: en una primera etapa el algoritmo identifica cualquier contribución de un signo con otra configuración pareada de igual peso estadístico pero con signo opuesto, dichas configuraciones pareadas no darán una contribución neta al observable. Así, sólo unas pocas contribuciones desapareadas relevantes permanecen. En una segunda etapa, el algoritmo descarta estas contribuciones pareadas mediante una decisión tipo Metropolis, e incluye solamente los aportes a los observables que son relevantes (ver discusión de estimadores mejorados en la próxima sección 4.2). Este paso tiene como objetivo suprimir configuraciones multi-meron, las cuales deben ser evitadas en el proceso estocástico, ya que no contribuyen a los observables físicos (ver discusión del concepto de multi-meron en la sección 4.2 siguiente).

En el sistema modificado, sin los signos menos, es posible definir un algoritmo de cluster definiendo breakups sobre todas las plaquetas activas de la red auxiliar, lo cual corresponden a posibles tipos de bonds entre espines en cada una de las plaquetas activas, consideradas durante la dinámica de update definido por el algoritmo. De esta manera se puede construir una cadena de Markov que cumpla balance detallado y la condición de micro-causalidad de una manera similar a la que se llevo a cabo con el LCA [29], [30], estudiado en el Capitulo 2. Efectivamente, en el sistema modificado los pesos estadísticos de las configuraciones son siempre positivos, por lo que pueden ser interpretados como factores de Boltzmann. En la Figura 4.2 se muestran los posibles breakups permitidos para cada una de las plaquetas activas con sus respectivas probabilidades. como dicho anteriormente estas probabilidades deben satisfacer balance detallado:

$$P(\mathcal{C}_\alpha)\mathcal{W}(\mathcal{C}_\alpha \rightarrow \mathcal{C}_\beta) = P(\mathcal{C}_\beta)\mathcal{W}(\mathcal{C}_\beta \rightarrow \mathcal{C}_\alpha) \quad , \quad (4.19)$$

donde $\mathcal{W}(\mathcal{C}_\alpha \rightarrow \mathcal{C}_\beta)$ es la probabilidad de transición desde el estado α al estado β y $P(\mathcal{C}_\alpha)$ es

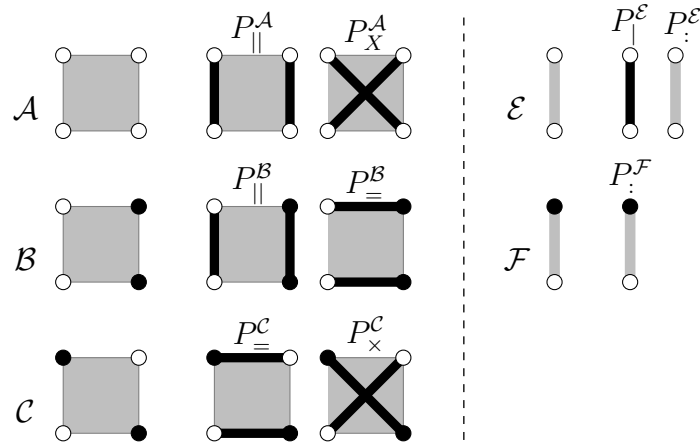


Figura 4.2: Posibles breakups para cada una de las plaquetas activas para el modelo de Heisenberg anisotrópico acoplado a un campo externo, a la izquierda se han dibujado las posibles configuraciones de espín de la matriz transferencia \hat{T}_1 con sus respectivos breakups y a la derecha la de la matriz transferencia \hat{T}_B . Estados de espines up $s = 1$ se han denotado con círculos de color blanco y valor de espín down $s = -1$ mediante círculos de color negro, los posibles breakups se han denotado por líneas gruesas de color negro, con sus respectivas probabilidades

esencialmente el factor de Boltzmann de la configuración \mathcal{C}_α . Por ejemplo, como se muestra en la Figura 4.2, $P_{\times}^{\mathcal{C}}$ es la probabilidad de transición desde la plaqueta \mathcal{C} a la plaqueta \mathcal{A} y $P_{=}^{\mathcal{C}}$ es la probabilidad de transición desde la plaqueta \mathcal{C} a la plaqueta \mathcal{B} .

Uniendo los break-ups definidos en cada una de las plaquetas activas, diferentes cuerdas son construidas conocidas como clusters. En este caso, a diferencia del LCA, debido al breakups tipo “ : ” definidos en las interacciones \mathcal{E} y \mathcal{F} los clusters que se pueden definir en la red auxiliar de $d + 1$ dimensiones pueden ser cuerdas abiertas o cerradas, recordemos que para el LCA debido a los breakups definidos, sólo podían existir cluster cerrados. Sin embargo, cada espín s de la red auxiliar de $d + 1$ dimensiones pertenecerá a un único cluster y a cada uno de los clusters se le realizarán un update con probabilidad $1/2$ independiente de los otros cluster.

4.2. Meron Cluster y Sectores Meron.

El signo de una configuración $\text{Sign}[s]$ fue definido como el producto de los signos de las configuraciones elementales o plaquetas de la cual está compuesta dicha configuración. Esta

distinción puede ser llevada a los cluster generados en cada configuración durante el proceso estocástico, definiendo un meron-cluster como aquel cluster cuyo update generaría un cambio de signo de la configuración $\text{Sign}[s]$. Un meron cluster tiene las siguientes características:

- El update de un meron cluster produce un cambio en el signo de la configuración de espines de la red auxiliar.
- Los meron cluster son cuerdas abiertas cuyos extremos que denotamos como cabeza y cola poseen valores de espines distintos.

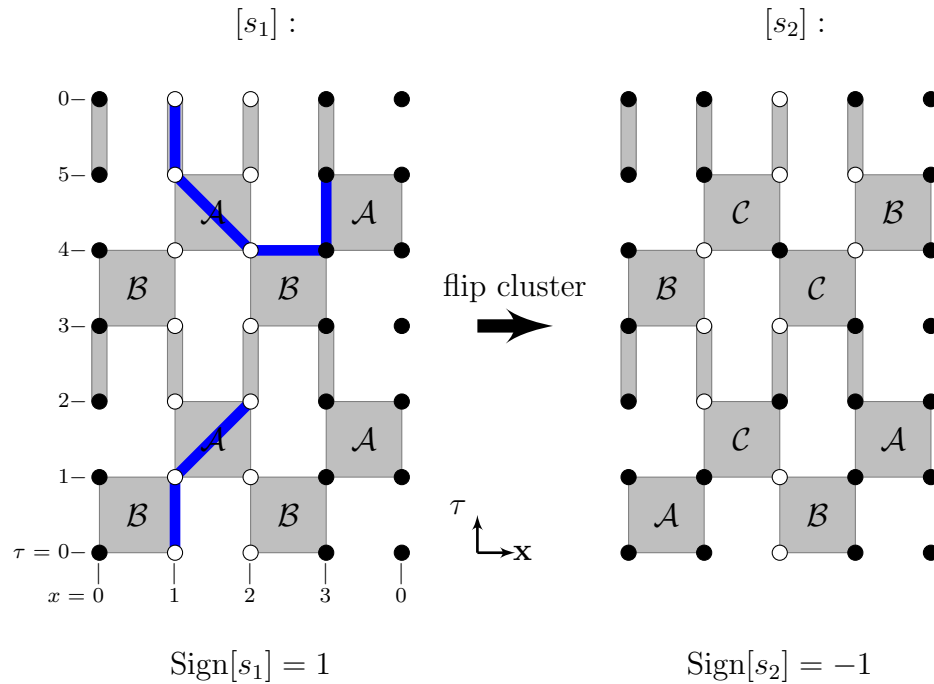


Figura 4.3: Ejemplo de un meron cluster construido mediante el proceso estocástico del algoritmo para un sistema de espines cuánticos descrito por el hamiltoniano de Eq. (4.3) para el caso $d = 1$ de longitud $L = 4$ y condición de borde periódicas. En la parte izquierda se ha dibujado una configuración de espines de la red auxiliar $[s_1]$ (de signo positivo $\text{Sign}[s_1] = 1$), formada por un conjunto de time slices y plaquetas activas para el caso $N = 2$. Las plaquetas activas A, B, C, E y F se han denotado mediante plaquetas de color gris; estados de espines up $s = 1$ y down $s = -1$ se han denotado por círculos de color negro y blanco, respectivamente. La línea gruesa de color azul representa el meron cluster. Notar que si se realiza un flip de este cluster entonces se obtiene la configuración de espines del lado derecho $[s_2]$ que posee esta vez signo negativo $\text{Sign}[s_2] = -1$. En otras palabras, el flip de dicho cluster (de color azul) produce un cambio de signo de la configuración de espines de la red auxiliar, por lo que dicho cluster corresponde a un meron cluster.

En la Figura 4.3 se muestra un ejemplo gráfico de un meron cluster producido por la dinámica estocástica del MCA. De modo pedagógico se consideró el caso en una dimensión para una red pequeña de 4 espines descritos por el hamiltoniano de la Eq. (4.3). En esta figura se han dibujado 2 posibles configuraciones de espines $[s_1]$ y $[s_2]$ (a la izquierda, y derecha de esta figura, respectivamente) de la red auxiliar de $d + 1$ dimensiones para el caso $N = 2$. La segunda configuración $[s_2]$ es obtenida al realizar el flip del cluster definido en $[s_1]$. Debido a que este flip del cluster produce un cambio de signo en la configuración de espines, entonces el cluster (denotado por línea gruesa azul en $[s_1]$) corresponde a un meron cluster.

Esta definición de meron cluster conduce a la distinción del espacio de configuración entre el sector cero-meron, el cual está compuesto solamente por cuerdas no meron, y el sector meron, compuesto por al menos un meron-cluster. Así mismo configuraciones con más de un meron cluster son definidas como configuraciones multi-meron. En la Figura 4.4 se ha esquematizado el espacio de configuraciones de la red auxiliar Λ dividida en estos dos sectores, el sector cero-meron y el sector meron, además se han dibujado 2 flechas ambas saliendo desde un punto común, dicho punto puede ser pensado como una configuración generada durante el proceso estocástico, si en dicha configuración creciera a lo menos un cluster tipo meron entonces automáticamente se entraría del sector cero-meron y se generaría una configuración perteneciente al sector meron (proceso denotado por la flecha que sale del sector cero-meron), en cambio si no se generan ningún cluster tipo meron la siguiente configuración generada en el proceso estocástico sigue estando en el sector cero-meron.

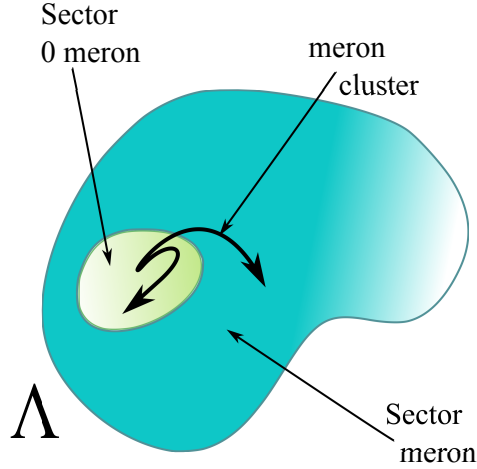


Figura 4.4: Esquema que divide el espacio de configuraciones de espines [s] permitidos de la red auxiliar Λ entre el sector meron y el sector cero-meron. Desde el sector cero-meron, se han dibujado 2 flechas, ambas saliendo desde un punto común, dicho punto puede ser pensado como una configuración generada durante el proceso estocástico, si en dicha configuración se generara a lo menos 1 meron cluster, entonces automáticamente se entraría al sector meron (proceso denotado por la flecha que sale del sector 0-meron). En cambio si no se genera ningún cluster tipo meron, la siguiente configuración generada sigue estando en el sector cero-meron (proceso denotado por la flecha que se mueve por el sector cero-meron).

4.3. Parámetro de orden y observable mejorado.

Utilizando el concepto de meron se puede obtener un factor de ganancia tipo exponencial en la estadística, además, permite calcular los observables por medio de estimadores mejorados calculando propiedades globales de los cluster, como fue demostrado en [53]. Uno de los observables de interés es la magnetización del sistema:

$$\hat{M} = \sum_{i=1}^3 \sum_{x \in \bar{\Lambda}} \hat{S}_x^{(i)} \mathbf{e}_i \quad . \quad (4.20)$$

Por simetría del modelo descrito en la Ecuación (4.3), la única componente promediada distinta de cero es la componente de la magnetización paralela al campo externo aplicado, $\langle \hat{M}^{(2)} \rangle =$

$\langle \hat{M}^{(3)} \rangle = 0$, donde

$$\langle \hat{M}^{(1)} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(\hat{M}^{(1)} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}) \right) = \sum_{x \in \bar{\Lambda}} \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(\hat{S}_x^{(1)} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}) \right) \quad , \quad (4.21)$$

lo que puede ser escrito utilizando la fórmula de Trotter- Suzuki como:

$$Z \langle \hat{M}^{(1)} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{x \in \bar{\Lambda}} \text{Tr}(\hat{S}_x^{(1)}) \prod_{i=1}^{kN} \exp(-\epsilon \hat{H}_i) \quad . \quad (4.22)$$

Esta vez debido al operador $\hat{M}^{(1)}$ que aparece dentro de la traza un nuevo elemento de matriz aparece al introducir las kN identidades entre los factores exponenciales, con forma general:

$$\langle n_\alpha | \hat{S}_x^{(1)} \exp(-\epsilon \hat{H}_i) | n_{\alpha+1} \rangle \quad , \quad (4.23)$$

por lo tanto se puede notar que el promedio de la componente 1 de la magnetización es equivalente a realizar un flip local de cada uno de los espines del time slice de dominio Λ_α . Ahora si recordamos que las configuraciones generadas por el algoritmo corresponden a configuraciones de cuerdas (cluster), entonces el flip local de cada uno de los espines de ese determinado time slice es equivalente a realizar un flip de una parte de las cuerdas que pasan por los puntos $x \in \Lambda_\alpha$. Usando este hecho junto con las propiedades de las cuerdas tipo meron, podemos escribir la magnetización del sistema en términos de estimadores mejorados:

$$\langle \hat{M}^{(1)} \rangle = \frac{1}{2 \langle \delta_{\mathcal{M},0} \rangle} \langle \delta_{\mathcal{M},0} \sum_j W_j \rangle \quad . \quad (4.24)$$

Acá W_j corresponde al winding number temporal del loop cerrado j (que resulta al unir todas las cuerdas abiertas pertenecientes a dicho loop). Si el loop no está compuesto por cuerdas abiertas, entonces necesariamente no contribuye al observable $W = 0$, esto debido a que se debe realizar un update de los espines de un segmento de cuerda que pase por los puntos $x \in \Lambda_\alpha$ lo cual no es posible para una cuerda cerrada. \mathcal{M} corresponde al número de cuerdas meron generadas en la configuración $[s]$ considerada.

La delta de krönecker, restringe el espacio de configuraciones correspondientes al sector cero

meron para el cual se obtienen contribuciones no nulas en el cálculo de la magnetización.

Con el fin de garantizar que la cadena de Markov generada por el algoritmo cumpla con ergodicidad, se debería cumplir que cualquiera de las configuraciones permitidas de la red auxiliar puedan ser accesibles empezando desde una configuración de referencia. Mas aún dicho proceso debería ser reversible. En efecto, cualquier configuración permitida de la red auxiliar de $d + 1$ dimensiones está formada por una combinación de plaquetas permitidas (definidas en las plaquetas activas de la red). Desde este punto de vista, empezando desde una configuración de referencia, cambiando de manera secuencial un set de plaquetas por medio de los breakups definidos en la Figura 4.2, con su respectiva probabilidad, cualquier configuración podría ser alcanzada por medio de la cadena estocástica. Además, debido a que estos procesos de cambio de tipos de plaquetas son reversibles. Se puede acceder la configuración de referencia empezando desde una configuración permitida arbitraria. Este argumento muestra que se cumple ergodicidad para el algoritmo utilizado.

Debido a que el observable de interés es la magnetización, en principio es innecesario generar cualquier configuración que contenga cuerdas meron. Este punto es crucial debido a que permite obtener un factor de ganancia exponencial en la estadística, restringiendo la simulación a sólo el sector cero meron. El cual es exponencialmente pequeño en comparación al espacio total de configuraciones permitidas de la red auxiliar de $d + 1$ dimensiones. Esto podría ser llevado a cabo asociando un factor de Boltzmann nulo a cualquier configuración con al menos un meron cluster. A pesar de esta enorme ventaja estadística, evitar de manera completa el sector meron, puede ralentizar el algoritmo. Por esta razón es conveniente permitir algunas configuraciones del sector meron, los cuales aunque no contribuyan a la magnetización si aceleran la dinámica estocástica reduciendo el tiempo de autocorrelación del algoritmo, teniendo la precaución de no generar configuraciones multi-meron. Este paso se logra introduciendo un factor adicional tipo Boltzmann $q < 1$ para cada una de las cuerdas meron generadas en la configuración, de manera tal que si una nueva configuración es generada con \mathcal{M}' merons a partir de una configuración compuesta por \mathcal{M} merons, la nueva configuración es aceptada con probabilidad condicional $p = \min[1, q^{\mathcal{M}' - \mathcal{M}}]$. En otras palabras si p es mayor que un número

random (definido entre 0 y 1) entonces la nueva configuración generada es aceptada; por otro lado si p resulta menor que el número random la nueva configuración del sistema es rechazada. Como fue demostrado en [15], agregar este factor extra tipo Boltzmann sólo modifica el algoritmo sin modificar la física del sistema cuántico. El objetivo de agregar este factor extra q consiste en evitar que el número de cuerdas meron generadas aumenten a lo largo de la simulación y de esta forma evitar generar configuraciones multi-meron en la cadena de Markov, las cuales no contribuyen al observable.

Capítulo 5

Aplicaciones del MCA

A modo de aplicación del algoritmo de meron cluster explicado anteriormente, en este capítulo se estudian las propiedades físicas del modelo de Heisenberg $S = 1/2$ antiferromagnético en presencia de un campo magnético externo B de magnitud constante, en una y dos dimensiones espaciales. definidos en una cadena de espines de longitud L de número par de espines y en un a red rectangular de dimensiones L_x, L_y de dimensiones pares con condiciones de borde periódicas, respectivamente.

El hamiltoniano que describe este modelo es:

$$\hat{\mathcal{H}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - B \sum_i \hat{S}_i^{(1)} . \quad (5.1)$$

Los posibles break-ups para este modelo definidos en cada una de las plaquetas activas están especificados en la Figura 5.1

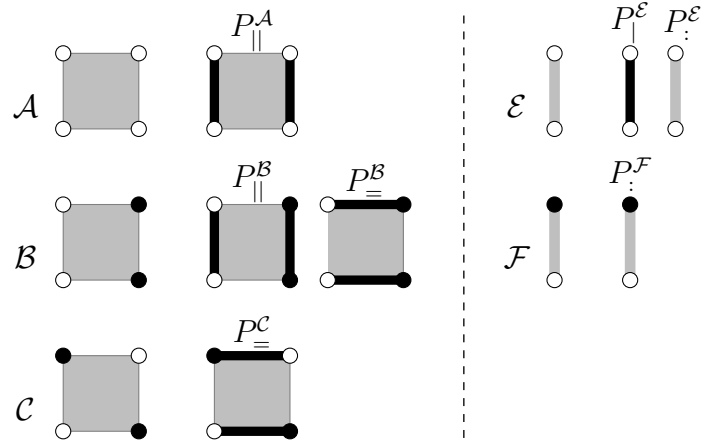


Figura 5.1: Posibles breakups para cada una de las plaquetas activas para el modelo de Heisenberg antiferromagnético acoplado a un campo externo, a la izquierda se han dibujado las posibles configuraciones de espín de la matriz transferencia \hat{T}_1 con sus respectivos breakups y a la derecha la de la matriz transferencia \hat{T}_B . Estados de espines up $s = 1$ se han denotado con círculos de color blanco y valor de espín down $s = -1$ mediante círculos de color negro, los posibles breakups se han denotado por líneas gruesas de color negro, con sus respectivas probabilidades.

Las respectivas probabilidades son:

$$\begin{aligned}
 P_{\parallel}^A &= P_{=}^C = P_{\vdots}^F = 1 \quad , \\
 P_{\parallel}^B &= 1 - P_{=}^B = \frac{\exp(-\epsilon J/2)}{\cosh(\epsilon J/2)} \quad , \\
 P_{\vdots}^E &= 1 - P_{\mid}^E = \tanh(\epsilon|B|/2) \quad .
 \end{aligned}
 \tag{5.2}$$

La constante de interacción espín-espín se fijó como $J = 1$, mientras que el acoplamiento B del campo magnético externo se varió dentro de la región física de interés $0 < B < 6$.

5.1. MCA aplicado a la cadena de Heisenberg antiferromagnética.

Como primera aplicación se estudió este modelo en 1 dimensión en la región de baja temperatura. En la Figura 5.2 se muestra la densidad de magnetización en función del campo magnético externo para cuatro tamaños diferentes de red $L = 60, 80, 160$ y 240 y para tres valores del inverso de la temperatura $\beta = 15, 20$ y 30 . A modo de comparación se incluye también en esta figura los resultados que fueron obtenidos por Fabricius et al en [32] para el límite termodinámico a $T = 0$ para este mismo modelo, los cuales fueron obtenidos mediante diagonalización exacta en redes de tamaños pequeños hasta $L = 16$, por medio de las relaciones de escala de tamaño finito y en el ansatz de Bethe para extraer el límite termodinámico de la magnetización a temperatura cero. Ambos resultados concuerdan con una alta precisión en todo el rango del campo magnético externo $0 < B < 2$, lo cual evidencia que los efectos de tamaño finito no son relevantes para la region $B < 2$ para el caso unidimensional. Con el propósito de estimar los errores de la data numérica, se ha calculado los errores estadísticos para la red pequeña a inverso de temperatura $\beta = 15$ y 20 , y para los diferentes valores de campo magnético. Resulta que estos son bastante pequeños, típicamente de unos pocos por ciento hasta un 3 por ciento, y no pueden ser distinguidos en la Figura 5.2. Cerca de la región del valor umbral $B = 2$ los efectos de tamaño finito pueden ser apreciados en esta figura, y a medida que L aumenta la magnetización se satura a su valor máximo $1/2$ con mayor rapidez, lo cual corresponde a un alineamiento perfecto de los espines en la dirección del campo magnético. Por otro lado a medida que el campo magnético disminuye hasta su valor cero, la magnetización también disminuye hasta llegar a ser nula en $B = 0$, en concordancia con el teorema de Mermin-Wagner. Estos resultados muestran que el algoritmo de meron cluster resulta ser una herramienta muy útil para la simulación de sistemas magnéticos frustrados a temperaturas muy bajas cercanas a cero, lo cual impulsa a utilizar este algoritmo para el estudio de la estructura de las transiciones de fase cuánticas.

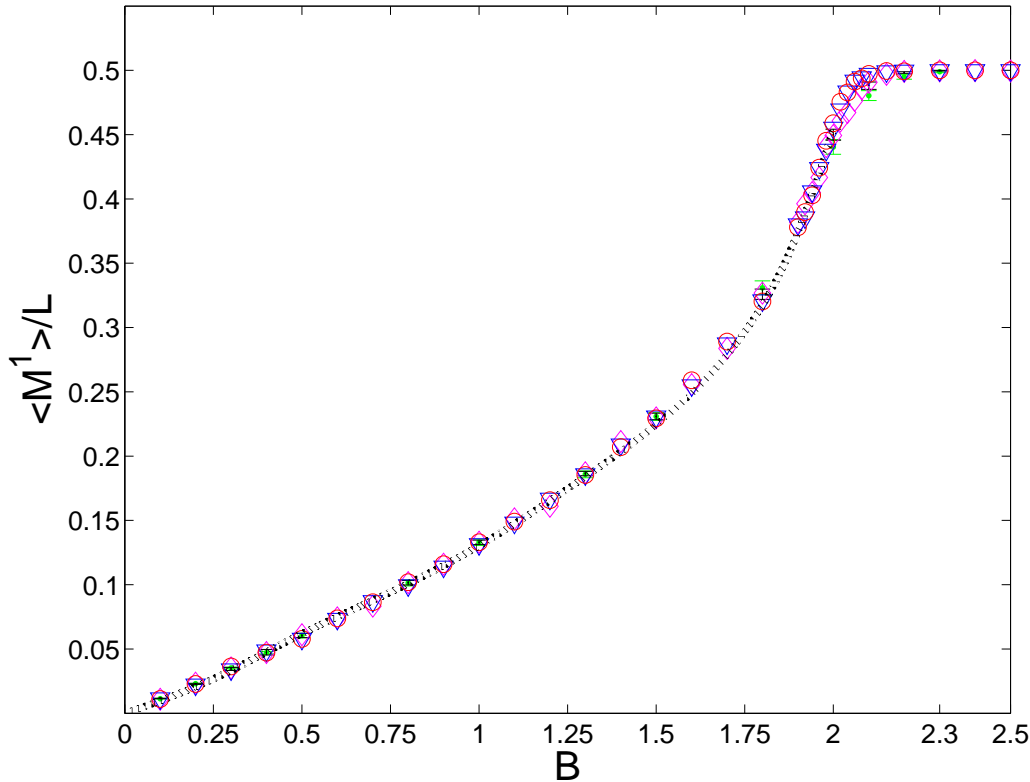


Figura 5.2: Gráfico de la densidad de la magnetización en función del campo magnético externo B para el modelo AFH en $d = 1$ dimensión a muy bajas temperaturas cercanas a cero. La data con los marcadores de punto y cruz corresponden a un anillo de longitud $L = 60$, para valores del inverso de la temperatura $\beta = 15$ y $\beta = 20$, respectivamente; la data de marcador diamante corresponde a $L = 80$ para un valor del inverso de temperatura $\beta = 20$, los marcadores de triángulos invertidos corresponden a $L = 160$ para $\beta = 30$, y los marcadores de círculos corresponden a $L = 240$ para el valor del inverso de temperatura $\beta = 30$. Todas estas simulaciones fueron realizadas utilizando $\epsilon = 0,05$. La línea de puntos corresponde a la data obtenida por Fabricius et al en el artículo [32], la cual fue obtenida mediante comportamiento de escala y el uso del Ansatz de Bethe para la magnetización en el límite termodinámico $L \rightarrow \infty$ y a temperatura $T = 0$.

Como es bien conocido la cadena de espines antiferromagnética de Heisenberg en presencia de un campo externo posee una transición de fase cuántica para el valor crítico $B_c = 2$ a temperatura cero. En este valor crítico, la longitud de correlación ξ diverge y algunas cantidades físicas, como por ejemplo la primera derivada de la entropía de entrelazamiento y la susceptibilidad magnética son singulares, lo cual son características generales de QPT [16]. Para valores de campo magnético por debajo de este valor crítico, la interacción espín-espín

es predominante y la física del sistema es descrita mediante las ondas de espines conocidas como magnones y un ordenamiento antiferromagnético es preferido en el sistema, en cambio para valores de campo por sobre B_c la interacción campo-espín prevalece y el estado base se vuelve ferromagnético en el límite termodinámico del sistema.

En referencia [32] se demostró que a medida que el campo magnético se aproxima a su valor crítico $B_c = 2$ la curva de magnetización posee un singularidad tipo raíz cuadrada. En esta misma línea, han sido ampliamente utilizados el entrelazamiento cuántico y la concurrencia para estudiar QPT en sistemas cuánticos [54]. Haciendo uso de esto, en el artículo [23] Guang-Hua Liu, Ruo-Yan Li y Guang-Shan Tian estudiaron el mismo sistema físico mediante el uso de diagonalización exacta en combinación con técnica de decimación en bloque de evolución de tiempo infinito para calcular el entrelazamiento, la energía del estado fundamental y la magnetización del sistema en función del campo magnético externo. En ese artículo se demuestra que el entrelazamiento cuántico es sensible a cambios sutiles del estado base y que se puede utilizar para describir la magnetización y la QPT. En particular, se muestra evidencia numérica que respalda que la magnetización muestra una singularidad tipo raíz cuadrada cuando $B \rightarrow 2$, y que su primera derivada es discontinua en $B_c = 2$, donde para valores por sobre este valor crítico el sistema es ferromagnético. Se conjetura además que este punto corresponde a una transición de fase cuántica de segundo orden.

En la Figura 5.3b se muestra la primera derivada de la densidad de la magnetización para la cadena de espines AFH para los tamaños $L = 80, 160$ y 240 y para valores del inverso de la temperatura $\beta = 20$ y 30 , la cual fue obtenida mediante la realización de un ajuste de la densidad de la magnetización utilizando una función adecuada con una alta precisión ($R^2 = 0,9999$), y calculando analíticamente su primera derivada (este ajuste se muestra explícitamente en la Figura 5.3a). Se puede apreciar que en la región de muy baja temperatura, a medida que el tamaño del sistema aumenta la forma de la densidad de magnetización colapsa en una única curva, como se muestra en la Figura 5.2. Por lo tanto, el comportamiento de su primera derivada, permite conjeturar la existencia de una discontinuidad alrededor del valor $B_c = 1,97$ cuando L tiende a infinito y a temperatura cero, este valor es muy cercano al valor crítico

$B_c = 2,0$ [23], dentro de un error de 1,5 por ciento.

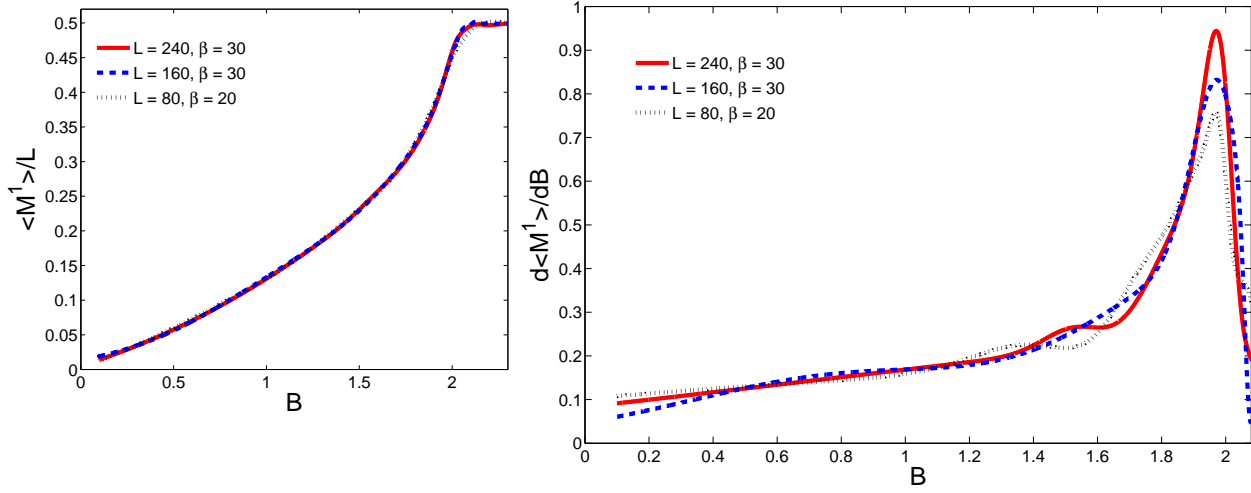


Figura 5.3: (a:) Ajuste de la data numérica de la densidad de la magnetización de la cadena de espines AFH. (b:) Derivada de primer orden de la densidad de la magnetización en función del campo magnético externo B para la cadena de espines cuánticos AFH. El comportamiento de estas curvas permite respaldar la existencia de una discontinuidad en la primera derivada de la magnetización para valor de campo B muy cerca de $B_c = 2,0$ a medida que L tiende a infinito y a $T \rightarrow 0$.

5.2. MCA aplicado a una red de Heisenberg antiferromagnética en $d = 2$.

Para el caso de dos dimensiones espaciales, se estudió el modelo de Heisenberg antiferromagnético en presencia de un campo magnético externo, definidos tanto en redes cuadradas de longitud L como en escaleras de espines de longitudes L y L' ($L \gg L'$). En la Figura 5.4, se muestra la densidad de la magnetización en función del campo magnético externo B para 3 tamaños de redes cuadradas $L = 12, 16$ y 24 , para los valores del inverso de la temperatura $\beta = 15$ y 20 . También se muestran, a modo de comparación, los resultados numéricos obtenidos por K. Fabricius, M. Karbach, U. Löw, y K.-H. Mütter en [32] para la magnetización en el límite termodinámico y a temperatura cero. En esta referencia, se propone una ley sensata para el comportamiento de escala de la energía del estado base a partir de los resultados

numéricos obtenidos mediante diagonalización exacta en pequeñas redes de dimensión hasta 4×4 , y por diferenciación, se logra obtener un resultado aproximado de la magnetización en el límite termodinámico y a temperatura cero. Para valores bajos del campo magnético externo ambos resultados coinciden entre sí con gran precisión y a medida que B aumenta, aparecen desviaciones ligeras, que se puede conjeturar debido a la falta de una expresión analítica exacta para el comportamiento de escala del estado base del sistema, como se menciona en ese artículo. Para valores de campo magnético superiores a $B > 4$ el valor de la densidad de la magnetización se satura a su máximo valor $1/2$, lo cual corresponde a una alineación completa de los espines en dirección del campo magnético aplicado al sistema. A medida que el campo magnético tiende a cero $B \rightarrow 0$ la magnetización también tiende a cero, como lo estipula el teorema de Mermin-Wagner. En comparación con los resultados para dimensión $d = 1$, se puede apreciar que los efectos de tamaño finito son más grandes a medida que el campo magnético aumenta, resultado que es bien conocido.

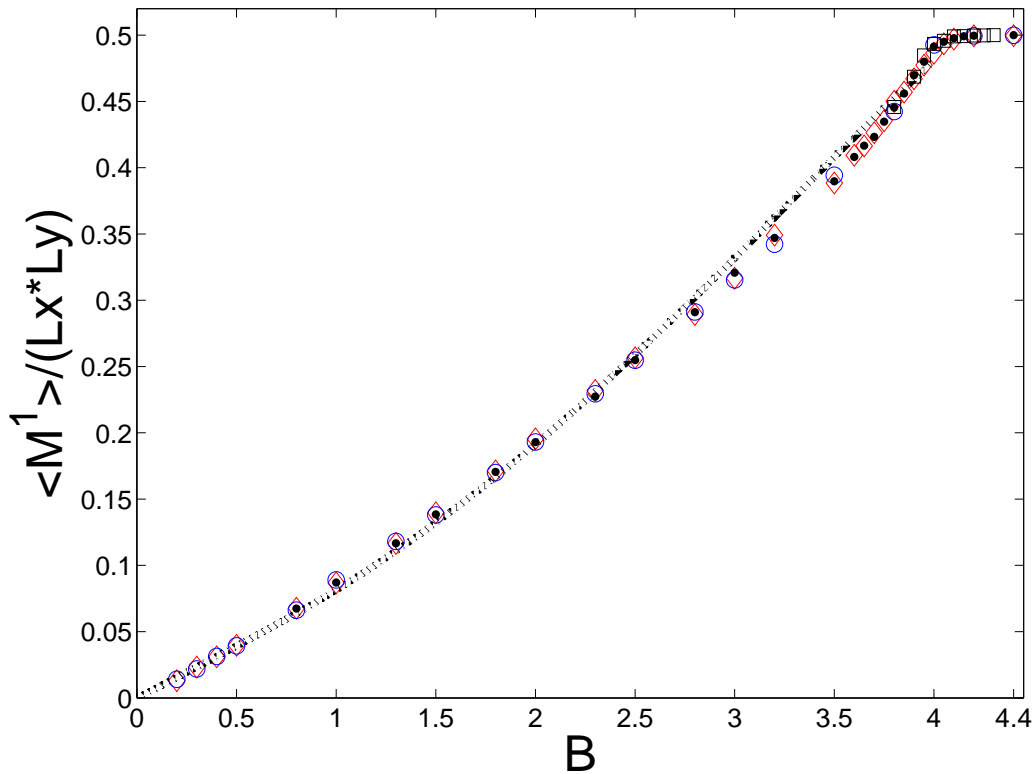


Figura 5.4: Gráfico de la densidad de la magnetización en función del campo magnético externo B para el modelo antiferromagnético de Heisenberg en $d = 2$ dimensiones a temperaturas muy bajas cercanas a cero. La data denotada por marcadores de diamantes corresponden a una red cuadrada de tamaño $L = 12$, para el valor del inverso de temperatura $\beta = 15$, los marcadores de círculos y de puntos gruesos corresponden a una red cuadrada de tamaño $L = 16$, para los valores del inverso de temperatura $\beta = 15$ y $\beta = 20$, respectivamente; y la data representada por cuadrados corresponde a una red cuadrada de tamaño $L = 24$ para un inverso de temperatura $\beta = 20$. La línea con puntos corresponde a la obtenida en el artículo [32] mediante comportamiento de escala para el límite termodinámico a temperatura $T = 0$.

Después de realizar un ajuste con alta precisión de la densidad de la magnetización mostrada en la Figura 5.4 (similar al realizado en una dimensión), el cual se puede ver de manera explícita en la Figura 5.5a, se obtuvo la primera derivada de la densidad de la magnetización para el modelo cuántico AFH en 2 dimensiones espaciales en función del campo magnético externo B , la cual se muestra en la Figura 5.5b, para diferentes tamaños de redes y valores de temperaturas muy bajas. El comportamiento de la primera derivada de la magnetización permite conjeturar la existencia de una discontinuidad cercana al valor de campo $B_c = 3,90$, en el límite termodinámico y a temperatura cero. Dentro del error numérico, este resultado

concuenda bastante bien con el valor crítico $B_c = 4,0$ reportado en [24], con un error de 2.5 por ciento. Sin embargo, con el objetivo de obtener un resultado aún más preciso, se debiera simular redes de tamaños de redes aún mayores de los estudiados, lo cual desgraciadamente es demasiado costoso en tiempo de cálculo computacional.

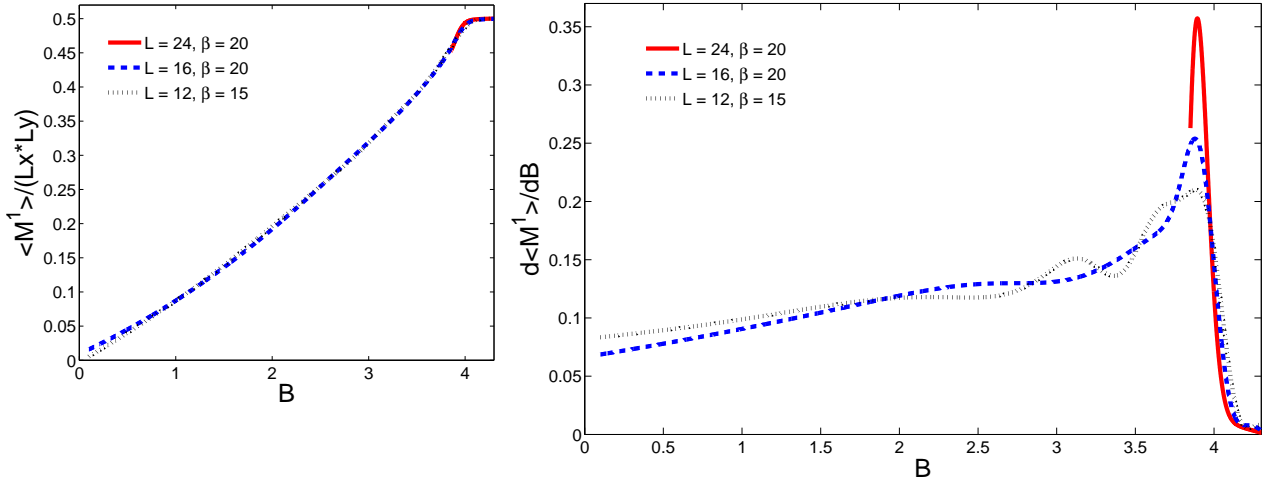


Figura 5.5: (a:) Ajuste de la data numérica de la densidad de la magnetización graficada en Figura 5.4. (b:) Primera derivada de la densidad de la magnetización en función del campo magnético para el modelo AFH en dos dimensiones espaciales. Se puede apreciar una discontinuidad cerca del valor $B_c = 3,90$ en los límites de tamaño infinito y temperatura cero.

También se obtuvieron resultados de la magnetización del modelo AFH en pequeñas redes y para valores de temperaturas altas. En la Figura 5.6 se muestra el gráfico de la densidad de la magnetización en función del campo magnético para una red cuadrada de longitud $L = 4$, para los valores de temperatura $T = 0.5, 1.0, 1.5$ y 2.0 . A modo de comparación, se muestra como sub-gráfico los resultados numéricos obtenidos mediante diagonalización exacta en [32], para los mismos valores de los parámetros utilizados en esta tesis. Se puede observar con una precisión notable que ambas curvas concuerdan entre sí, lo que demuestra la confiabilidad y la precisión con la que funciona el algoritmo de meron-cluster en toda la región de los parámetros considerados para llevar a cabo estas simulaciones numéricas.

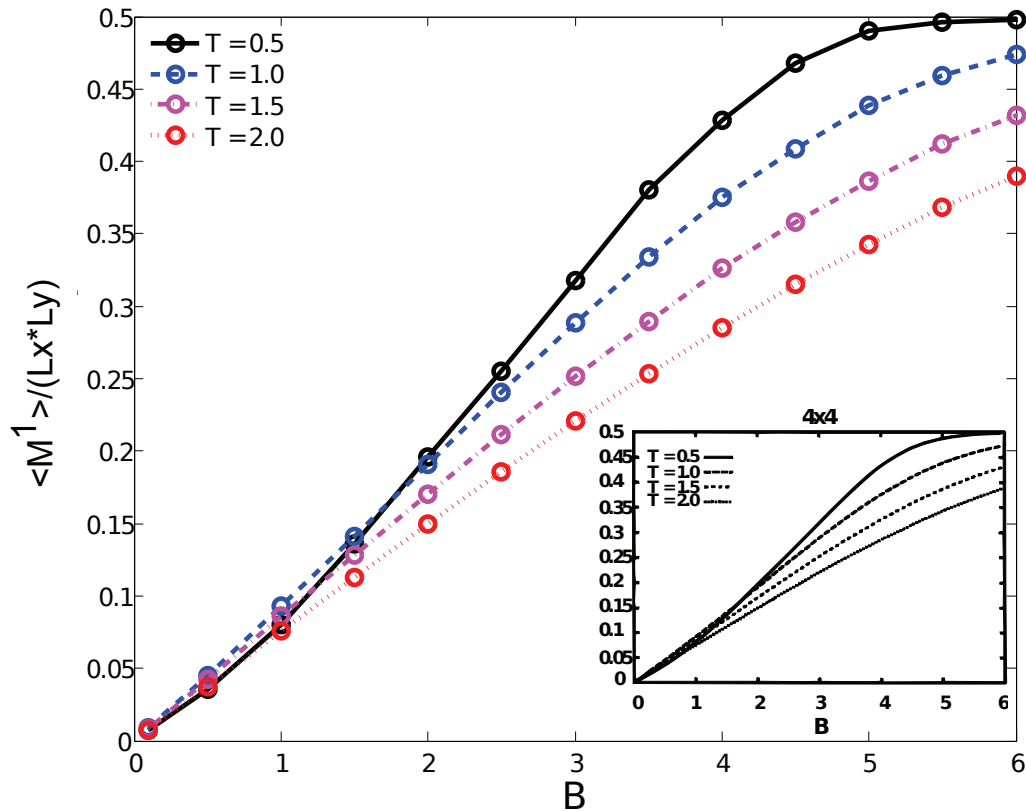


Figura 5.6: *Comportamiento de la densidad de la magnetización en función del campo magnético B externo a altas temperaturas para el modelo antiferromagnético de Heisenberg en una red cuadrada de tamaño $L = 4$. las 4 curvas fueron obtenidas utilizando $\epsilon = 0,05$. El sub-gráfico en la esquina inferior derecha corresponde a la data obtenida por Fabricius et al en [32].*

5.3. MCA aplicado a escaleras de espines cuánticos antiferromagnética.

Escaleras cuánticas de espines antiferromagnéticas son sistemas físicos interesantes, ya que se interpolan entre las cadenas de espines cuánticos en $d = 1$ dimensiones y redes antiferromagnéticas de espines cuánticos en $d = 2$ dimensiones. La dinámica a baja energía de estos sistemas son descritas con precisión por teorías de campo cuánticos (1+1)-d, que puede ser calculada analíticamente de manera exacta utilizando el método de Bethe Ansatz. Esta correspondencia se utilizó explícitamente en la referencia [15] para comparar los resultados numéricos obtenidos por el algoritmo de meron-cluster con las predicciones analíticas de la

magnetización de sistemas de escaleras de espines cuánticos acoplados a un campo magnético. Se utilizó también estos resultados para comparar con los resultados de las simulaciones numéricas de este trabajo.

En la Figura 5.7 se muestra la magnetización en función del campo magnético externo para una escalera de espines cuánticos de tamaño de 4×20 a un valor del inverso de la temperatura $\beta = 15$. Como comparación, también se muestran en esta figura los resultados numéricos obtenidos en el mismo sistema físico por Chandrasekharan et al [15]. Se puede apreciar una concordancia notable entre ambos resultados para todo el rango de los valores de los parámetros, lo que evidencia una correcta implementación del algoritmo de meron-cluster.

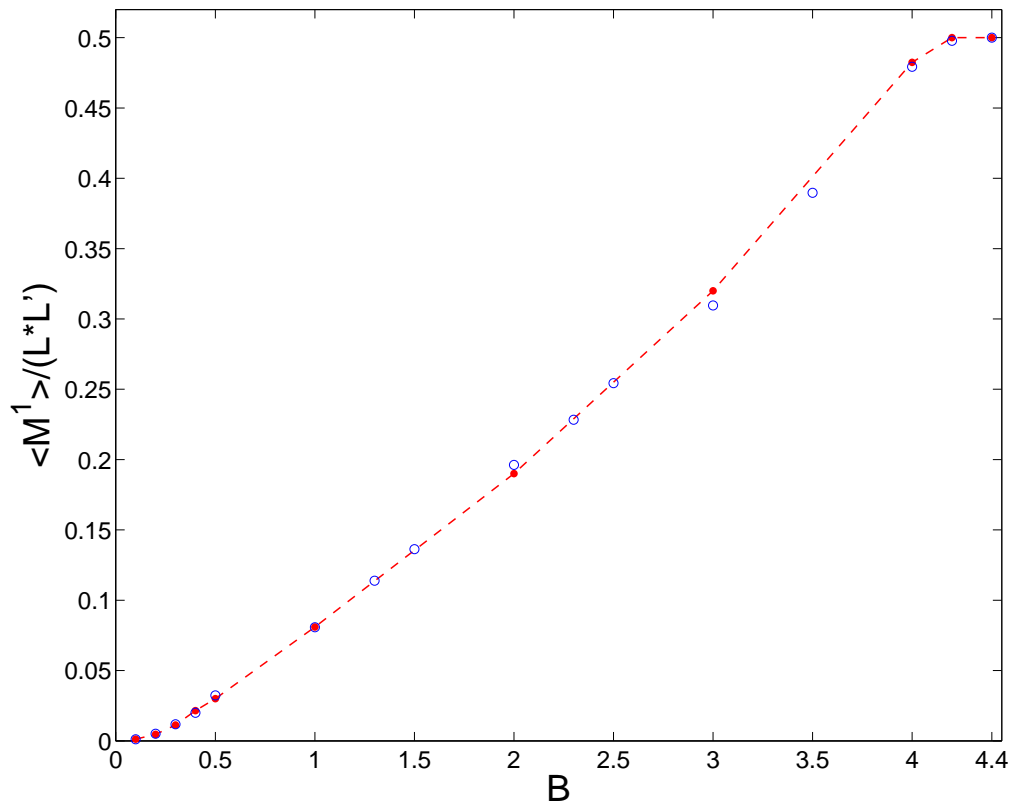


Figura 5.7: Densidad de la magnetización en función del campo magnético externo B para una escalera cuántica antiferromagnética. la data de círculos corresponde a una escalera de tamaño $L = 20$, $L' = 4$ a un inverso de temperatura $\beta = 15$, data que se obtuvo utilizando $\epsilon = 0,05$; la data de puntos gruesos y línea segmentada corresponde a la obtenida por Chandrasekharan et al en el artículo [15], para el mismo sistema físico y al mismo valor de β .

La densidad de la magnetización en función del campo magnético externo se muestra en escala logarítmica en la Figura 5.8 para una escalera de espines antiferromagnéticos ($L = 20$, $L' = 4$) a baja temperatura $\beta = 15$. Como ya se mencionó, las escaleras de espines son sistemas de dimensiones casi unidimensionales, cuya física a baja energía se rige por las teorías cuánticas de campos $d = (1 + 1)$ dimensionales. En esta teoría, el campo magnético uniforme B aplicado al sistema equivale al potencial químico $\mu = B/c$, donde c es la rapidez de la onda de espín. Usando la técnica del Ansatz de Bethe se puede obtener una solución exacta para la magnetización del sistema de escalera de espines cuánticos con estas teorías de campos cuánticos [55], las cuales serán utilizadas para comparar con los resultados numéricos obtenidos, en el mismo espíritu propuesto en [15]. Además si las simulaciones se realizan para numero par de espines $1/2$, la correspondiente teoría de campo cuántico describe una teoría asintóticamente libre con un gap de masa m generado no perturbativo, y más aún, la acción efectiva que describe a la escalera de espines cuánticos en la teoría $(1 + 1) - d$ $O(3)$ no posee términos topológicos.

Como es bien conocido, los resultados numéricos son muy sensibles a efectos de tamaño finito y temperatura finita cerca de la región umbral $\mu \approx m$. Sin embargo, en la región donde μ no es demasiado grande, el sistema puede ser descrito con precisión por un gas de fermiones diluidos y por lo tanto la magnetización puede ser descrita en este caso por:

$$\frac{\langle M^{(1)} \rangle}{L} = \frac{1}{L} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{1 + \exp[\beta(c\sqrt{(2\pi n/L)^2 + m^2} - B)]} . \quad (5.3)$$

Por otro lado, para valores del potencial químico levemente por sobre el valor umbral, la densidad de la magnetización puede ser escrita en el límite termodinámico mediante:

$$\frac{\langle M^{(1)} \rangle}{L} = \frac{\sqrt{2m}}{\pi} \sqrt{\frac{B}{c} - m} . \quad (5.4)$$

Todas estas expresiones analíticas serán utilizadas para comparar con los resultados numéricos obtenidos.

En la Figura 5.8 se muestra en escala logarítmica, mediante línea de punto-segmentada, la densidad de la magnetización dada por la Ecuación (5.3) en función del campo magnético ex-

terno para una escalera de espines antiferromagnéticos de longitudes $L = 20$ y $L' = 4$. Además se muestra mediante línea continua el valor asintótico de la densidad de la magnetización en el límite termodinámico para valores muy cercanos al valor umbral $\mu \approx m$ dada por la Ecuación (5.4). Para estas curvas se utilizaron los valores numéricos obtenidos por Syljuasen et al [56] y por Beard et al [57], $m = 0,141$ y $c = 1,657$, respectivamente. Finalmente la data numérica obtenida mediante el algoritmo de meron cluster para el mismo sistemas de espines cuánticos se muestra mediante círculos en toda la región de interés $B > 0$. Se puede concluir que los resultados numéricos concuerdan notablemente bien, cerca de la región umbral, con respecto al comportamiento predicho por las expresiones analíticas de la teoría de campo efectivo. Por otro lado, la desviación de los valores numéricos respecto del comportamiento descrito por la Ecuación (5.3) se debe al hecho de que esta ecuación es válida sólo para un número suficientemente grande $L' \gg 1$, condición que no se satisface para la escalera de espines que se ha simulado. Sin embargo, los resultados numéricos concuerdan perfectamente con los resultados obtenidos en ref [15], en toda la región $B > 0$, con un error menor del 2 por ciento.

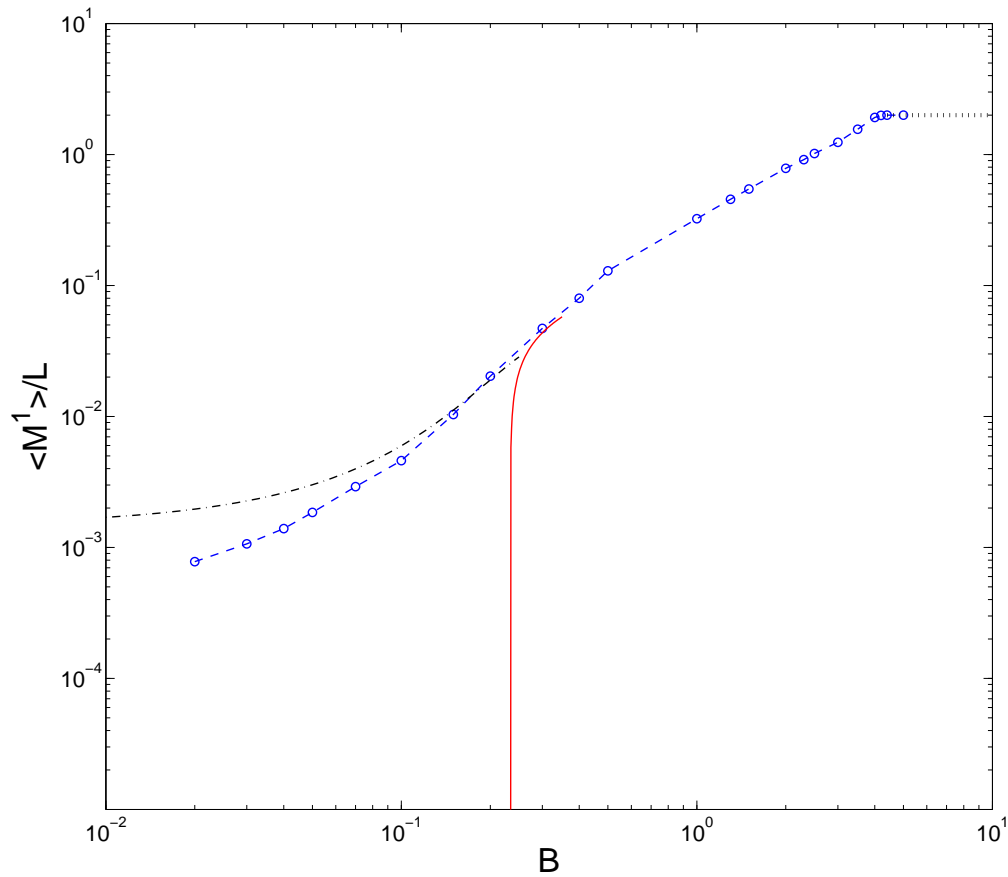


Figura 5.8: Gráfico en escala logarítmica de la densidad de la magnetización en función del campo externo B para una escalera cuántica antiferromagnética de dimensiones $L = 20$, $L' = 4$ a baja temperatura ($\beta = 15$). La data numérica se muestra con marcadores de círculos y por línea segmentada y fue obtenida utilizando $\epsilon = 0,075$. la línea segmentada y puntos corresponde al comportamiento analítico dado por la Ecuación (5.3) para volumen finito y a temperatura $T = 1/15$, la línea continua corresponde al resultado analítico de la Ecuación (5.4) para volumen infinito y a temperatura cero para valores de B ligeramente por encima del valor umbral $\mu \approx m$. Finalmente la línea horizontal de puntos representa la saturación del valor de la magnetización.

5.4. Proceso de Binning y Eficiencia del MCA.

La alta precisión de la data numérica obtenida en este trabajo de tesis, en comparación con la obtenida por otros métodos numéricos [27],[32], muestran que el MCA es un algoritmo seguro y confiable para realizar simulaciones Monte Carlo cuánticas en sistemas físicos que

presentan una competencia dinámica entre diferentes tipos de interacciones. Lo que demuestra que el MCA logrará vencer la discontinuidad del algoritmo para estos tipos de sistemas, al igual que el directed loop [27]. Sin embargo, la eficiencia del MCA no ha sido medida de manera apropiada. En el artículo [27], los autores calculan el bien conocido tiempo de autocorrelación integrado para la magnetización $\tau_{\text{int}}(M)$ para una cadena AFH de longitud $L = 64$, para un inverso de temperatura $\beta = 16$ y para diferentes valores del campo magnético externo, mediante:

$$\tau_{\text{int}}(M) = \frac{1}{2} + \sum_{t=0}^{\infty} \Gamma_M(t) \quad . \quad (5.5)$$

$\Gamma_M(t)$ es la función de autocorrelación de la magnetización. Típicamente, la función de autocorrelación no es una simple función exponencial del tiempo t , este hecho hace que sea complicado estimar el tiempo de autocorrelación integrado mediante la Ecuación (5.5). Otro método para estimar el valor del tiempo de autocorrelación integrado de un algoritmo consiste en examinar y determinar cuantos pasos estocásticos son necesarios para obtener medidas que son estadísticamente independientes para un observable, lo cual puede ser estimado realizando un método conocido como binning [33]. Con el fin de medir la eficiencia del MCA se aplicó un método de binning a la serie de tiempo estocástica de la magnetización de una cadena AFH, obtenida por el algoritmo, utilizando los mismos valores (tamaño y temperatura) que los usados en referencia [27], y para un valor de campo magnético externo $B = 0,5$. El tamaño de la serie estocástica generada por la cadena de Markov fue de $n = 2,75 \times 10^7$. De ahora en adelante se denotará este vector de n datos por M , la forma de esta serie estocástica M se muestra en la Figura 5.9.

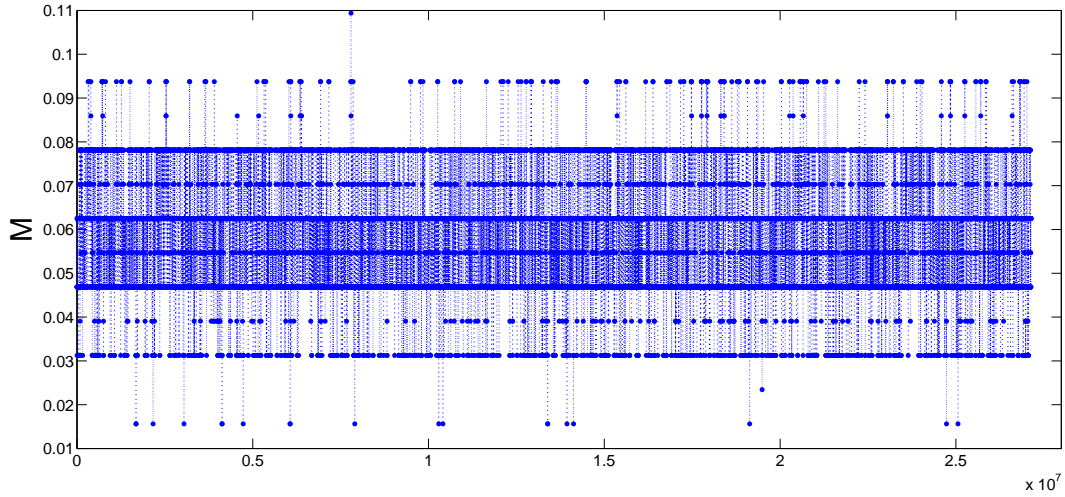


Figura 5.9: Serie de tiempo de la densidad de la magnetización para una cadena AFH de longitud $L = 64$ a un inverso de temperatura $\beta = 16$ y para un campo magnético externo $B = 0,5$. El estimador numérico de la magnetización es simplemente la media aritmética de la data completa, esto es: $\bar{M} = 0,0601322$.

A continuación se divide la serie de tiempo en N_B bloques, cada uno de estos bloques de tamaño k , donde $k = 2^1, 2^2, 2^3, \dots$. El número N_B de bloques es función del tamaño de binning k dado por $N_B = \lfloor n/k \rfloor$, donde $\lfloor \cdot \rfloor$ denota la parte entera. Además todo resto de datos remanentes de la serie de tiempo no son contabilizados luego de realizar este proceso de binning. La varianza $\sigma_B^2(M)$ del valor promedio de cada bloque \bar{M}_{Bi} con respecto al valor promedio entre todos los bloques \bar{M}_B esta dado por:

$$\sigma_B^2(M) = \frac{1}{N_B - 1} \sum_{i=1}^{N_B} (\bar{M}_{Bi} - \bar{M}_B)^2, \quad (5.6)$$

el cual es función del tamaño del binning k . Esta varianza debería ser inversamente proporcional a k a medida que k aumenta de manera considerable, tal que \bar{M}_{Bi} se vuelva estadísticamente independiente entre los bloques. Esto puede ser verificado numéricamente graficando σ_B^2/N_B en función de varios tamaños de binning k , con esto se puede estimar el error. Este criterio se muestra en la Fig. 5.10. En esta figura, se puede ver que para valores de tamaños de binning sobre 2^{15} , se ha alcanzado el régimen estadísticamente independiente. Más aún el error relativo de esta cantidad para los valores de k entre 2^{15} y 2^{16} es del orden del 1,1%, lo que muestra que los promedios obtenidos en cada bloque son estadísticamente independientes entre si.

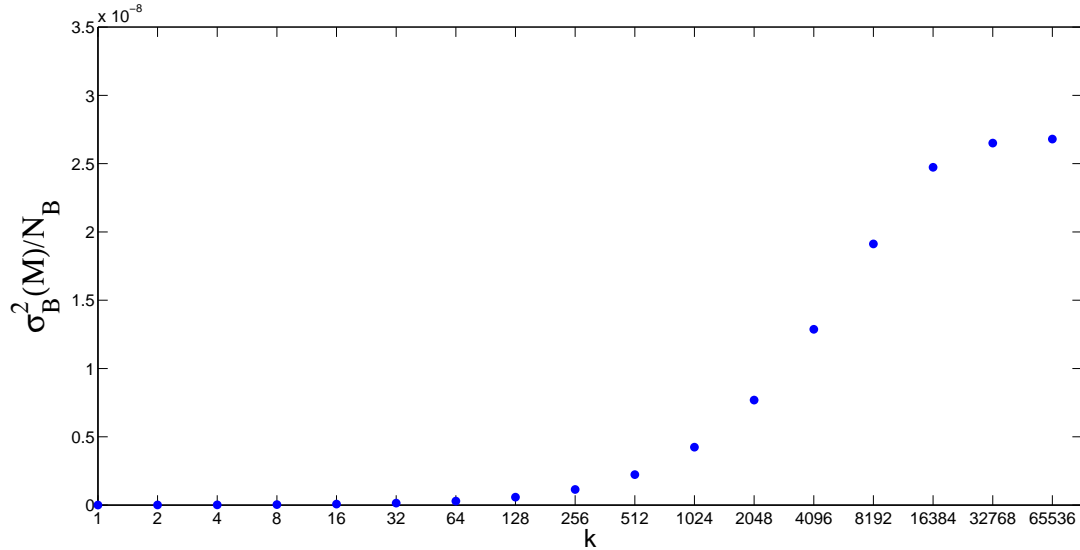


Figura 5.10: Varianza sobre el número de bloques en función del tamaño de binning k para la densidad de la magnetización de la cadena AFH de longitud $L = 64$ e inverso de temperatura $\beta = 16$ para un campo magnético externo $B = 0,5$. Se puede apreciar que el criterio de convergencia es alcanzado a partir de $k = 2^{15}$, lo que asegura que el valor \bar{M}_{Bi} se vuelve estadísticamente independiente entre los N_B bloques a partir de dicho valor de k .

El objetivo principal del método de binning es analizar cuantos tamaños de binning k son necesarios para que los valores promedios de cada bloque \bar{M}_{Bi} sean estadísticamente independientes entre sí. Este análisis de binning puede ser llevado al contexto del método de Monte Carlo. En este método un observable es medido utilizando muestreo por importancia, generando una cadena de Markov que satisface balance detallado y ergodicidad. Durante este proceso, el valor de expectación de un observable $\langle \hat{O} \rangle$ es estimado mediante un simple promedio aritmético \bar{O} del observable calculado en cada configuración de la cadena de Markov. Si se repite la simulación Monte Carlo completa muchas veces, entonces se puede obtener un estimador del observable para cada una de estas corridas Monte Carlo: \bar{O}_i . Si los datos no están correlacionados, entonces debido al teorema del límite central, la distribución de probabilidad de \bar{O}_i es Gaussiana con respecto a su valor promedio. Por consiguiente, en dicho caso, el estimador \bar{O} de un observable es un estimador confiable del valor de expectación del observable $\langle \hat{O} \rangle$:

$$\bar{O} \approx \langle \hat{O} \rangle \quad . \quad (5.7)$$

El número de corridas Monte Carlo generadas es equivalente al número de bloques N_B , y de

manera similar el número de sweeps de una simulación Monte Carlo es equivalente al tamaño de binning k del análisis de binning. Como los valores promedio obtenidos en cada bloque son estadísticamente independientes para valores de tamaño de binning a partir de $k = 2^{15}$, entonces el promedio aritmético obtenido sobre la cadena de Markov puede estimar de manera fiable y segura el valor de expectación del observable $\langle \hat{O} \rangle$, cuando el número de sweeps es del orden de 100×2^{15} .

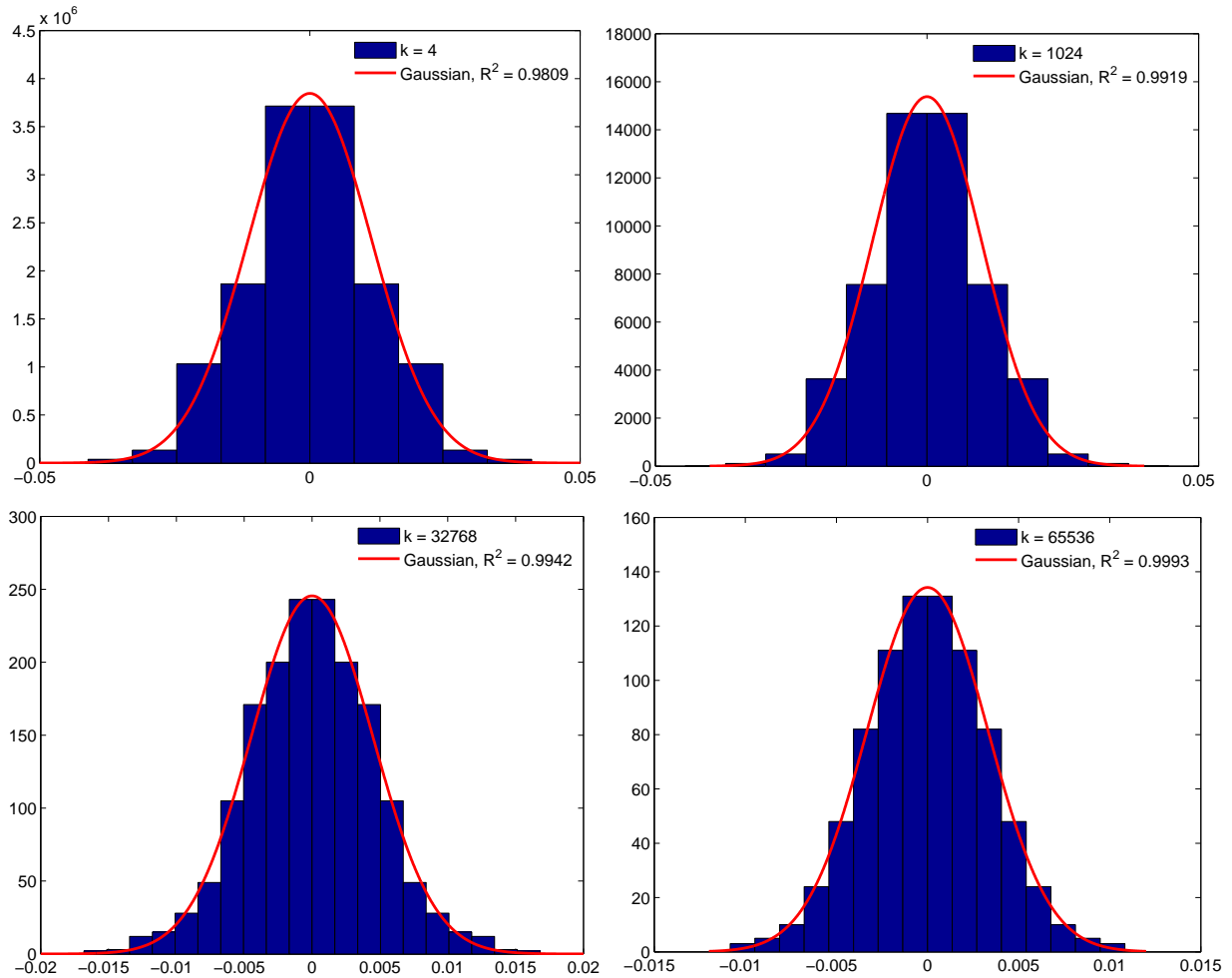


Figura 5.11: Distribución de probabilidad de los promedios por bloques con respecto al valor promedio entre todos los bloques, para cuatro valores distintos de tamaño de binning k . Para cada una de las distribuciones de probabilidad se ha ajustado una curva Gaussiana, mostrando su respectivo valor de calidad de ajuste R^2 . Se puede apreciar que a partir de $k = 2^{15}$ esta distribución de probabilidad se acerca al comportamiento que estipula el teorema del límite central.

En la Fig. 5.11 se muestra la distribución de probabilidad de los promedios de bloques con respecto al valor promedio entre todos los bloques, para diferentes valores de tamaño de binning k , se puede apreciar que a partir de tamaño de binning $k = 2^{15}$ se generan datos estadísticamente independientes y que la distribución se acerca al régimen del teorema del límite central. Para finalizar, por medio de este análisis de binning, se estima el valor del tiempo de correlación integrado de la magnetización $\tau_{\text{int}}(M)$ para el algoritmo de meron-cluster. Como se muestra en el Apéndice (ver Ecuación (A.11), se tiene que [33]:

$$\sigma_{\bar{O}_i}^2 = \frac{\sigma_{O_j}^2}{r} 2\tau_{\text{int}}(O) \quad , \quad (5.8)$$

$\sigma_{\bar{O}_i}^2$ es la varianza del estimador obtenido en cada proceso Monte Carlo y $\sigma_{O_j}^2$ es la varianza de la medida individual. Acá se considera que una simulación Monte Carlo fue generada mediante r sweeps. Por lo tanto utilizando la Fig. 5.10 se obtiene que el tiempo de autocorrelación integrado puede ser estimado por:

$$2\tau_{\text{int}}(O) = \frac{\{\sigma_B^2(O)/N_B\}_{k \rightarrow \infty}}{\{\sigma_B^2(O)/N_B\}_{k=1}} \quad , \quad (5.9)$$

y por lo tanto, utilizando Eq. (5.9) y mediante Fig. 5.10, la estimación del tiempo de autocorrelación del MCA para la magnetización en una cadena AFH de longitud $L = 64$ a un inverso de temperatura $\beta = 16$ en un campo magnético externo $B = 0,5$ es:

$$\tau_{\text{int}}(M) = 2889,500 \pm 0,013 \quad . \quad (5.10)$$

El error fue calculado utilizando $\sigma_B(M)/\sqrt{N_B}$ para $k \rightarrow \infty$. El valor obtenido para el tiempo de autocorrelación integrado es muy grande y en la práctica limitaría la eficiencia del MCA para sistemas grandes. Comparando este valor con el valor obtenido en [27], se puede ver que el método de directed loop es más eficiente que el MCA. Sin embargo, ambos algoritmos entregan resultados numéricos muy precisos para el sistema físico simulado.

El valor relativamente grande de $\tau_{\text{int}}(M)$ se debe al hecho que sólo configuraciones del sector cero-meron (el cual es mucho más pequeño que el sector meron) contribuyen a la magnetización, lo que en la práctica representa una fuerte restricción durante el proceso de construcción

de clusters, que genera una tasa relativamente baja de aceptación para las modificaciones de las formas de los clusters. Esta limitación perjudica parcialmente la eficiencia del algoritmo.

A modo de respaldar este análisis de binning efectuado, se calculo también la función de autocorrelación $\Gamma_M(t)$ para el vector de datos M :

$$\Gamma_M(t) = \frac{\langle M(i)M(i+t) \rangle - \langle M(i) \rangle^2}{\langle M(i)M(i) \rangle - \langle M(i) \rangle^2}, \quad (5.11)$$

donde cada uno de estos promedios se obtienen sumando sobre el índice i .

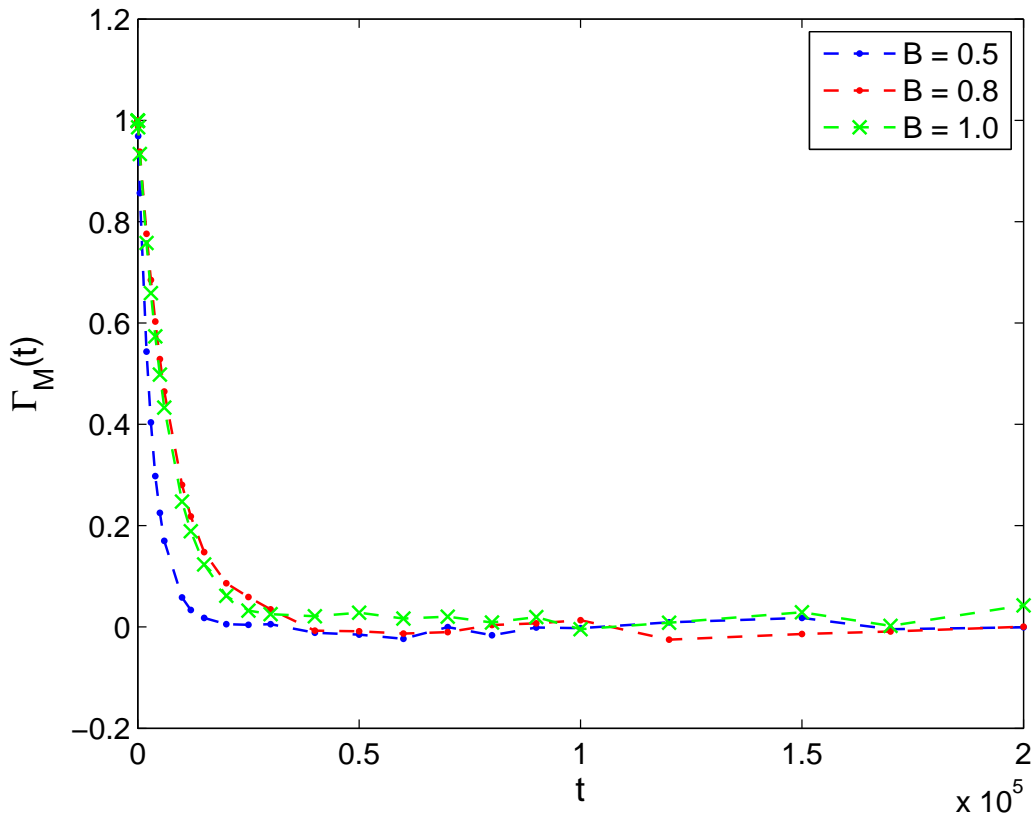


Figura 5.12: Función autocorrelación de la magnetización para una cadena AFH de longitud $L = 64$ para un valor del inverso de temperatura $\beta = 16$ y para 3 valores distintos del campo magnético B .

Esta función de autocorrelación $\Gamma_M(t)$ se muestra en la Fig. 5.12. la data de color azul corresponde a la función de autocorrelación de la serie de tiempo de la densidad de la magnetización de Fig. 5.9. En esta figura también se calculo $\Gamma_M(t)$ para distintos valores de campo

magnético $B = 0,8$ y $B = 1,0$ para los mismos parámetros de tamaño de red $L = 64$ e inverso de temperatura $\beta = 16$.

Se puede apreciar que para el valor de campo magnético $B = 0,5$ la data decorrelaciona mas rápido que para $B = 0,8$ y $1,0$. Más aún, de la figura se puede estimar que para un valor de campo magnético $B = 0,5$ las configuraciones son estadísticamente independiente (decorrelacionadas) a partir de $t_{\text{decor}} \sim 25000$ aproximadamente ($\Gamma_M(t) \lesssim 0,05$). También se puede apreciar que para los 3 valores de campo magnético estudiado el algoritmo decorrelaciona relativamente a la misma rapidez.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo de tesis se presentó una nueva aplicación del algoritmo de meron-cluster [15] para simular numéricamente el modelo cuántico de Heisenberg antiferromagnético en presencia de un campo externo uniforme en una y dos dimensiones espaciales. Este algoritmo está basado en el algoritmo de loop-cluster (estudiado en el capítulo 2), que se basa principalmente en la construcción estocástica de clusters. Para mantener la eficiencia de este tipo de algoritmo es necesario tener la libertad de inversión de los valores de espín de cada cluster con probabilidad $1/2$ independiente de los otros clusters. Esto conduce, en la representación de integral de camino de la función partición, a la elección de la base de cuantización en la dirección perpendicular a la del campo magnético aplicado. Como consecuencia de esto, aparece en efecto, el problema del signo debido a que la matriz de transferencia del sistema posee elementos negativos que no pueden ser interpretados como factores de Boltzmann.

El problema del signo es un problema de clase no polinomial (NP), lo que significa que se deben desarrollar algoritmos complejos para tratar de resolverlo caso por caso ya que no posee solución general.

Los resultados numéricos obtenidos en este trabajo se compararon con las predicciones analíticas de la densidad de la magnetización en el límite termodinámico a temperatura cero, obtenida por medio de técnicas de análisis de escalamiento y Ansatz de Bethe para el sistema en una dimensión. Para el sistema en dos dimensiones, como no existe solución analítica para este modelo, se comparó los resultados con los obtenidos para redes pequeñas y con el resultado aproximado de la densidad de la magnetización en el límite termodinámico a temperatura cero, conjeturado mediante relaciones de escala a partir de dichas redes pequeñas,

realizados en el artículo [32]. Más aún, se comparó la data numérica de este trabajo con otras simulaciones numéricas realizadas por diferentes algoritmos, como por ejemplo, el algoritmo llamado *directed loop*. Los resultados numéricos que se obtuvieron en este trabajo de tesis concuerdan perfectamente con todos estos resultados previos, lo que permite confirmar que el concepto *meron-cluster* aplicado a sistemas de espines cuánticos en presencia de un campo magnético externo arbitrario representa un método confiable para simular este tipo de sistemas, incluso cuando el requisito de independencia entre clusters para la inversión de los valores de espines de cada cluster con probabilidad $1/2$ conduzca a un problema de signo. Como el problema signo también aparece en los sistemas bosónicos y fermiónicos en dimensiones mayores que una, este trabajo de tesis podría arrojar algo de luz al estudio numérico de esos sistemas.

La confiabilidad de este algoritmo a todo rango de temperaturas, incluso a muy pequeñas temperaturas $T \rightarrow 0$ y para cualquier valor del campo externo, motiva la aplicación de este método para estudiar sistemas cuánticos que presentan transiciones de fases cuánticas, como el estudiado en esta tesis. En estos sistemas se genera una competencia dinámica entre las diferentes interacciones, lo que produce un estado base no analítico en el límite termodinámico y a muy bajas temperaturas.

Con el objeto de abordar este fenómeno cuántico, se utilizó el algoritmo de *meron-cluster* para simular el modelo cuántico AFH acoplado a un campo magnético externo en una y dos dimensiones espaciales. Se encontró que a medida que los límites de volumen infinito y temperatura cero son alcanzados, la densidad de la magnetización colapsa hacia una curva asintótica, y el peak de su correspondiente primera derivada permite sugerir que existe una transición de fase cuántica cercano a los valores $B_c = 1,97$ y $B_c = 3,90$ para el sistema en una y dos dimensiones espaciales, respectivamente. Estos resultados están en buen acuerdo con los resultados obtenidos mediante los métodos de diagonalización exacta para una dimensión [23], y teoría de campo medio en tres dimensiones [24]; este último corresponde al modelo cuántico AFH (2 + 1) dimensiones que se simuló en este trabajo de tesis. Sin embargo, Con el propósito de estudiar con aún mayor precisión numérica estas transiciones de fases cuánticas, sería necesario, mejorar la estadística de los resultados, como por ejemplo obtener la derivada de primer orden de la magnetización, de manera directa en la simulación, mediante algún observable mejorado, lo cual se planea realizar en trabajos futuros.

Además en este trabajo se realizó por primera vez un estudio de precisión de la eficiencia del algoritmo de *meron-cluster* estimando el valor del tiempo de autocorrelación integrado de la densidad de la magnetización para la cadena AFH de longitud $L = 64$ a un inverso de

temperatura $\beta = 16$ en un campo magnético externo $B = 0,5$ por medio de un método de binning. Al comparar este valor con el obtenido por medio del algoritmo de directed loop, se puede afirmar que en la práctica algunas limitaciones aparecen al estudiar de manera cuidadosa la eficiencia del MCA. Aunque el MCA entrega resultados muy precisos para los modelos estudiados en este trabajo de tesis, el algoritmo de meron-cluster no es tan eficiente como el método de directed loop. Una pregunta muy interesante de abordar en trabajos futuros sería si se puede utilizar el enfoque de directed loop para extender la aplicabilidad y eficiencia del concepto de meron para solucionar el problema numérico del signo para otros modelos cuánticos [27].

A la luz de estos resultados, se perfilan una gran cantidad de estudios futuros, entre los cuales se pueden destacar:

- Estudiar numéricamente las transiciones de fases cuánticas en otros sistemas de espines cuánticos en una dimensión espacial que presenten competencia entre las interacciones, como el modelo de Ising en un campo transversal, el modelo XXZ y el modelo $J_1 - J_2$. Los dos primeros modelos ya han sido estudiados de manera analítica mediante transformaciones de Jordan-Wigner [35] y mediante el cálculo de la concurrencia usando el Ansatz de Bethe [46] en los artículos [17], [58] y [59],[60],[61], respectivamente. El cálculo de la concurrencia para el modelo $J_1 - J_2$ fue realizado en [62] para una cadena de 8 espines cuánticos.
- Estudiar otras geometrías de redes en dos dimensiones espaciales, como la red tipo panal de abeja [63] y la red triangular.
- Estudiar numéricamente las transiciones de fases en diferentes sistemas cuánticos de dos dimensiones espaciales, como por ejemplo en el modelo de Ising en un campo transversal y obtener diagramas de fases.
- Incluir otros tipos de interacciones de espines en el Hamiltoniano: tipo Dzyaloshinskii-Moriya [64], interacciones de cuatro espines, interacción bicuadrática [65], de anisotropía de forma [66], entre otras.
- Aplicar el algoritmo de MCA para sistemas magnéticos de espines cuánticos en tres dimensiones espaciales que presenten competencia entre las interacciones, como el modelo de Heisenberg, XY y de Ising en un campo transversal.

- Aplicar el enfoque de directed loop al concepto de meron para extender la aplicabilidad y eficiencia de este método para solucionar el problema numérico del signo para otros modelos cuánticos.

Apéndice A

Error estadístico y tiempo de autocorrelación en una simulación MC.

En una simulación tipo Monte Carlo un observable es medido utilizando muestreo por importancia, generando una cadena de Markov que satisface balance detallado y ergodicidad. Durante este proceso, el valor de expectación de un observable $\langle \hat{O} \rangle$ es estimado mediante un simple promedio aritmético \bar{O} del observable calculado en cada configuración de la cadena de Markov. Si se repite la simulación Monte Carlo completa N veces, entonces se puede obtener un estimador del observable para cada una de estas corridas Monte Carlo: \bar{O}_i . Si los datos no están correlacionados, entonces debido al teorema del límite central, la distribución de probabilidad de \bar{O}_i es Gaussiana con respecto a su valor promedio. Por consiguiente, en dicho caso, el estimador \bar{O} de un observable es un estimador confiable del valor de expectación del observable $\langle \hat{O} \rangle$:

$$\bar{O} \approx \langle \hat{O} \rangle \quad , \quad (\text{A.1})$$

donde \bar{O} es simplemente el promedio aritmético de los valores \bar{O}_i :

$$\bar{O} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{O}_i \quad . \quad (\text{A.2})$$

Además se puede calcular la varianza real del estimador \bar{O} :

$$\sigma_{\bar{O}_i}^2 = \langle \bar{O}_i \bar{O}_i \rangle - \langle \bar{O}_i \rangle^2 \quad , \quad (\text{A.3})$$

los promedios denotados por brackets se obtienen sumando en i . Si asumimos que cada una de las N corridas Monte Carlo fueron efectuadas con r sweeps, entonces:

$$\bar{O}_i = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r O_j^{(i)} \quad , \quad (\text{A.4})$$

donde $O_j^{(i)}$ corresponde al elemento j del vector de datos del observable para la corrida número i Monte Carlo, por lo tanto:

$$\sigma_{\bar{O}_i}^2 = \frac{1}{r^2} \sum_{l=1} \sum_{m=1} \langle O_l^{(i)} O_m^{(i)} \rangle - \frac{1}{r^2} \sum_{l=1} \sum_{m=1} \langle O_l^{(i)} \rangle \langle O_m^{(i)} \rangle \quad . \quad (\text{A.5})$$

Por notación, de ahora en adelante, omitiremos el super índice i . Separando los términos diagonales con los no diagonales de las sumatorias:

$$\sigma_{\bar{O}_i}^2 = \frac{1}{r^2} \sum_{l=1} (\langle O_l^2 \rangle - \langle O_l \rangle^2) + \frac{2}{r^2} \sum_{l=1} \sum_{m=l+1} (\langle O_l O_m \rangle - \langle O_l \rangle \langle O_m \rangle) \quad . \quad (\text{A.6})$$

En el segundo término, para la sumatoria en m hacemos el cambio $m = t + l$, con lo que se obtiene:

$$\sigma_{\bar{O}_i}^2 = \frac{1}{r^2} \sum_{l=1} (\langle O_l^2 \rangle - \langle O_l \rangle^2) + \frac{2}{r^2} \sum_{l=1} \sum_{t=1} (\langle O_l O_{t+l} \rangle - \langle O_l \rangle \langle O_{t+l} \rangle) \quad , \quad (\text{A.7})$$

factorizando el primer término:

$$\sigma_{\bar{O}_i}^2 = \frac{1}{r^2} \sum_{l=1} (\langle O_l^2 \rangle - \langle O_l \rangle^2) \left[1 + 2 \sum_{t=1} \frac{\sum_{l=1} (\langle O_l O_{t+l} \rangle - \langle O_l \rangle \langle O_{t+l} \rangle)}{\sum_{l=1} (\langle O_l^2 \rangle - \langle O_l \rangle^2)} \right] \quad , \quad (\text{A.8})$$

lo que puede ser reescrito utilizando invarianza traslacional como:

$$\sigma_{\bar{O}_i}^2 = \frac{\sigma_{O_i}^2}{r} \left[1 + 2 \sum_{t=1}^r \Gamma_O(t) \left(1 - \frac{t}{r} \right) \right] \quad , \quad (\text{A.9})$$

donde $\sigma_{O_i}^2$ y $\Gamma_O(t)$ corresponden a la varianza de una medida individual y a la función de autocorrelación, respectivamente. Además el término entre paréntesis cuadrado puede ser escrito mediante el tiempo de autocorrelación integrado:

$$2\tau_{\text{int}}(O) = 1 + 2 \sum_{t=1}^r \Gamma_O(t) \left(1 - \frac{t}{r} \right) \quad , \quad (\text{A.10})$$

por lo que obtenemos el resultado final:

$$\sigma_{\bar{O}_i}^2 = \frac{\sigma_{O_i}^2}{r} 2\tau_{\text{int}}(O) \quad . \quad (\text{A.11})$$

En el caso que los valores promedios \bar{O}_i de cada simulación Monte Carlo fuesen independientes entre sí (estadísticamente independientes), entonces:

$$\sigma_{\bar{O}_i}^2 = \frac{\sigma_{O_i}^2}{r} \quad . \quad (\text{A.12})$$

Por otro lado, si los valores promedios \bar{O}_i no son estadísticamente independientes entre sí, se debe considerar el factor adicional $2\tau_{\text{int}}(O)$ de la Ecuación (A.11) para el cálculo de la varianza entre los valores promedios obtenidos en cada simulación Monte Carlo.

Bibliografía

- [1] R. H. Swendsen and J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. 58, 86 (1987).
- [2] U. Wolff, Phys. Rev. Lett., 62, 361 (1989).
- [3] F. Niedermayer, Phys. Rev. Lett 61, 2026 (1988)
- [4] H.-P. Ying and F. Chen. Phys. Lett. A, 208(4-6):356-360, (1995).
- [5] J.-S. Wang, R.H. Swendsen and R. Kotecky, Phys. Rev. Lett. 63, 109 (1989).
- [6] M. Hasenbusch, G. Lana, M. Marcu and K. Pinn, Phys. Rev. B 46, 10472 (1992)
- [7] G. Palma and D. Zambrano, Phys. Rev. E 78, 061134 (2008)
- [8] R. C. Brower and P. Tamayo, Phys. Rev. Lett 62, 1087 (1989)
- [9] Ben-Av, R., Kandel, D., Katznelson, E., Lauwers, P.G.: J. Stat. Phys. 58 (1990) 125
- [10] E. Y. Loh Jr., J. E. Gubernatis, R. T. Scalettar, S. R. White, D. J. Scalapino, and R. L. Sugar, Phys. Rev. B **41**, 9301-9307 (1990).

-
- [11] See, e.g., *Quantum Monte Carlo Methods in Condensed Matter Physics*, edited by M. Suzuki (World Scientific, Singapore, 1993).
- [12] P. Henelius and A. W. Sandvik. *Phys. Rev. B* **62**, 1102 (2000).
- [13] S. Chandrasekharan and U.-J. Wiese. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3116 (1999).
- [14] M. Troyer and U.-J. Wiese, *Phys. Rev. Lett* 94, 170201 (2005).
- [15] S. Chandrasekharan, B. Scarlet, U.-J. Wiese, arXiv:cond-mat/9909451
- [16] S. Sachdev, *Quantum Phase Transition*, (Cambridge University Press, Cambridge second edition 2011)(1999).
- [17] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci and R. Fazio, *Nature*, **416**, 608-610 (2002).
- [18] Jaroslav Novotný, *Entanglement and its role in quantum information processing*, Doctoral Thesis, Prague (2007).
- [19] C.H. Bennett, H.J. Bernstein, S. Popescu and B. Schumacher, *Phys. Rev. A* **53**, 2046 (1996); C.H. Bennett and D.P. Divincenzo, *Nature London* **404**, 247 (2000).
- [20] M.A. Nielsen and I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Communication* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [21] D. Bitko, T.F. Rosenbaum and G. Aeppli, *Phys. Rev. Lett* **77**, 940 (1996).
- [22] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch and I. Bloch, *Nature* **415**, 39 (2002).
- [23] Guang-Hua Liu, Ruo-Yan Li and Guang-Shan Tian, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 256002 (2012).

-
- [24] E. Bublitz, J. Ricardo de Sousa, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **269**, 266 (2004).
- [25] P.W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [26] J.G. Bednorz, J.A. Muller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [27] O. F. Syljuasen and A. W. Sandvik, *Phys. Rev. E* **66**, 046701 (2002).
- [28] N.V. Prokof'ev, B.V. Svistunov, and I.S. Tupitsyn, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 64, 853 (1996) / *JETP Lett.* 64, 911 (1996) / N.V. Prokof'ev, B.V. Svistunov, and I.S. Tupitsyn, *Phys. Lett. A* 238, 253 (1998); *JETP* 87, 318 (1998).
- [29] U.-J. Wiese and H.-P. Ying, *Phys. Lett. A*, **168**, 143-150 (1992).
- [30] H. G. Evertz, G. Lana and M. Marcu, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 875 (1993).
- [31] K. Fabricius, U. Löw, K.-H. Mütter, and P. Ueberholz, *Phys. Rev. B* **44**, 7476-7485 (1991) / K. Fabricius, U. Löw, and K.-H. Mütter, *Phys. Rev. B* **44**, 9981-9988 (1991)
- [32] K. Fabricius, M. Karbach, U. Löw, and K.-H. Mütter, *Phys. Rev. B* **45**, 5315 (1992).
- [33] N. Kawashima, J. E. Gubernatis, and H. G. Evertz , *Phys. Rev. B* **50**, 136 (1994); H. G. Evertz, *Lecture Notes "Computer Simulations"*, Graz University of Technology, Austria (2009).
- [34] J. Dziarmaga, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 245701 (2005).
- [35] P. Jordan and E. Wigner, *Z. Phys.* **47**, 631 (1928) .

-
- [36] H. F. Trotter, Proceedings of the American Mathematical Society **10** 545-551 (1959).
- [37] M. Troyer and S. Sachdev, Phys. Rev. Lett. **81**, 5418 (1998).
- [38] U. Gerber, C. P. Hofmann, F.-J. Jiang, G. Palma, P. Stebler and U.-J. Wiese, J. Stat. Mech.: Theory Exp. P06002 (2011).
- [39] David A. Zambrano Mora, *Simulación Numérica de Modelos de espín Clásico y Cuántico*, Doctoral Thesis, Santiago-Chile (2011).
- [40] M. Göckeler and H. Leutwyler, Nucl. Phys. B **350**, 228 (1991).
- [41] M. Göckeler and H. Leutwyler, Phys. Lett. B **253**, 193 (1991).
- [42] U. Köbler, and A. Hoser, Eur. Phys. J. B **60**, 151-159 (2007)
- [43] F. J. Dyson, Phys. Rev. **102** No 5, 1217 (1956); Phys. Rev. **102** No 5, 1230 (1956).
- [44] C. P. Hofmann, Phys. Rev. B **65**, 094430 (2002).
- [45] N.D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133-1136 (1966).
- [46] H.A. Bethe, Z. Physik, **71**, 205 (1931).
- [47] K. G. Wilson and J. Kogut, J. Phys. Rep. **12C**, 75 (1974).
- [48] C J Hamer, J. Phys. A: Math. Gen. **33** (2000).
- [49] Qing Xu, Sabre Kais, Maxim Naumov, and Ahmed Sameh, Phys. Rev. A **81**, 022324 (2010).

-
- [50] W. Bietenholz, A. Pochinsky and U.-J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **75**, 4524 (1995).
- [51] V. A. Kashurnikov, N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov, M. Troyer, Phys. Rev B **59**, 1162 (1999)
- [52] Matthias Nyfeler, *Numerical Simulations of Strongly Correlated Electron Systems on Bipartite and on Frustrated Lattices*, Doctoral Thesis, Bern-Switzerland (2009).
- [53] R. Brower, S. Chandrasekharan and U.-J. Wiese. Physica A **261**, 520-533 (1998).
- [54] W. K. Wootters, Phys. Rev. Lett **80**, 2245 (1998); S. Hill and W. K. Wootters, Phys. Rev. Lett. **78**, 5022 (1997).
- [55] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50**, 1153-1156 (1983).
- [56] O. F. Syljuasen, S. Chakravarty and M. Greven, Phys. Rev. Lett. **78**, 4115 (1997).
- [57] B. B. Beard, R. J. Birgeneau, M. Greven and U.-J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **80**, 1742 (1998).
- [58] T. J. Osborne and M.A. Nielsen, Phys. Rev. A **66**, 032110 (2002).
- [59] S. J. Gu, H. Q. Lin, and Y. Q. Li, Phys. Rev. A **68**, 042330 (2003).
- [60] Olav F. Syljuasen, Phys. Rev. A **68**, 060301 (2003).
- [61] S. J. Gu, G. S. Tian, H. Q. Lin, Phys. Rev. A **71**, 052322 (2005).
- [62] S. J. Gu, G. S. Tian, H. Q. Lin, arXiv:quant-ph/0511243 (2005).

-
- [63] C.N. Varney, K. Sun, V. Galitski and M. Rigol, Phys. Rev. Lett. **107**,077201 (2011).
- [64] I. Dzyaloshinskii, Journ. of Phys and Chem. of Solids **4**, 241 (1958); T. Moriya, Physical Review **120**, 91 (1960).
- [65] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
- [66] D. Lederman, R. Ramirez and M. Kiwi, Phys. Rev. B **70**, 184422 (2004).