

Resumen

En el presente trabajo se realiza un estudio de la transición de fase KT en el modelo xy utilizando una simulación con el método montecarlo-metrópolis. Esta simulación esta principalmente programada en C y permite determinar la energía, capacidad calorífica, y correlación entre espines para cada temperatura. Para determinar la temperatura de transición, se utiliza el maximal de la capacidad calorífica con lo que se ha determinado que la temperatura critica es $T_{kt} = 0,88 \pm 0,01$

Introducción

El modelo-XY consiste en una red bidimensional de espines que pueden tener una orientación arbitraria en el plano y que interactúan con sus vecinos más , con el Hamiltoniano dado por la ecuación (1) donde la sumatoria $\langle i,j \rangle$ son los vecinos más cercanos y s_i son los momentos magnéticos de los espines. El modelo XY es la variante más simple del modelo de Ising, sin embargo en el modelo XY los espines tienen una simetría continua.

$$H_0 = -J \sum_{\langle k,l \rangle} \cos(\theta_k - \theta_l) \quad (1)$$

Metodología

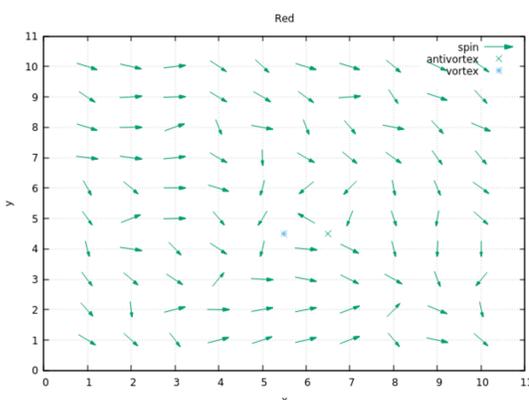


Figura 1: Espines en una red cuadrada a temperatura J/k_b presenta un vórtice y un anti-vórtice.

Para realizar el estudio de la transición, se implementa una simulación Montecarlo Metrópoli en C para un arreglo de espines 1 en una red cuadrada. El método Montecarlo Metrópoli requiere como parámetros iniciales: una temperatura fija y un tamaño de la red (L).

El método conste en generar un ensamble de sistemas que siguen la distribución de Boltzmann. Esto se logra con el siguiente procedimiento:

- 1 Parámetros fijos para todo el algoritmo: temperatura, tamaño de red.
- 2 Generar un arreglo aleatorio de espines S_0 .
- 3 Calcular el hamiltoniano del arreglo.
- 4 Modificar el sistema anterior S_0 y generar un sistema levemente modificado S_f
- 5 Se calcula la diferencia de energía con el sistema anterior $\Delta H = H_f - H_0$
- 6 Se calcula $p_0 = e^{-\beta \Delta H}$ y se genera un número aleatorio r entre cero y uno.
- 7 Si $p_0 > r$ se acepta el cambio, entonces, el sistema modificado se convierte en el nuevo S_0 . Caso contrario se mantiene el anterior.

- 8 Se repite este proceso 600 000 veces, hasta que el sistema llegue a un equilibrio.
- 9 Se calculan las propiedades del estado y se promedia los últimos 300 000 pasos.

Propiedades del estado

Capacidad Calorífica Un importante resultado de la mecánica estadística es:

$$C_v = \frac{k_b}{T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (2)$$

Función de correlación

- 1 Formar todas las posibles parejas de espines y clasificarlos de acuerdo a su distancia.
- 2 Se promedia el producto de cada pareja de espines clasificados por distancia.

Con el promedio de la función de correlación, se realiza una regresión por mínimos cuadrados con una ley de potencia y ley exponencial

Número de vórtices

- 1 La mínima celda de la red es un arreglo de 2×2 . Se comienza a contabilizar el cambio de ángulo en la esquina superior izquierda en sentido antihorario.
- 2 Se suma los cambios al rededor de un ciclo, se dice que se tiene un vórtice cuando el cambio es $\pm 2\pi$.

Efectos de tamaño en la temperatura crítica

Se realiza una corrección por efectos de tamaño con la siguiente ecuación.

$$T = T_{KT} + \frac{c}{\ln(L)} \quad (3)$$

Resultados

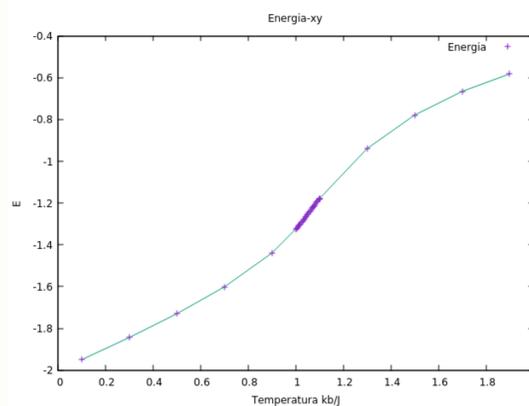


Figura 2: Energía en función de la temperatura para una red cuadrada de 32×32 .

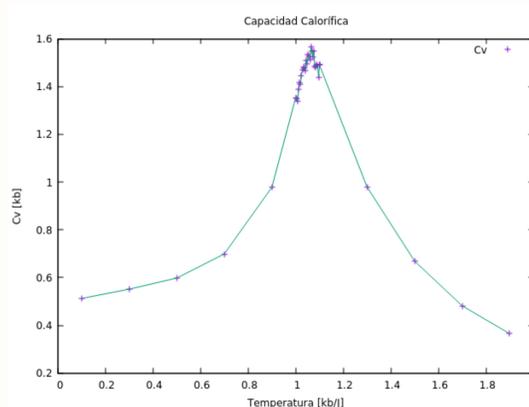


Figura 3: Capacidad calorífica en función de la temperatura para una red cuadrada de 32×32 .

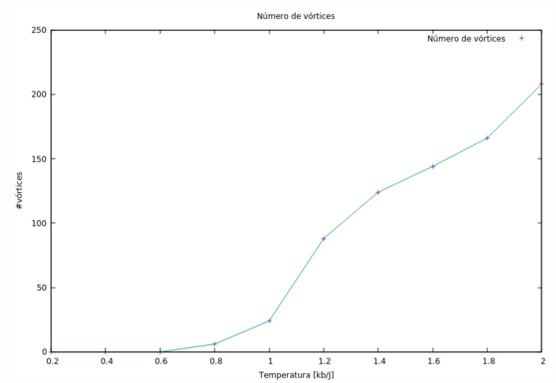


Figura 4: Número de vórtices en función de la temperatura para una red cuadrada de 32×32 .

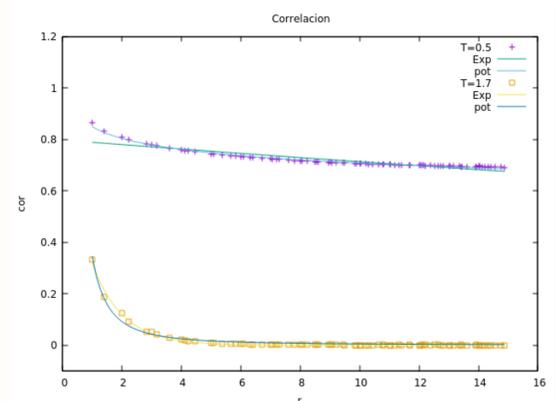


Figura 5: Función de correlación bajo la temperatura crítica, y sobre la temperatura crítica con sus respectivas regresiones.

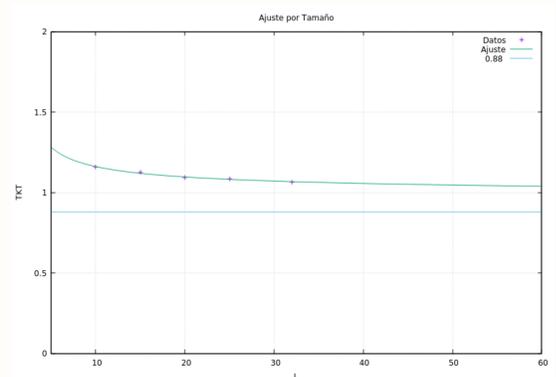


Figura 6: Ajuste por efectos de tamaño en la temperatura crítica TKT.

Conclusiones

Después de haber realizado la regresión por efectos de tamaño, se encuentra que la temperatura crítica de transición es de $T_{kt} = 0,88 \pm 0,01$. También se puede observar en la gráfica 4 que se tiene pocos vértices bajo la temperatura crítica y aumentan conforme aumenta la temperatura. Además en la gráfica 5 se evidencia que a bajas temperaturas la función de corrección se ajusta a una ley de potencias mientras que a altas temperaturas se ajusta a una ley exponencial.

Referencias

- [1] LUIS, Fernando. Quantum phase transitions in crystals of molecular nanomagnets. 2013
- [2] J M Kosterlitz and DJ Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two dimensional systems. 1973
- [3] Scientific Background on the Nobel Prize in Physics 2016.
- [4] M Bellac, F Mortessagne, G Batrouni. Equilibrium and non-equilibrium Statistical Thermodynamics. Cambridge 2004