

UNIVERSIDAD NACIONAL PEDRO RUIZ GALLO
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA



TESIS

”Técnicas analíticas y computacionales para el estudio de la fase vidrio en el
modelo de Edwards-Anderson”

PARA OPTAR POR EL TÍTULO PROFESIONAL DE
Licenciado en Física

Investigador: Paolo César Arrunátegui Reyes

Asesor: M.Sc. Augusto Saba Effio

Lambayeque, 2021

UNIVERSIDAD NACIONAL PEDRO RUIZ GALLO
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA



TESIS

”Técnicas analíticas y computacionales para el estudio de la fase vidrio en el
modelo de Edwards-Anderson”

PARA OPTAR POR EL TÍTULO PROFESIONAL DE
Licenciado en Física

Investigador: Paolo César Arrunátegui Reyes

Asesor: M.Sc. Augusto Saba Effio

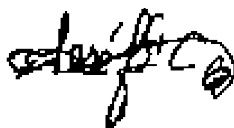
Lambayeque, 2021



Dr. Luis Alberto Curo Maquén
Presidente



M.Sc. Juan Pedro Rivera Vásquez
Secretario



Lic. Fís. José Fernández Calderón
Vocal



M.Sc. Augusto Saba Effio
Asesor



UNIVERSIDAD NACIONAL PEDRO RUIZ GALLO
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DECANATO

Ciudad Universitaria - Lambayeque



ACTA DE SUSTENTACIÓN VIRTUAL N°039-2021-D/FACFyM

Siendo las 11:00 am del día 24 de noviembre del 2021, se reunieron vía plataforma virtual, <https://meet.google.com/boo-chmv-wjq> los miembros del jurado evaluador de la Tesis titulada:

“Técnicas Analíticas y Computacionales para el Estudio de la Fase Vidrio en el Modelo de Edwards-Anderson”.

Designados por Resolución N° 070-2021-VIRTUAL-D/FACFyM de fecha 29 de enero de 2021.

Con la finalidad de evaluar y calificar la sustentación de la tesis antes mencionada, conformada por los siguientes docentes:

| | |
|--|-------------------|
| Dr. Luis Alberto Curo Maquén | Presidente |
| M.Sc. Juan Pedro Rivera Vásquez | Secretario |
| Lic. Fis. José Fernández Calderón | Vocal |

La tesis fue asesorada por el M. Sc. Augusto Saba Effio, nombrado por Resolución N° 070-2021-VIRTUAL-D/FACFyM de fecha 29 de enero de 2021.

El Acto de Sustentación fue autorizado por Resolución N° 840-2021-VIRTUAL-D/FACFyM de fecha 17 de noviembre 2021.

La Tesis fue presentada y sustentada por el Bachiller: **Arrunátegui Reyes Paolo César**, y tuvo una duración de 50 minutos.

Después de la sustentación, y absueltas las preguntas y observaciones de los miembros del jurado se procedió a la calificación respectiva, otorgándole el Calificativo de 18 (Dieciocho) en la escala vigesimal, mención, Muy Bueno.

Por lo que queda apto para obtener el Título Profesional de **Licenciado en Física**, de acuerdo con la Ley Universitaria 30220 y la normatividad vigente de la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas y la Universidad Nacional Pedro Ruiz Gallo.

Siendo las 12:42 pm se dio por concluido el presente acto académico, dándose conformidad al presente acto con la firma de los miembros del jurado.

Dr. Luis Alberto Curo Maquén
Presidente

M.Sc. Juan Pedro Rivera Vásquez
Secretario

Lic. Fis. José Fernández Calderón
Vocal

M.Sc. Augusto Saba Effio
Asesor

Declaración Jurada de Originalidad

Yo, Paolo César Arrunátegui Reyes investigador principal, y M.Sc. Augusto Saba Effio, asesor del trabajo de investigación “Técnicas analíticas y computacionales para el estudio de la fase vidrio en el modelo de Edwards-Anderson”, declaramos bajo juramento que este trabajo no ha sido plagiado, ni contiene datos falsos. En caso se demostrara lo contrario, asumo responsablemente la anulación de este informe y por ende el proceso administrativo a que hubiera lugar. Que puede conducir a la anulación del título o grado emitido como consecuencia de este informe.

Lambayeque, 16 de setiembre de 2021

Investigador: Paolo César Arrunátegui Reyes

Asesor: M.Sc. Augusto Saba Effio

Dedicado a mi familia
Lunae lumen in tenebris

Agradecimiento

Al Dr. Fis. Octavio Rodríguez Salmón y al M. Sc. Augusto Saba Effio por la asesoría, supervisión y conocimientos compartidos a lo largo del desarrollo de esta tesis.

Índice general

| | |
|---|-----------|
| Introducción | 1 |
| 1. Diseño Teórico | 4 |
| 1.1. Física Estadística de Modelos de espines Clásicos | 4 |
| 1.1.1. Introducción a la Física Estadística | 4 |
| 1.1.2. Ensamblés | 5 |
| 1.1.3. Modelo de Ising Ferromagnético | 11 |
| 1.1.4. Modelo de Blume-Capel | 23 |
| 1.1.5. Método de Monte Carlo en Física Estadística | 26 |
| 1.1.6. Método de Monte Carlo en el Modelo de Ising | 30 |
| 1.1.7. Método de Monte Carlo en el Modelo Blume Capel | 32 |
| 1.2. Vidrios de Espín y Modelo de Edwards-Anderson en dimensión infinita | 39 |
| 1.2.1. Desorden Templado | 39 |
| 1.2.2. Autopromedio | 39 |
| 1.2.3. Método de réplicas | 40 |
| 1.2.4. Física del estado vidrio de espín | 42 |
| 1.2.5. Teoría de Campo Medio de los Vidrios de Espín | 54 |
| 2. Métodos y Materiales | 77 |
| 2.1. Materiales | 77 |
| 2.2. Método | 78 |
| 2.2.1. Creación de la estructura teórica | 78 |

| | | |
|-----------|--|-----------|
| 2.2.2. | Revisión de la bibliografía | 78 |
| 2.2.3. | Escritura del apartado teórico estructurado | 78 |
| 2.2.4. | Simulaciones computacionales para comprobar los cálculos analíticos. | 79 |
| 3. | Resultados y discusión | 80 |
| 3.1. | Parallel Tempering | 81 |
| 3.2. | Modelo de Edwards-Anderson en la Red Cúbica | 87 |
| 4. | Conclusiones | 91 |
| 5. | Recomendaciones | 93 |
| | Bibliografía | 94 |
| 6. | Anexos | 96 |
| 6.1. | Algoritmo Montecarlo tradicional | 96 |
| 6.2. | Algoritmo Metrópolis tradicional | 97 |
| 6.3. | Generador de números aleatorios | 98 |
| 6.4. | Generador de la red con estados iniciales aleatorios | 99 |

Índice de figuras

| | | |
|------|---|----|
| 1. | Todas las transiciones de fase son de primer orden excepto en el punto crítico C. Luego de C es posible moverse continuamente desde líquido a gas. | 2 |
| 2. | Las transiciones de fase de primer orden presenta una discontinuidad en la temperatura crítica | 2 |
| 3. | Las transiciones de fase de segundo orden presentan continuidad en todo el intervalo | 3 |
| 1.1. | La energía compartida entre el reservorio con la energía $E_R = E - \epsilon_i$ | 8 |
| 1.2. | Red bidimensional de espines ordenados simétricamente con condiciones de contorno e interacción J con primeros vecinos. . | 11 |
| 1.3. | Gráfica de la solución numérica de la ecuación 1.27 | 15 |
| 1.4. | Reemplazo en la temperatura crítica | 15 |
| 1.5. | Diagrama de fases del modelo Blume-Capel en el plano $T - D$ con aproximación de campo medio. El círculo negro representa el punto tricrítico. Se representa por F y P las fases Ferromagnética y Paramagnética para las cuales la línea consecutiva es una transición de segundo orden y la línea punteada una de primer orden | 25 |
| 1.6. | Actualización Secuencial (Correcta) | 29 |
| 1.7. | Actualización Paralela (Incorrecta) | 29 |
| 1.8. | Representación del calor específico para transiciones de fase de primer y segundo orden | 33 |

| | |
|--|----|
| 1.9. Representación teórica de la energía y el calor específico en transición de fase de primer orden | 34 |
| 1.10. Representación teórica de la energía y el calor específico en transición de fase de segundo orden | 35 |
| 1.11. Representación de la magnetización por espín para las transiciones de fase de primer y segundo orden | 36 |
| 1.12. Gráfico representado para varios tamaños de la red ($L = 5, 10, 20, 30, 40$). El Cumulante de Magnetización (V_m) inicia una caída suavizada para cada tamaño de red. | 38 |
| 1.13. Frustraciones en el sistema de tres espines. (a) Sin frustración: El producto de las interacciones a lo largo del triángulo es positivo (b) Triángulo frustrado: el producto de las interacciones a lo largo del triángulo es negativo | 43 |
| 1.14. Energía libre de un sistema Ising Ferromagnético con campo magnético externo igual a cero | 45 |
| 1.15. Estructura cualitativa de la energía libre de los vidrios de espín a diferentes temperaturas | 48 |
| 1.16. Función de distribución de probabilidad $P(q)$ (de izquierda a derecha): En fase paramagnética, en fase ferromagnética, en fase vidrio de espín | 50 |
| 1.17. El árbol jerárquico de los estados vidrios de espín | 53 |
| 1.18. Diagrama de fases (Paramagnética, Ferromagnética y Vidrio de espín) mostrada para distintos valores de Temperatura y J_0 . . . | 73 |
| 1.19. Variación de la magnetización por espín según $J_0 = 1.1, 1.3, 1.5, 2.0$ | 74 |
| 1.20. Comportamiento de la magnetización por espín desde $J_0 = 1$ hasta $J_0 = 1,25$ | 75 |
| 3.1. Simulación secuencial de cada temperatura para cada replica . . | 85 |

| | |
|--|----|
| 3.2. Simulación paralela para las temperaturas en cada replica, Parallel Tempering se basa en el intercambio de configuraciones entre temperaturas | 85 |
| 3.3. Comparación de rapidez del algoritmo Parallel Tempering para el equilibrio de magnetización por espín contra el algoritmo tradicional secuencial | 86 |
| 3.4. Representación del parámetro de orden q y su comportamiento con el aumento de la temperatura | 87 |
| 3.5. Representación del cumulante de Binder. Debido a la cantidad pequeña de muestras y por consiguiente, el efecto finito, podemos verificar el acercamiento de las tres líneas aproximadamente a la $T_c = 0,99$ | 88 |
| 3.6. Histograma de q para 5500 muestras | 89 |
| 3.7. Histograma de q para 3550 muestras | 89 |

Resumen

Los vidrios de espín se forman cuando hay una competencia entre acoplamientos ferromagnéticos y antiferromagnéticos a bajas temperaturas, generando gran frustración para encontrar una única configuración de espines que minimiza la energía libre. Para demostrar la fase vidrio de espín se ha utilizado el algoritmo Parallel Tempering aplicado al Método Monte Carlo utilizando conceptos teóricos de mecánica estadística y diversas herramientas matemáticas. El modelo utilizado para tal demostración es denominado Modelo de Edwards Anderson logrando identificar las fases vidrio de espín y la temperatura crítica a la cual éste ocurre. Debido a las limitaciones del tamaño finito los resultados son aproximados sin embargo son representativos para la finalidad descrita.

Palabras Clave: Transición de Fase, Modelo de Ising, Modelo Blume-Capel, Método Montecarlo, Desorden Templado, Autopromedio, Método de réplicas, Vidrio de espín, Teoría de Campo Medio, Simetría de Réplicas, MPI, Message Passing Interface, Parallel Tempering, Modelo SK, Parámetro de orden

Abstract

Spin glasses are formed when there is competition between ferromagnetic and antiferromagnetic couplings at low temperatures, generating great frustration in finding a single spin configuration that minimizes free energy. To demonstrate the spin glass phase, the Parallel Tempering algorithm applied to the Monte Carlo Method using theoretical concepts of statistical mechanics and various mathematical tools has been used. The model used for such a demonstration is called the Edwards Anderson Model, which is able to show the spin glass phases and the critical temperature at which it occurs. Due to the limitations of the finite size, the results are approximate, however they are representative for this purpose.

Key Words: Phase Transition, Ising Model, Blume-Capel Model, Monte Carlo Method, Tempered Disorder, Auto Average, réplica Method, Spin Glass, Medium Field Theory, réplica Symmetry, MPI, Message Passing Interface, Parallel Tempering, SK Model, Order Parameter

Introducción

Una transición de fase[6] en un sistema termodinámico es la transformación experimentada por el sistema al cambiar algunas de sus propiedades físicas, sobre todo, el cambio repentino en la capacidad calorífica debido a una pequeña variación de la temperatura.

Una transición de fase ocurre cuando existe una singularidad en la energía libre o en una de sus derivadas. El resultado es el cambio en las propiedades de la sustancia como por ejemplo, la transición de líquido a gas o de un conductor normal a superconductor o un paramagneto a ferromagneto.

El diagrama de fase de un fluido, por ejemplo, se determina cuando la temperatura y la presión varían y por lo tanto, existe en estado sólido, líquido y gaseoso. Según el gráfico de diagrama de fases, el cruce por los límites genera un cambio en el calor y la densidad los cuales son signos de una transición de primer orden.

La primera clasificación fue propuesta por Ehrenfest las cuales son indicadas de acuerdo al orden de la menor derivada discontinua de la energía libre. Las transiciones de fase de primer orden exhiben una discontinuidad en la primera derivada de la energía libre respecto a una variable termodinámica. Del mismo modo, las transiciones de fase de segundo orden tienen una discontinuidad en la segunda derivada de la energía libre.

Actualmente se utilizan otras definiciones para la clasificación de las transi-

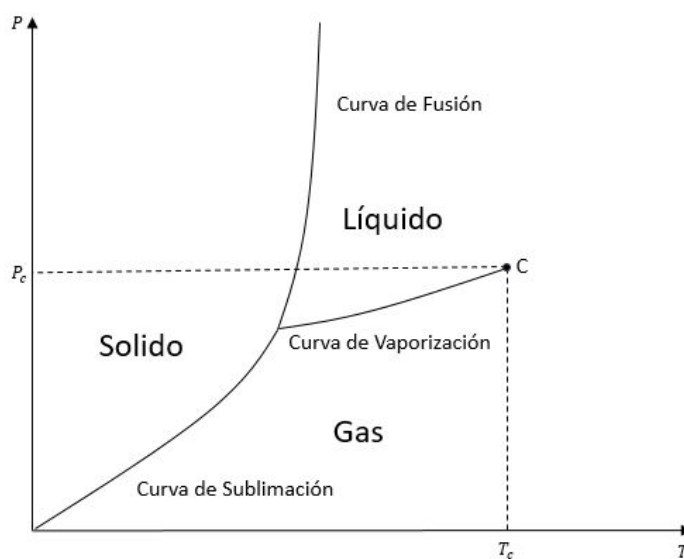


Figura 1: Todas las transiciones de fase son de primer orden excepto en el punto crítico C . Luego de C es posible moverse continuamente desde líquido a gas.

ciones de fase, pero teniendo en cuenta la clasificación de Ehrenfest y son las siguientes:

- Transiciones de fase de primer orden o discontinuas. Son aquellas en las que se encuentra involucrado el calor latente el cual es emitido o absorbido. En estas transiciones, las fases involucradas deben coexistir por un periodo de tiempo debido a que la energía no puede transmitirse instantáneamente entre el sistema y su ambiente.

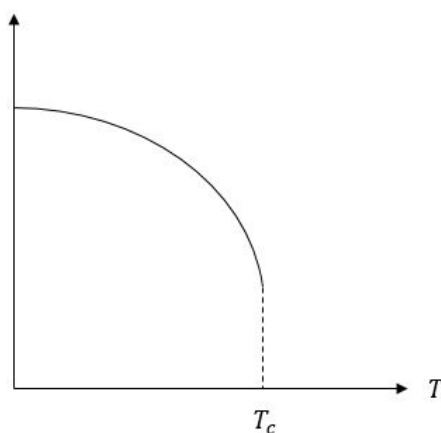


Figura 2: Las transiciones de fase de primer orden presenta una discontinuidad en la temperatura crítica

- Transiciones de fase de segundo orden o continuas. En esta clase de transición la energía libre y la primera derivada de la energía libre son continuas, mientras que la segunda derivada es discontinua. En esta clase de transición no hay calor latente asociado.

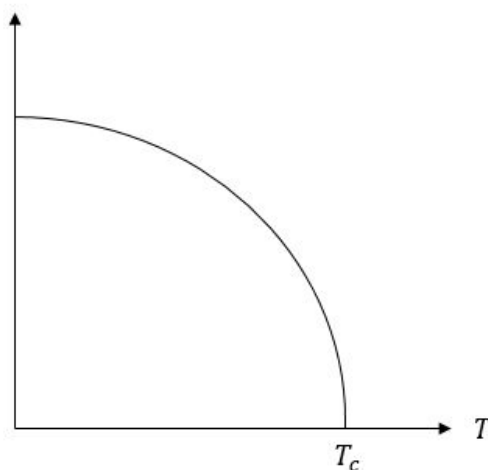


Figura 3: Las transiciones de fase de segundo orden presentan continuidad en todo el intervalo

Capítulo 1

Diseño Teórico

1.1. Física Estadística de Modelos de espines Clásicos

1.1.1. Introducción a la Física Estadística

El macroestado de un sistema es definido por un pequeño número de variables, suficientes para describir el sistema en nuestra escala. Por ejemplo, el estado de un gas puede ser especificado dando el número N de partículas, el volumen V que ocupa, y su energía total E o su temperatura T . Un microestado es definido especificando todas las variables que caracterizan detalladamente el sistema. Por ejemplo, en el caso de un gas a nivel clásico, las coordenadas de posición y las componentes del momentum de cada partícula deben ser especificadas. Evidentemente, para un sistema de muchos grados de libertad, es imposible conocer el microestado.

En general, varios microestados pueden describir al mismo macroestado. Por ejemplo, millones de configuraciones (microestados) pueden resultar en el mismo macroestado de un gas a temperatura T y volumen V .

En Física Estadística se define "Espacio de Fase" como al espacio en el cual un punto corresponde a un microestado del sistema. En el caso de un gas, las

coordenadas de ese espacio son: las posiciones y sus correspondientes momentos.

Por ejemplo, en un gas dentro de un volumen definido en equilibrio termodinámico, el sistema visita varios puntos del espacio de fase (varios microestados) a lo largo del tiempo, manteniendo el macroestado de equilibrio con V y T constantes. Cuando uno realiza una medida en una escala temporal macroscópica, el resultado de la medida es un promedio temporal de los microestados visitados en ese intervalo. Estos microestados se pueden pensar como un conjunto de réplicas imaginarias que coexisten simultáneamente. A esto se llama Ensamble.

1.1.2. Ensambls

Los ensambles o colectividad estadística son un conjunto de sistemas termodinámicos que comparten características y permiten realizar análisis estadísticos para los estados permitidos en los que pueden encontrarse. Existen tres tipos de ensambles, los cuales se consideran la base de la física estadística[1][4].

Podemos considerar un sistema como un conjunto de partículas que puede compartir o no energía y/o partículas con otros sistemas. Dependiendo de lo anteriormente indicado, los ensambles se pueden clasificar en:

Ensamble Microcanónico

El ensamble microcanónico es el mas simple y fundamental de todos y se encuentra formado por un conjunto de sistemas aislados, los cuales no transfieren ni reciben energía al exterior[3][4][5]. Supongamos que tenemos un sistema cerrado que sabemos que es igualmente probable el encontrarse en un estado g accesible.

La probabilidad $P(s)$ de encontrar el sistema en este estado es :

$$P(s) = 1/g \quad (1.1)$$

si el estado s es accesible y $P(s) = 0$ en otros casos. La suma $\sum P(s)$ de la probabilidad sobre todos los estados es siempre igual a la unidad:

$$\sum_s P(s) = 1 \quad (1.2)$$

Supongamos que la propiedad física X tiene el valor $X(s)$ cuando el sistema se encuentra en el estado s . X puede ser el momento magnético, energía, cuadrado de la energía, densidad de carga cerca de un punto r u otra propiedad que puede ser observada cuando el sistema se encuentra en algún estado[2][4][5]. El promedio de la observación de la cantidad X tomada sobre el sistema descrito por la probabilidad $P(s)$ es:

$$\langle X \rangle = \sum_s X(s)P(s) \quad (1.3)$$

Para un sistema cerrado el valor promedio de X es:

$$\langle X \rangle = \sum_s X(s)(1/g) \quad (1.4)$$

por que ahora todos estados accesibles g son igualmente probables, con $P(s) = 1/g$. El promedio en (1.4) es un ejemplo elemental de lo que se puede llamar un ensamble promedio.

La entropía en un ensamble microcanónico es obtenido directamente de la función multiplicidad $g[E]\delta E$ de acuerdo a:

$$S = k_B \ln(g[E]\delta E) \approx k_B \ln(g[E]) \quad (1.5)$$

donde el intervalo de energía es suficientemente pequeño que para sistemas de larga multiplicidad no hay diferencia practica entre el total de número de es-

tados $g[E]\delta E$ entre el intervalo y la densidad de estados $g[E]$ al intervalo de energía central. De manera similar, si este intervalo es pequeño, no hay diferencia práctica entre E y U , por lo tanto, la relación termodinámica fundamental para el ensamble microcanónico especifica la dependencia de la entropía sobre la energía interna y otras variables termodinámicas necesarias para especificar el ensamble. Todas las otras propiedades termodinámicas del sistema pueden ser obtenidas desde esta relación fundamental, por ejemplo, la temperatura puede ser obtenida usando:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial U} \Rightarrow \beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{\partial \ln(g[U])}{\partial U} \quad (1.6)$$

En el ensamble microcanónico, la temperatura mide la dependencia de la energía respecto a la función multiplicidad para sistemas aislados.

Ensamble Canónico

Supongamos que un sistema aislado grande se divide de manera asimétrica en dos partes, una de las cuales es mucho más grande que el otro, separados por una pared rígida e impermeable que, sin embargo, conduce el calor. La energía total E del sistema compuesto es conservado[4][5]. Buscamos la probabilidad P_i que, en equilibrio térmico, el sistema pequeño se encuentra en un estado particular i con energía ϵ_i . El sistema mas grande sirve como un reservorio de calor con energía total $E_R = E - \epsilon_i$ que es mucho mas grande que la energía $\epsilon_i \ll E_R$ del sistema de interés.

Hasta aquí hemos especificado el estado preciso del sistema, el reservorio puede ocupar uno de los estados que satisfaga la condición $E_R + \epsilon_i = E$ sobre la energía total. De acuerdo a postulado de iguales probabilidades a priori, cada uno de estos estados se encuentra con igual probabilidad. Por lo tanto, P_i es proporcional a la multiplicidad Ω_R tal que:

$$P_i = C\Omega_R[E - \epsilon_i] \quad (1.7)$$

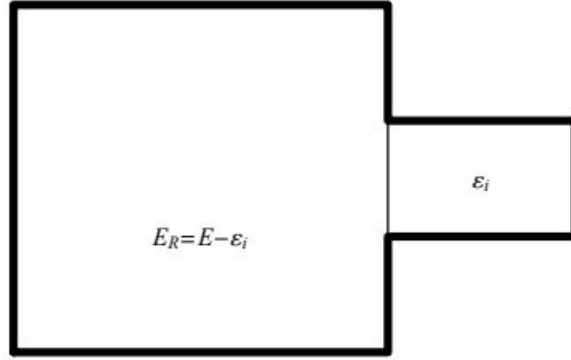


Figura 1.1: La energía compartida entre el reservorio con la energía $E_R = E - \epsilon_i$ y un sistema pequeño con energía ϵ_i en estado i aislados mediante una pared separadora

donde C es la constante de normalización. Expandiendo $\ln\Omega_R$ para $\epsilon \ll E$,

$$\ln\Omega_R[E - \epsilon] \approx \ln\Omega_R[E] - \epsilon \frac{\partial \ln\Omega_R}{\partial E} \quad (1.8)$$

Identificamos la entropía y la temperatura del reservorio como

$$S_R = k_B \ln\Omega_R \quad \frac{1}{T} = \frac{\partial S_R}{\partial E} \quad (1.9)$$

Entonces podemos obtener:

$$\ln P_i = -\frac{\epsilon_i}{k_B T} + C' \quad (1.10)$$

Donde C' es otra constante. Por lo tanto, la probabilidad relativa de que un sistema ocupe un estado en particular viene dado por el factor de Boltzman:

$$P_i \propto e^{-\beta \epsilon_i} \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (1.11)$$

Por lo tanto, para un número determinado de estados, la probabilidad total de encontrar a un sistema en un estado está determinado por la constante de normalización que viene a ser la función de partición y se encuentra dada de la siguiente manera[4][5]:

$$P_i = Z^{-1} e^{-\beta \epsilon_i} \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad Z = \sum_i e^{-\beta \epsilon_i} \quad (1.12)$$

La función de partición nos genera un enlace entre la parte microscópica incluyendo estados y niveles de energía y la parte macroscópica del sistema de donde podemos obtener la energía libre, que es definida por:

$$F = -k_B T \ln Z \quad (1.13)$$

Se debe tener en cuenta que la energía libre esta referida la entropía S y a la energía U por:

$$F = U - TS \quad (1.14)$$

Las cantidades observables se calculan como promedios sobre estados. La observable A se puede escribir como:

$$\langle A \rangle = \sum_n P(n) A_n = \frac{\sum_n A_n \exp(-E_n/k_B T)}{\sum_l \exp(-E_l/k_B T)} \quad (1.15)$$

donde A_n es un valor de A en el estado n o más precisamente es el valor mecánico-cuántico esperado $\langle n|A|n \rangle$ Por ejemplo, la energía media está dada por:

$$U = \sum_n P(n) E_n = \frac{\sum_n E_n \exp(-E_n/k_B T)}{\sum_l \exp(-E_l/k_B T)} \quad (1.16)$$

Haciendo $\beta = 1/k_B T$ podemos reescribir la ecuación anterior como

$$U = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta}(\beta F) \quad (1.17)$$

En las subsecciones siguientes se aplicará el uso de la función de partición y la energía libre para el desarrollo del Hamiltoniano en diferentes dimensiones

Ensamble Gran Canónico

Llamamos ensamble Gran Canónico al conjunto de sistemas que además de intercambiar energía también intercambian partículas las cuales se encuentran en interacción en la que mantenemos fijos el potencial químico μ , el volumen V y

la temperatura $T[4]$.

Este ensamble no es utilizado en este escrito debido a que el objeto de estudio es un sistema que mantiene constante el número de partículas.

1.1.3. Modelo de Ising Ferromagnético

La física estadística se ocupa de sistemas con muchos grados de libertad. Un problema típico planteado por la física estadística es calcular observables macroscópicos “promedio” de un sistema para el cual se supone que se conoce el Hamiltoniano. Por ejemplo, consideremos los sistemas magnéticos: si un ferromagneto tiene una anisotropía uniaxial muy fuerte, se puede describir por el modelo Ising, donde N espines interactúan según el Hamiltoniano[6][3]:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} S_i \cdot S_j \quad (1.18)$$

Donde $S_i = \pm 1, \forall i$ y $\sum_{(i,j)}$ representa la suma sobre cada par ij de espines vecinos más próximos. Supongamos una red cuadrada de 9 espines con condiciones periódicas de contorno:

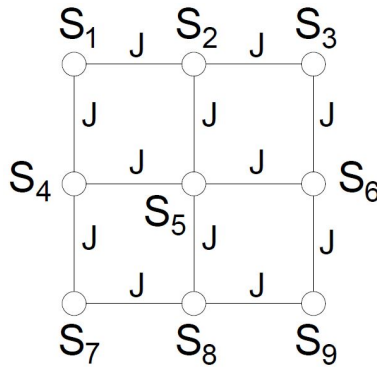


Figura 1.2: Red bidimensional de espines ordenados simétricamente con condiciones de contorno e interacción J con primeros vecinos.

Note que el espín S_5 tiene a S_2, S_6, S_8, S_4 como sus primeros vecinos o vecinos más próximos.

Por otro lado, debido a las condiciones periódicas de borde impuestas, el espín S_8 por ejemplo, tiene como sus vecinos más próximos a los espines S_5, S_9, S_2, S_7 .

De esta manera la sumatoria $\sum_{(i,j)} S_i \cdot S_j$ sería de este modo:

$$\begin{aligned} \sum_{(i,j)} S_i \cdot S_j = & S_1 S_7 + S_1 S_2 + S_2 S_8 + S_2 S_3 + \\ & S_3 S_9 + S_3 S_1 + S_4 S_1 + S_4 S_5 + \\ & S_5 S_2 + S_5 S_6 + S_6 S_3 + S_6 S_4 + \\ & S_7 S_4 + S_7 S_8 + S_8 S_5 + S_8 S_9 + \\ & S_9 S_6 + S_9 S_7 \end{aligned} \quad (1.19)$$

Note que los pares no se repiten y además cada espín interactúa con sus cuatro vecinos más próximos. Decimos entonces que 4 es el número de coordinación. Este número se denota generalmente con la letra z .

La idea de la aproximación de campo medio consiste en considerar despreciables las fluctuaciones de la magnetización alrededor de su valor medio.

Veamos, cada variable de espín puede expresarse así:

$$S_i = \langle S_i \rangle + S_i - \langle S_i \rangle \quad (1.20)$$

Donde $\langle S_i \rangle$ es el valor medio térmico del espín i . Hasta aquí no se ha realizado ninguna aproximación. También debemos notar que $S_i - \langle S_i \rangle = \delta S_i$ es la fluctuación del espín i respecto de su valor medio. Podemos entonces decir que todo espín es igual a su valor medio mas la fluctuación alrededor de su valor medio, entonces:

$$\begin{aligned} S_i &= \langle S_i \rangle + \delta S_i \\ S_j &= \langle S_j \rangle + \delta S_j \end{aligned} \quad (1.21)$$

Desarrollando la ecuación 1.21 y considerando que $\delta S_i \delta S_j$ es un término muy

pequeño y puede despreciarse tenemos:

$$\mathcal{S}_i \mathcal{S}_j = \langle \mathcal{S}_i \rangle \mathcal{S}_j + \langle \mathcal{S}_j \rangle \delta \mathcal{S}_i$$

Consideramos a $\delta \mathcal{S}_i$ muy pequeño, de esta manera $\mathcal{S}_i \mathcal{S}_j$ se aproxima a:

$$\mathcal{S}_i \mathcal{S}_j \simeq \langle \mathcal{S}_i \rangle \mathcal{S}_j$$

Por lo tanto:

$$\mathcal{H} \simeq -J \sum_{(i,j)} \langle \mathcal{S}_i \rangle \mathcal{S}_j \quad (1.22)$$

Considerando que todos los espines son equivalentes, entonces:

$$\langle \mathcal{S}_1 \rangle = \langle \mathcal{S}_2 \rangle = \dots = \langle \mathcal{S}_N \rangle$$

Y teniendo en cuenta que $\langle \mathcal{S}_i \rangle = m$, entonces:

$$\mathcal{H} \simeq -Jzm \sum_{j=1}^N \mathcal{S}_j \quad (1.23)$$

donde z es el número de coordinación, m la magnetización por espín y N el número total de espines.

Es importante notar que ahora el Hamiltoniano[6][4] es similar al de N espines independientes que están sometidos a la acción de un campo magnético $h = Jmz$, tal que

$$\mathcal{H} = - \sum_{j=1}^N h \mathcal{S}_j \quad (1.24)$$

Debido a esto se denomina aproximación de campo medio, porque la acción de un solo campo viene a sustituir la interacción de los espines sobre cada espín.

También podemos ver que se ha simplificado el problema de las interacciones de muchos cuerpos al problema de un solo cuerpo ya que $\mathcal{H} = -\sum_{j=1}^N H_j$, donde $\mathcal{H}_j = -hS_j$ Entonces la función de partición es factorizable:

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \sum_{S_1} \sum_{S_2} \sum_{S_3} \dots \sum_{S_N} e^{\beta \sum_{j=1}^N hS_j} \\ \mathcal{Z} &= \prod_{j=1}^N \left(\sum_{S_j=-1}^1 e^{\beta h S_j} \right) = \prod_{j=1}^N Z_j\end{aligned}$$

Sabiendo que $Z_1 = Z_3 = Z_2 = \dots = Z_N$ entonces $Z = Z_1^N$, con lo cual podemos determinar la energía media total:

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(\mathcal{Z}) \\ \langle E \rangle &= -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z_1) \\ \langle E \rangle &= -N \langle \epsilon \rangle\end{aligned}\tag{1.25}$$

Donde $\langle \epsilon \rangle = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z_1)$.

Podemos ver con este ejemplo que utilizando la función de partición de un solo espín nos permite obtener los valores medios térmicos por espín[6]. Calculamos entonces la magnetización por espín de la siguiente manera:

$$\langle S_1 \rangle = \frac{e^{\beta h} - e^{-\beta h}}{e^{\beta h} + e^{-\beta h}}\tag{1.26}$$

Sin embargo, el campo h no es constante, sino que depende de $\langle S_1 \rangle$, entonces

tenemos una ecuación autoconsistente:

$$m = \langle S_1 \rangle = \frac{e^{\beta J z m} - e^{-\beta J z m}}{e^{\beta J z m} + e^{-\beta J z m}}$$

$$m = \tanh(\beta J z m) \quad (1.27)$$

Resolviendo numéricamente esta ecuación no lineal, conseguimos la siguiente figura:

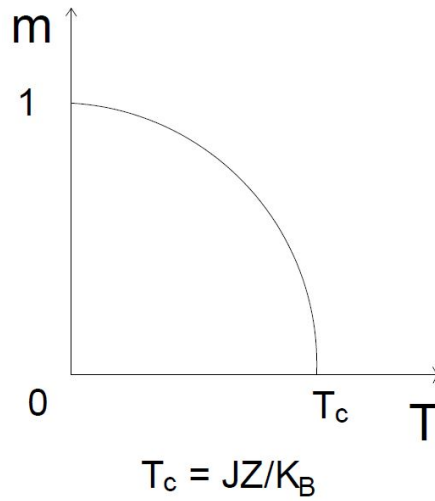


Figura 1.3: Gráfica de la solución numérica de la ecuación 1.27

haciendo $\frac{J}{K_B} = 1$, vemos que $T_c = Z$ (igual al número de coordinación)

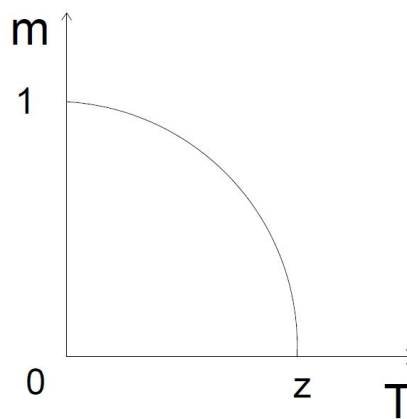


Figura 1.4: Reemplazo en la temperatura crítica

La aproximación de campo medio falla al predecir que en una red unidimensional la temperatura crítica sería igual a $T_c = 2$ y sabemos que, en una dimensión, $T_c = 0$. En una red cuadrada esta aproximación da $T_c = 4$, pero sabemos que el

T_c verdadero es 2,269... No obstante, cuando la dimensión de la red va aumentando el número de coordinación también y la T_c estimada en campo medio se aproxima más al valor verdadero. Esto se debe a que la aproximación de campo medio desprecia las fluctuaciones sin embargo, en bajas dimensiones las fluctuaciones son muy importantes sobre todo alrededor de $T = T_c$, pero en altas dimensiones las fluctuaciones son pequeñas[6][4].

Por eso la aproximación de campo medio es buena en altas dimensiones. No obstante, esta aproximación puede en algunos casos proporcionar una buena descripción cualitativa del comportamiento del sistema, incluso en bajas dimensiones.

La aproximación de campo medio es la primera forma de abordar un problema con interacciones de muchos cuerpos que no tenga solución analítica exacta. La mayoría de los sistemas de muchos cuerpos interactuantes no tiene solución exacta, por eso es necesario recurrir a aproximaciones que aproximen las interacciones.

La aproximación de campo medio da resultados exactos en dimensión infinita, o sea, cuando el número de coordinación z es infinito. Para probar esto, consideremos un sistema de N espines, donde cada espín interactúa con los otros $N - 1$ espines con la misma interacción J . Este "toy model" nos sirve para probar que si $Z = N$, donde $N \rightarrow \infty$, este modelo conduce al mismo resultado de la aproximación de campo medio. Para esta finalidad, vamos a determinar el Hamiltoniano del "toy model".

Decimos que es un "toy model" por que no existe un sistema en el que cada par de espines interactúe con la misma intensidad independiente de la distancia. Entonces, la interacción de un espín S_i con los otros $N - 1$ espines se expresa como:

$$-JS_i(S_1 + S_2 + \dots + S_{i-1} + S_{i+1} + \dots + S_N)$$

$$\begin{aligned}
&= -JS_i \left(\sum_{j=1}^N S_j - S_i \right) = -J \left(\sum_{j=1}^N S_i S_j - JS_i^2 \right) = -J \sum_{j=1}^N S_i S_j + J \\
&\epsilon_i = -J \sum_{j=1}^N S_i S_j + J
\end{aligned} \tag{1.28}$$

Donde ϵ_i es la energía del espín i . Note que al sumar las energías de todos los espines no obtenemos la energía total:

$$\sum_{i=1}^N \epsilon_i = -J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N S_i S_j + J \sum_{i=1}^N 1 = -J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N S_i S_j + NJ$$

Note que esta expresión está considerando el par $S_i S_j$ dos veces. por lo tanto, debemos dividir por 2 para obtener la expresión correcta de la energía total:

$$\begin{aligned}
E &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \epsilon_i = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N S_i S_j + \frac{NJ}{2} \\
E &= -\frac{J}{2} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + \frac{NJ}{2}
\end{aligned}$$

El término $\frac{NJ}{2}$ es una constante aditiva que solo desplaza la energía en un valor, pero es irrelevante para calcular magnetización media, calor específico, susceptibilidad, etc. Entonces la vamos a ignorar. Entonces el hamiltoniano para el "toy model" sería dado por:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 \tag{1.29}$$

Note que \mathcal{H} se puede expresar en función de la magnetización por espín ($m = \frac{M}{N}$), entonces:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} N^2 m^2 \tag{1.30}$$

Aquí tenemos el problema de que la energía no es una cantidad extensiva. La

energía en este hamiltoniano es una cantidad proporcional al cuadrado del número de partículas $E \propto N^2$, lo cual la hace no extensiva[6]. Para que funcione la mecánica estadística de Boltzman-Gibbs, la energía debe ser una cantidad extensiva, esto quiere decir que la energía debe aumentar linealmente con el número de partículas, por lo tanto, debe ser $E \propto N$. En sistemas con interacciones de largo alcance la energía no es una cantidad extensiva. Entonces vamos a tener que imponer la extensividad dividiendo J por N [6].

Entonces nuestro Hamiltoniano resulta ahora así:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 \quad (1.31)$$

Ahora sí nuestro Hamiltoniano da una energía extensiva pero se puede cuestionar con toda razón este artificio ya que produce una interacción $\frac{J}{N}$ para cada par de espines. ¿Cómo puede saber un par de espines que su interacción depende del número total de partículas? Es un absurdo. No obstante, este es un "toy model" ya que tampoco existe un sistema donde la interacción no depende de la distancia.

Ahora determinemos la función de partición del sistema:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} e^{\frac{\beta J}{2N} (\sum_{i=1}^N S_i)^2} \quad (1.32)$$

Donde:

$$\sum_{\{S_i\}} = \sum_{S_1=-1}^1 \sum_{S_2=-1}^1 \sum_{S_3=-1}^1 \dots \sum_{S_N=-1}^1$$

Necesitamos linealizar el término cuadrático $(\sum_{i=1}^N S_i)^2$ y para esto utilizaremos la transformación de Hubbard-Stratonovich que va a desacoplar esta interacción entre espines.

La transformación de Hubbar-Stratonovich(HS) se basa en la integral gaussiana:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} &= \sqrt{2\pi}\sigma \\
 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2} + \frac{xx_0}{\sigma^2} - \frac{x_0^2}{2\sigma^2}} dx &= \sqrt{2\pi}\sigma \\
 e^{-\frac{x_0^2}{2\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2} + \frac{xx_0}{\sigma^2}} dx &= \sqrt{2\pi}\sigma \\
 e^{\frac{x_0^2}{2\sigma^2}} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2} + \frac{xx_0}{\sigma^2}} dx
 \end{aligned} \tag{1.33}$$

Note que si hacemos $x_0 = (\sum_{i=1}^N S_i)$ y $\sigma = \sqrt{\frac{N}{\beta J}}$, tenemos

$$e^{\frac{\beta J}{2N} (\sum_{i=1}^N S_i)^2} = \sqrt{\frac{2\pi N}{\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta J x^2}{2} + \frac{\beta J}{N} (\sum_{i=1}^N S_i) x} dx$$

Sustituyendo $x = yN$, entonces

$$\begin{aligned}
 e^{\frac{\beta J}{2N} (\sum_{i=1}^N S_i)^2} &= \sqrt{\frac{2\pi N}{\beta J}} N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta J N y^2}{2} + \beta J (\sum_{i=1}^N S_i) y} dy \\
 e^{\frac{\beta J}{2N} (\sum_{i=1}^N S_i)^2} &= \sqrt{\frac{2\pi N^3}{\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta J N y^2}{2}} \left(\prod_{i=1}^N e^{\beta J y S_i} \right) dy
 \end{aligned} \tag{1.34}$$

Ahora vamos a calcular la función de partición a partir de (1.32):

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Z} &= \sqrt{\frac{2\pi N^3}{\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta J N y^2}{2}} \left(\prod_{i=1}^N \sum_{S_i=-1}^1 e^{\beta J y S_i} \right) dy \\
 \mathcal{Z} &= \sqrt{\frac{2\pi N^3}{\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta J N y^2}{2}} (e^{\beta J y} + e^{-\beta J y})^N dy \\
 \mathcal{Z} &= 2^N \sqrt{\frac{2\pi N^3}{\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta J N y^2}{2}} \cosh^N(\beta J y) dy
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= 2^N \sqrt{\frac{2\pi N^3}{\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta J N y^2}{2}} e^{N \ln \cosh \beta J y} dy \\
\mathcal{Z} &= 2^N \sqrt{\frac{2\pi N^3}{\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-N(\frac{\beta J y^2}{2} - \ln \cosh \beta J y)} dy \\
\mathcal{Z} &= 2^N \sqrt{\frac{2\pi N^3}{\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-N\beta[\frac{J y^2}{2} - \frac{1}{\beta} \ln \cosh \beta J y]} dy \\
\mathcal{Z} &= 2^N \sqrt{\frac{2\pi N^3}{\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-N\beta f(y)} dy \tag{1.35}
\end{aligned}$$

Donde:

$$f(y) = \frac{J y^2}{2} - \frac{1}{\beta} \ln \cosh \beta J y$$

Analizaremos la integral $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-N\beta f(y)} dy$, donde $N \rightarrow \infty$, donde el integrando solo contribuye significativamente con la integral cuando la variable y está dentro de un entorno muy pequeño alrededor de y_0 , donde y_0 es el mínimo donde $f(y)$ está en un mínimo global.

Entonces para calcular la integral expandimos $f(y)$ alrededor de $y = y_0$

$$f(y) \simeq f(y_0) + f'(y_0) + \frac{f''(y_0)(y - y_0)^2}{2}$$

$$f(y) \simeq f(y_0) + \frac{f''(y_0)(y - y_0)^2}{2}$$

Justificamos $f'(y_0) = 0$ por ser $y = y_0$ un punto de mínimo. Mas términos no son necesarios ya que solo nos interesa un entorno muy pequeño alrededor de $y = y_0$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-N\beta f(y)} dy \simeq e^{-N\beta f(y_0)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{N\beta f''(y_0)(y - y_0)^2}{2}} dy$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-N\beta f(y)} dy \simeq \sqrt{\frac{2\pi}{N\beta f''(y_0)}} e^{-N\beta f(y_0)}$$

Por lo tanto:

$$\mathcal{Z} = \frac{2^N (2\pi) N}{\beta} \sqrt{\frac{1}{J f''(y_0)}} e^{-N\beta f(y_0)} \quad (1.36)$$

Por otro lado, la energía libre es:

$$F = -K_\beta T \ln \mathcal{Z} \quad (1.37)$$

Entonces:

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{2^N 2\pi N}{\beta} \left(\frac{1}{J f''(y_0)} \right)^{1/2} \right] - \frac{1}{\beta} \ln e^{-N\beta f(y_0)} \\ F &= -\frac{1}{\beta} N \ln 2 - \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{2\pi N}{\beta} \left(\frac{1}{J f''(y_0)} \right)^{1/2} \right] - \frac{N\beta f(y_0)}{\beta} \end{aligned}$$

Para $N \rightarrow \infty$ y $g = \frac{F}{N}$:

$$\frac{F}{N} = -\frac{1}{\beta} \ln 2 + f(y_0)$$

$$g(y) = \frac{J y_0^2}{2} - \frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh (\beta J y_0)] \quad (1.38)$$

Vemos entonces que, para que $y = y_0$ sea un mínimo global, por lo menos se debe cumplir que $g'(y_0) = 0$.

Entonces:

$$\begin{aligned} g'(y_0) &= \frac{dg}{dy} \Big|_{y=y_0} \\ \frac{d}{dy} \left(\frac{J y_0^2}{2} - \frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh (\beta J y_0)] \right) \Big|_{y=y_0} &= 0 \\ -J y_0 - \frac{1}{\beta} \frac{[-2\beta J \sinh (\beta J y_0)]}{2 \cosh (\beta J y_0)} &= 0 \\ -J y_0 + J \tanh (\beta J y_0) &= 0 \\ y_0 &= \tanh (\beta J y_0) \end{aligned} \quad (1.39)$$

Notamos que esta es la misma ecuación que determina el valor de la magneti-

zación media por espín en la aproximación de campo medio, entonces:

$$y_0 = m \quad (1.40)$$

También la temperatura crítica de la aproximación de campo medio es $T_c = \frac{zJ}{K_\beta}$, y en este "toy model" nos da un $T_c = \frac{J}{K_\beta}$. No obstante $T_c = \frac{N}{K_\beta} \frac{J}{N} = \frac{N\mathcal{J}}{K_\beta}$, donde $\mathcal{J} = \frac{J}{N}$ es la interacción entre cada par de espines de nuestro "toy model". por lo tanto, este modelo nos da una $T_c = N \frac{\mathcal{J}}{K_\beta}$, que significa que es la temperatura crítica de la aproximación de campo medio cuando el número de coordinación $Z = N$, donde $N \rightarrow \infty$. Por consiguiente, se ha demostrado que la aproximación de campo medio es exacta cuando el número de coordinación es infinito, que significa que la dimensión espacial del sistema es infinita. Sólo en este caso la aproximación de campo medio da resultados cuantitativos exactos. Por eso, este modelo es un de tipo mean-field(campo medio).

1.1.4. Modelo de Blume-Capel

El Modelo Blume-Capel es una extensión del modelo clásico de Ising que tiene en cuenta el efecto de una anisotropía de campo cristalino local[7]. Consideramos este modelo debido a que presenta transición de primer y segundo orden, por lo cual es muy útil para ilustrar estas dos transiciones y para mostrar diversos resultados en las simulaciones.

El modelo Blume-Capel esta dado por el siguiente Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} S_i \cdot S_j + D \sum_N S_i^2 \quad (1.41)$$

Donde $S_i = \pm 1, 0$ en los sitios $i = 1, \dots, N$ de una red de Bravais y la primera suma se realiza sobre todos los pares de sitios de vecinos más cercanos. Consideramos el caso ferromagnetico, con cambio positivo ($J > 0$) y parámetro de anisotropía ($D > 0$) lo que da lugar a una competencia entre distintos tipos de ordenamiento del espín.

En dimensión infinita la energía del Hamiltoniano[7] no es una cantidad extensiva, porque crece con el cuadrado del número total N de partículas, debido a que todos los espines interactúan entre sí. Por lo tanto, el término no extensivo es dividido por N para mantener la extensividad a fin de que se pueda emplear la Estadística de Boltzmann-Gibbs en su tratamiento. De esta manera, cuando todos los espines interactúan con la misma intensidad, el Hamiltoniano se escribe de la siguiente forma:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + D \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (1.42)$$

La energía libre esta dada por:

$$F = -k_B T \ln Z \quad (1.43)$$

La función de partición se encuentra dada por:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp \left\{ \left[\frac{\beta J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 \right] - \beta D \sum_{i=1}^N S_i^2 \right\} \quad (1.44)$$

Usando la identidad:

$$e^{\alpha^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{(-x^2 + 2\alpha x)} dx, \quad \alpha = \left(\frac{\beta J}{2N} \right)^{(1/2)} \sum_i^N S_i \quad (1.45)$$

Por lo tanto:

$$\exp \left\{ \left[\left(\beta J / 2N \right)^{1/2} \sum_{i=1}^N S_i \right]^2 \right\} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -x^2 + 2x \left(\beta J / 2N \right)^{(1/2)} \sum_i^N S_i \right\} dx \quad (1.46)$$

Realizamos el siguiente reemplazo:

$$x = \sqrt{\frac{\beta J N}{2}} m; \quad dx = \sqrt{\frac{\beta J N}{2}} dm \quad (1.47)$$

Y reemplazando en la función de partición tenemos:

$$Z = \sum_{S_i} \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(\frac{\beta J N}{2} m^2 \right) \exp \left\{ 2 \left(\frac{\beta J}{2N} \right)^{1/2} \sum_i^N S_i \left(\sqrt{\frac{\beta J N}{2}} m \right) \right\} \exp \left\{ -\beta D \sum_i^N S_i^2 \right\} dm \quad (1.48)$$

Desarrollando y simplificando conseguimos:

$$Z = \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-N(\beta J/2m^2 - \ln(2\cosh(\beta J m) \exp(-\beta D) + 1))) dm \quad (1.49)$$

Que podemos escribir de la siguiente manera:

$$Z = \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-N\beta f(m)) dm \quad (1.50)$$

Donde:

$$f(m) = \frac{J}{2}m^2 - \frac{1}{\beta} \ln(2\cosh(\beta J m) \exp(-\beta D) + 1) \quad (1.51)$$

En el espacio D vs T [20], donde T es la temperatura absoluta, el diagrama de fases consiste en una fase ordenada y otra desordenada separada por una línea de transición que cambia de primer a segundo orden en un punto tricrítico bien definido como se muestra en la figura 1.5.

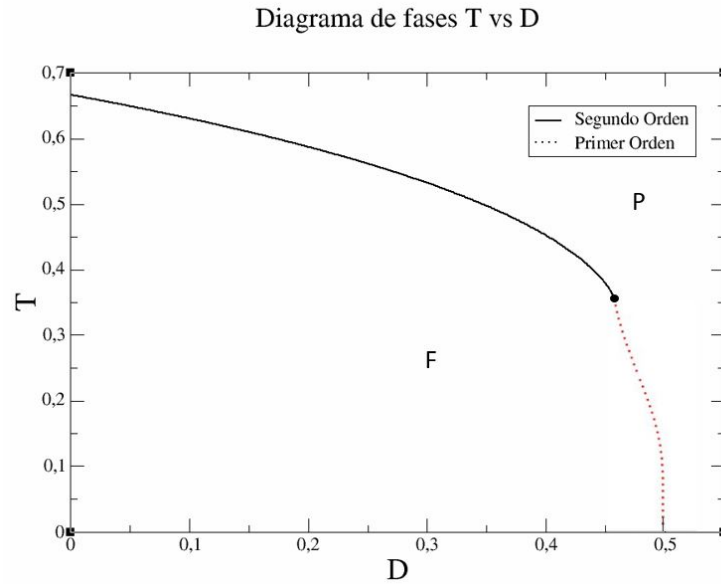


Figura 1.5: Diagrama de fases del modelo Blume-Capel en el plano $T - D$ con aproximación de campo medio. El círculo negro representa el punto tricrítico. Se representa por F y P las fases Ferromagnética y Paramagnética para las cuales la línea consecutiva es una transición de segundo orden y la línea punteada una de primer orden

Este diagrama de fases lo obtenemos minimizando numéricamente la energía

libre usando la ecuación 1.51. Se utiliza un algoritmo para realizar la búsqueda del punto donde la magnetización se vuelve cero. Si sucedió de manera continua, quiere decir que ese punto pertenece a la frontera de segundo orden y si sucedió de forma discontinua, entonces el punto pertenece a la frontera de primer orden.

1.1.5. Método de Monte Carlo en Física Estadística

La idea básica detrás del método de Monte Carlo es simular las fluctuaciones térmicas aleatorias de un sistema, estado a estado en el curso de un experimento.

En un cálculo de Monte Carlo se simula directamente este proceso, creando un sistema modelo en nuestra computadora y haciéndolo pasar a través de una variedad de estados de tal manera que la probabilidad de que se encuentre en un estado particular μ en un momento dado t es igual a el peso $w\mu(t)$ que ese estado tendría en un sistema real[8][9].

Tomamos el ejemplo del modelo de Isign en 2 dimensiones el cual genera una curva característica de magnetización vs temperatura. Debido a que no hay solución exacta en tres dimensiones, es muy útil simular modelos como éste numéricamente. En particular necesitamos calcular promedios como en la ecuación 1.15

A excepción de N muy pequeños, hay muchos estados (2^N) para enumerar, por lo tanto, necesitamos realizar algunas muestras aleatorias. El procedimiento es por lo tanto, para generar estados con la distribución de probabilidad de Boltzman.

El forma correcta de un promedio Monte Carlo es dar pesos iguales a las configuraciones generadas[8][9]

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{N_{meas}} \sum_{l=1}^{N_{meas}} A_l \quad (1.52)$$

Donde N_{meas} es el número de mediciones. El factor de Boltzman de la ecuación

1.15 no se encuentra explícitamente debido a que se encuentra implícito en los estados generados con la probabilidad de Boltzman

Para generar estados con la probabilidad de Boltzman, un procedimiento iterativo es requerido e iniciando desde un estado inicial l_0 , el cual puede no ser un estado con la energía correcta para la temperatura considerada, se generan los estados l_1, l_2, l_3 , etc que eventualmente, luego de un tiempo de equilibrio, se encontraran en el estado correspondiente a la temperatura[8][9].

Imaginemos que el sistema está en estado l con energía E_l en el tiempo t . Seleccionamos un estado m con energía E_m en el tiempo $t + 1$. El estado m difiere del estado l por un "flip" de un espín. El estado en el tiempo $t + 1$ será entonces m con una cierta probabilidad $w_{l \rightarrow m}$ o el sistema se quedará en su estado anterior l . Para iniciar el sistema en un estado inicial l_0 decimos que:

$$P_l(0) = \delta_{l,l_0} \quad (1.53)$$

la cual, en un tiempo lo suficientemente amplio, $P_l(t)$ llega al equilibrio P_l^{eq} :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_l(t) = P_l^{eq} \quad (1.54)$$

Consideramos la probabilidad de cambio de los estados dados en el tiempo. Si $P_l(t)$ es la probabilidad que el sistema este en el estado l en el tiempo t , entonces:

$$P_l(t + 1) - P_l(t) = \sum_{m \neq l} [P_m(t)w_{m \rightarrow l} - P_l(t)w_{l \rightarrow m}] \quad (1.55)$$

Que es conocida como la ecuación maestra. El primer término describe las transiciones en el tiempo $t + 1$ al estado l desde el estado m . Las probabilidades en el tiempo $t + 1$ dependen únicamente de las probabilidades en el tiempo t y no de las probabilidades en tiempos recientes. Esto es llamado un "Proceso de Markov" y la secuencia de configuraciones generadas es llamada "Cadena de

Markov”[8].

Una condición necesaria para la ecuación 1.54 es, que, si la distribución en el tiempo t es el equilibrio, entonces esa distribución debe permanecer en el tiempo $t + 1$. De la ecuación 1.55 se requiere que:

$$\sum_{m \neq l} [P_m^{eq} w_{m \rightarrow l} - P_l^{eq} w_{l \rightarrow m}] = 0 \quad (1.56)$$

Por conveniencia, generalmente requerimos que cada término en la suma desaparezca por separado, lo que lleva a condición de balance detallado

$$\frac{w_{l \rightarrow m}}{w_{m \rightarrow l}} = \frac{P_m^{eq}}{P_l^{eq}} = \exp(-\beta(E_m - E_l)) \quad (1.57)$$

Sin embargo, la condición de equilibrio detallado no determina la w únicamente, solo la relación de w para una transición a eso para la transición inversa.

Una elección común mantiene las probabilidades menores que 1 y satisface el balance detallado, es la probabilidad de actualización de Metrópolis[8][9]:

$$w_{l \rightarrow m} = \begin{cases} \exp(-\beta(E_m - E_l)), & E_m - E_l > 0 \\ 1, & \text{en otros casos} \end{cases} \quad (1.58)$$

En la regla de actualización de Metrópolis, siempre se acepta el movimiento si el sistema gana energía y al mismo tiempo acepta el movimiento con una probabilidad menor a la unidad si esta cuesta energía. Esto significa que existe una mayor probabilidad de que el sistema se encuentre en mas bajas energías, como lo requiere la distribución de Boltzman

Se debe tener en cuenta que, si dos espines interactúan entre ellos, solo uno puede ser actualizado. Las actualizaciones en paralelo son erróneas. Primero se debe testear uno de ellos y actualizarlo si es necesario, el cual cambiara la probabilidad de actualizar el segundo[8].

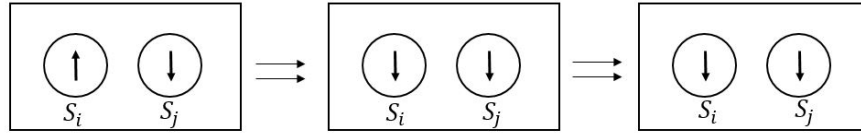


Figura 1.6: Actualización Secuencial (Correcta)

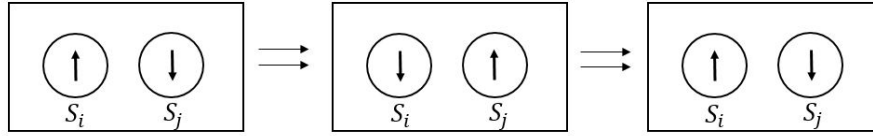


Figura 1.7: Actualización Paralela (Incorrecta)

Si actualizamos de forma secuencial, entonces la primera actualización (del espín 1) pone los espines paralelos. Después actualizando el espín 2, este espín no se actualiza con alta probabilidad, por lo que los espines permanecen paralelos como es deseado. Esto se muestra en la figura 1.6

Por otro lado, la figura 1.7 muestra lo que sucede si actualizamos en forma paralela. Ambos espines calculan que ganaran energía por girar y entonces ambos giran, lo cual los deja en forma antiparalela. A continuación, ambos espines giran en cada movimiento y mantienen la orientación antiparalela lo cual es incorrecto.

Sin embargo, espines que no tienen interacción entre sí, pueden ser actualizados de forma paralela debido a que el espín es independiente a la orientación del otro espín. Esto es explotado en los algoritmos Monte Carlo diseñados para ejecutarse en computadoras paralelizadas.

Si se satisface la condición de balance detallado, en el momento en que el sistema haya alcanzado el equilibrio, se mantendrá en equilibrio. Sin embargo, es necesario también mostrar que el sistema converge en el equilibrio iniciando desde una distribución inicial arbitraria[8].

La convergencia ocurre para un algoritmo que satisface el balance detallado y adicionalmente es ergódico, lo que significa que iniciando desde cualquier estado se puede llegar a otro estado en un número finito de movimientos.

1.1.6. Método de Monte Carlo en el Modelo de Ising

Para simular el modelo de Ising computacionalmente, hacemos uso del algoritmo de Metrópolis expuesto en la ecuación 1.58. Utilizando este algoritmo podemos equilibrar el sistema a una dada temperatura en el ensamble canónico y determinar los valores medios térmicos de ciertos parámetros, tales como la magnetización, susceptibilidad magnética, cumulante de Binder, energía total, calor específico, al ser alcanzado el equilibrio térmico. Debido a que el modelo no tiene solución analítica exacta para dimensiones superiores a 2, la simulación es la mejor opción para estimar con mayor precisión ciertos parámetros del modelo, tal como la temperatura crítica que divide la fase ferromagnética de la paramagnética. Esto se hace con un análisis de escala utilizando el Cumulante de Binder[16].

Además de esto, las simulaciones de Monte Carlo del Modelo de Ising en altas dimensiones se realizan generalmente para probar la capacidad computacional de sistemas de cómputo de alto desempeño[17].

A continuación, se obtendrá el calor específico y la susceptibilidad magnética a ser utilizada en el algoritmo. Iniciamos obteniendo el Hamiltoniano Ising en función de la magnetización

$$E_M = -J \sum_{(ij)} S_i S_j - h \sum_i S_i$$

$$E_M = -J \sum_{(ij)} S_i S_j - hM$$

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_M M \exp(-\beta E_M)}{\sum_M \exp(-\beta E_M)} \quad (1.59)$$

Por otro lado, la susceptibilidad magnética se define como:

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} = \frac{\partial}{\partial h} \left[\frac{\sum_M M \exp(-\beta E_M)}{\sum_M \exp(-\beta E_M)} \right] \\ \chi &= \beta \left(\frac{\sum_M M^2 \exp(-\beta E_M)}{\sum_M \exp(-\beta E_M)} \right) - \beta \frac{(\sum_M M \exp(-\beta E_M))(\sum_M M \exp(-\beta E_M))}{(\sum_M \exp(-\beta E_M))^2} \\ \chi &= \beta \langle M^2 \rangle - \beta \langle M \rangle^2 = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{T}, \quad k_b = 1 \end{aligned} \quad (1.60)$$

Y por último, para hallar el calor específico se siguen los siguientes pasos:

$$C_e = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}, \quad \langle E \rangle = \frac{\sum_E E \exp(-\beta E)}{\sum_E \exp(-\beta E)}$$

Considerando $k_b = 1$

$$\begin{aligned} C_e &= \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} = -\frac{1}{T^2} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} \\ C_e &= \frac{1}{T^2} \left(\frac{\sum_E E^2 \exp(-\beta E)}{\sum_E \exp(-\beta E)} \right) - \frac{1}{T^2} \left(\frac{\sum_E E \exp(-\beta E)}{\sum_E \exp(-\beta E)} \right)^2 = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2} \end{aligned} \quad (1.61)$$

Para implementar el método de Monte Carlo seguimos los siguientes pasos:

1. Seleccionamos un espín y lo giramos con probabilidad dada en la ecuación 1.57. Esto se considera una actualización. La unidad básica de tiempo en el método Monte Carlo es el "sweep", el cual consiste en N actualizaciones, donde N es el número de espines. En este método se realizará un sweep avanzando secuencialmente a través de la red en la cual los espines serán actualizados una vez. Se debe tener en cuenta que "actualizar" no significa "girar". Para actualizar un espín en el sitio i , primero calculamos la energía

ΔE . Esta se encuentra en términos de S_i y de sus vecinos S_j y se expresa como[8]:

$$\Delta E = 2JS_i \sum_j S_j \quad (1.62)$$

Donde la suma es sobre los vecinos de i . Entonces, generamos números aleatorios r con una distribución uniforme entre 0 y 1, y giramos S_i si se cumple la condición:

$$r < \exp(-\beta \Delta E) \quad (1.63)$$

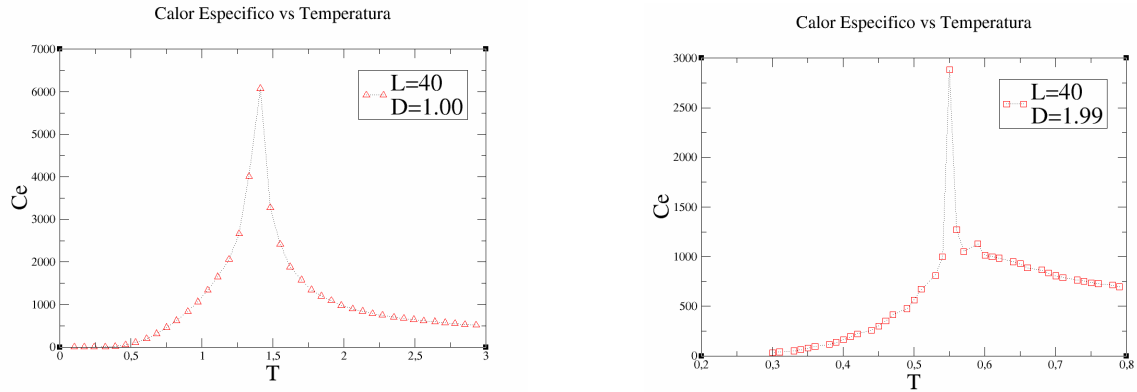
La condición se cumple cuando $\Delta E < 0$

2. Debido a que el sistema no esta inicialmente en equilibrio, se debe realizar sweeps iniciales durante los cuales no se realicen mediciones y así poder equilibrar el sistema (M_i).
3. Ejecutar sweeps durante los cuales se realicen mediciones (M_r). Se puede realizar mediciones (M_m) luego de cada sweep, en tal caso el número de medidas será igual a la cantidad de sweeps realizados desde que se iniciaron las mediciones ($M_m = M_r$) o posiblemente después de n sweeps (n debe ser mayor a 1) y la cantidad de mediciones será igual a $M_m = M_r/n$
4. Al llegar al equilibrio del sistema, se debe recoger los datos obtenidos y realizar los cálculos necesarios para obtener las variables requeridas.

1.1.7. Método de Monte Carlo en el Modelo Blume Capel

A fin de mostrar cómo las características esenciales del diagrama de fases del modelo de Blume Capel se observan incluso hasta dimensión 2, se ha simulado el modelo en la red cuadrada de tamaño $L \times L$, optimizando el tiempo computacional utilizando programación paralela con la librería MPI[18]. Por otro lado, la simulación de este modelo es importante porque presenta dos tipos de transiciones de fase según su constante de anisotropía, lo cual permite obser-

var el diferente comportamiento que presentan sus parámetros en los puntos de frontera de primer y segundo orden.



(a) Gráfico representado para una red de $L = 40$ y un parámetro de anisotropía $D = 1,00$, para lo cual se obtiene el calor específico en función de la temperatura. El punto de mayor calor específico se encuentra en la proximidad de la temperatura crítica de cambio de fase.

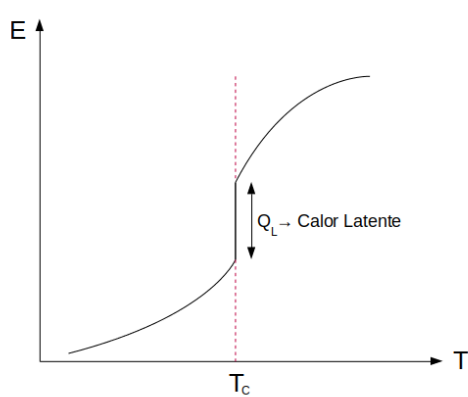
(b) Gráfico representado para una red de $L = 40$ y un parámetro de anisotropía $D = 1,99$. Se puede apreciar un aumento súbito del calor específico en la proximidad de la temperatura crítica. Podemos ubicar según este gráfico la temperatura crítica T_c alrededor de 0,56

Figura 1.8: Representación del calor específico para transiciones de fase de primer y segundo orden

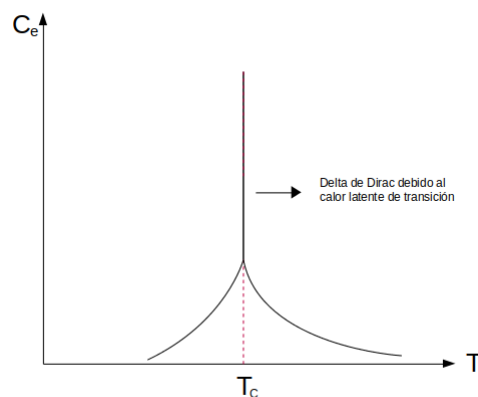
La figura 1.8(a) permite visualizar el comportamiento del calor específico en una transición de fase de segundo orden. El calor específico en una transición de segundo orden diverge en $T = T_c$ por que la energía E tiene un punto de inflexión en $T = T_c$. Sin embargo, en las simulaciones se visualiza un pico en el calor específico debido a un efecto de tamaño finito el cual impide el dibujo completo de la divergencia sin embargo se asegura que en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ la divergencia existe. No hay calor latente en transiciones de segundo orden, porque la energía del Hamiltoniano es continua en $T = T_c$

Según la figura 1.8(b) para una red de $L = 40$ y un parámetro de anisotropía $D = 1,99$ el punto de mayor calor específico se encuentra en la proximidad de la temperatura crítica de cambio de fase. Se puede apreciar un aumento súbito del calor específico que en el límite termodinámico se comporta como una delta de dirac, sin embargo, debido al efecto finito, solo vemos el aumento súbito del mismo el cual indica una transición de fase de primer orden. Podemos ubicar la temperatura crítica T_c alrededor de 0,56

Para explicar el comportamiento de la energía y el calor específico analizamos el gráfico de la energía respecto a la temperatura. La energía se incrementa según la temperatura va aumentando en el sistema. Para una transición de fase de primer orden existe un salto de discontinuidad de energía en el punto de temperatura crítica. El calor específico, al definirse como $\frac{\partial E}{\partial T}$, genera una delta de Dirac en la temperatura crítica, el cual representa al calor latente de transición y se puede observar en las figuras 1.9(a) y 1.9(b)



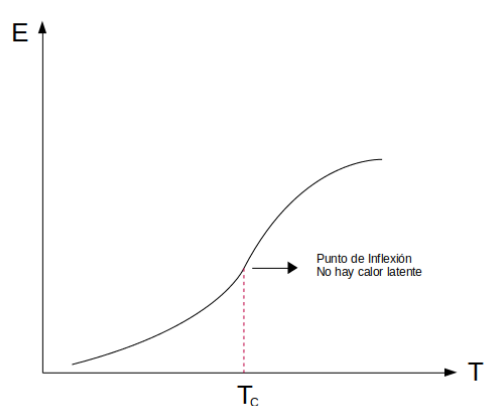
(a) Comportamiento de la energía para una transición de fase de primer orden



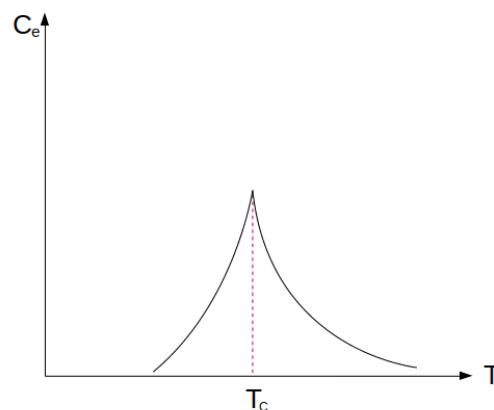
(b) Comportamiento del calor específico para una transición de fase de primer orden

Figura 1.9: Representación teórica de la energía y el calor específico en transición de fase de primer orden

En cambio, para una transición de segundo orden, la energía alcanza un punto de inflexión en la temperatura crítica, lo cual únicamente hace cambiar el comportamiento de la misma. El calor específico en este caso no crea una delta de dirac, a cambio, crea un pico finito el cual se puede observar en las imágenes 1.10(a) y 1.10(b)



(a) Comportamiento de la energía para una transición de fase de primer orden

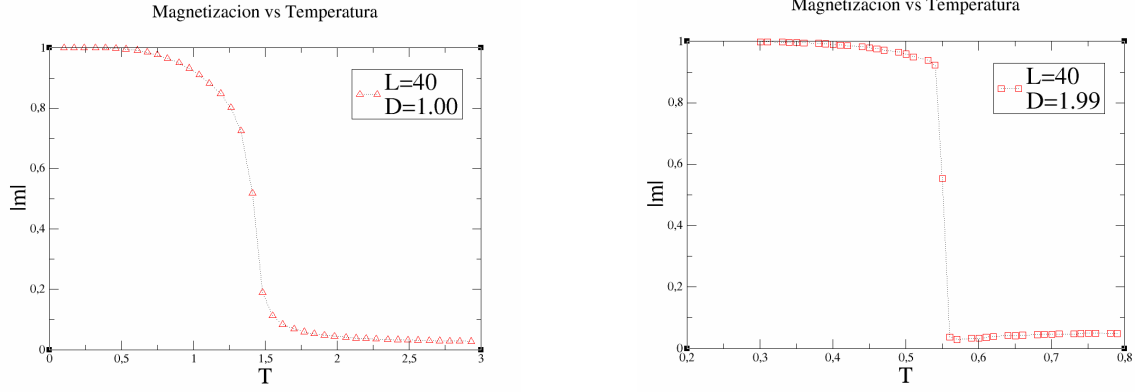


(b) Comportamiento del calor específico para una transición de fase de primer orden

Figura 1.10: Representación teórica de la energía y el calor específico en transición de fase de segundo orden

La magnetización por espín cae suavemente mientras la temperatura aumenta, esto se debe a la transición de segundo orden demostrado en la figura 1.11(a). Por otro lado, en la figura 1.11(b) se observa la discontinuidad cerca de la temperatura crítica de la magnetización por espín, lo cual indica una transición de primer orden y se consigue con el parámetro de anisotropía $D = 1,99$.

Para representar de manera correcta y con mayor precisión la temperatura crítica es necesario recurrir al cumulante de cuarto orden[19][21]. El cumulante de Binder es una cantidad útil en el estudio de puntos críticos y transiciones de fase. Para algunos sistemas con algunos parámetros de orden conocidos, por ejemplo, la magnetización $M = \sum_j \sigma_j$, el cumulante de Binder representa una versión modificada del cumulante de cuarto orden del parámetro. La utilidad del cumulante de Binder surge de las características especiales de su dependencia del tamaño del sistema. El comportamiento del cumulante de Binder en un



(a) Gráfico representado para una red de $L = 40$ y un parámetro de anisotropía $D = 1,00$. La magnetización por espín cae suavemente asintóticamente hacia 0 mientras la temperatura aumenta. La zona de inicio de descenso en la magnetización por espín es la que contiene la transición de fase, la cual se encuentra también en las cercanías de la temperatura crítica.

(b) Gráfico representado para una red de $L = 40$ y un parámetro de anisotropía $D = 1,99$. La magnetización por espín cae súbitamente a las proximidades de 0 mientras la temperatura aumenta. La zona de inicio de descenso en la magnetización por espín es la que contiene la transición de fase, la cual se encuentra también en las cercanías de la temperatura crítica.

Figura 1.11: Representación de la magnetización por espín para las transiciones de fase de primer y segundo orden

punto crítico depende débilmente del tamaño del sistema, y en otros casos, su comportamiento con respecto al tamaño del sistema difiere según la fase. Por ejemplo, debajo del punto crítico en una fase magnética de rotura de simetría, el cumulante aumentará con el tamaño del sistema, pero por encima del punto crítico, con la simetría ininterrumpida, en cambio, disminuye. El resultado es que, cuando las curvas del cumulante de Binder frente a la temperatura se grafican para varios tamaños, el punto crítico se indica mediante un cruce entre ellas. Típicamente, debido a que el comportamiento en el punto crítico es aproximadamente universal, es necesario considerar sólo un conjunto de sistemas de tamaño relativamente pequeño, eliminando la necesidad de extrapolaciones complicadas de grandes sistemas hasta el límite termodinámico. Definimos un cumulante de una cantidad x de la siguiente manera:

$$\langle \exp(x) \rangle = 1 + \langle x \rangle + \frac{1}{2} \langle x^2 \rangle + \frac{1}{6} \langle x^3 \rangle + \frac{1}{24} \langle x^4 \rangle \dots \quad (1.64)$$

Si mantenemos los términos hasta el 4to orden, el logaritmo de esta expansión puede escribirse como:

$$\ln\{\langle \exp(x) \rangle\} = \langle x \rangle + \frac{1}{2}Q_2 + \frac{1}{6}Q_3 + \frac{1}{24}Q_4 \dots \quad (1.65)$$

Donde los cumulantes están dados por:

$$Q_2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (1.66)$$

$$Q_3 = \langle x^3 \rangle - 3\langle x \rangle \langle x^2 \rangle + 2\langle x \rangle^3 \quad (1.67)$$

$$Q_4 = \langle x^4 \rangle - 3\langle x^2 \rangle^2 - 4\langle x \rangle \langle x^3 \rangle + 12\langle x \rangle^2 \langle x^2 \rangle - 6\langle x \rangle^4 \quad (1.68)$$

Estos se pueden escribir en una forma mas compacta:

$$Q_2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \quad (1.69)$$

$$Q_3 = \langle (x - \langle x \rangle)^3 \rangle \quad (1.70)$$

$$Q_4 = \langle (x - \langle x \rangle)^4 \rangle - \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle^2 \quad (1.71)$$

También el cumulante de cuarto orden Q_4 se escribe de la siguiente manera:

$$V_x(L) = 1 - \frac{\langle (x - \langle x \rangle_L)^4 \rangle_L}{3\langle (x - \langle x \rangle_L)^2 \rangle_L^2} \quad (1.72)$$

La fase ordenada es caracterizada por magnetizaciones simétricas, $+m_0$ y $-m_0$ con la misma energía. En general, tenemos $\langle \mathcal{H} \rangle_L \neq 0$ y $\langle \mathcal{H}^n \rangle_L \neq 0$ para todo n .

$$V_E(L) = 1 - \frac{\langle (\mathcal{H} - \langle \mathcal{H} \rangle_L)^4 \rangle_L}{3\langle (\mathcal{H} - \langle \mathcal{H} \rangle_L)^2 \rangle_L^2} \quad (1.73)$$

Donde L es el tamaño lineal de la red. Como la magnetización es simétrica, esto es: $\langle m^n \rangle_L = 0$ para n par, el cumulante de cuarto orden de la magnetización esta dado por:

$$V_m(L) = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2} \quad (1.74)$$

Se debe tener en cuenta que, como $\langle E^n \rangle_L \neq 0$ para todo n , incluyendo

valores pares de n y $\langle m^n \rangle_L = 0$ para valores pares de n , la energía y la magnetización dan inicio a expresiones distintas del cumulante de cuarto orden[7].

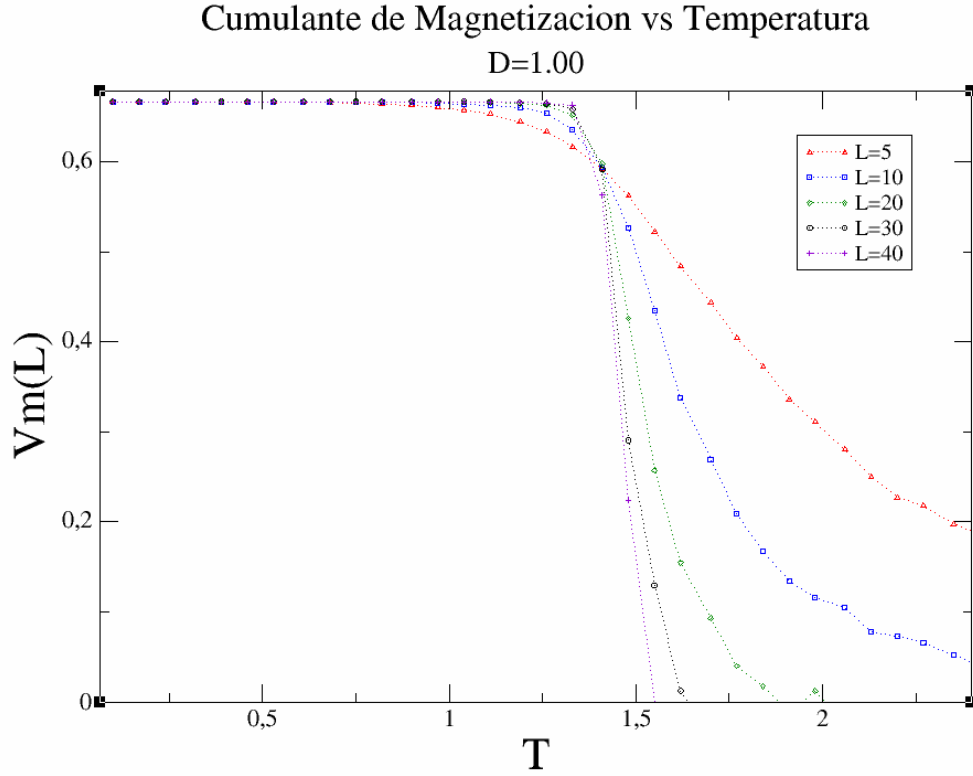


Figura 1.12: Gráfico representado para varios tamaños de la red ($L = 5, 10, 20, 30, 40$). El Cumulante de Magnetización (V_m) inicia una caída suavizada para cada tamaño de red.

El cumulante de magnetización presentado en la figura 1.12 nos permite encontrar la temperatura crítica en la intersección para todos los tamaños de L . Podemos encontrar que la temperatura crítica para $D = 1,00$ es aproximadamente $T_c = 1,49$, por lo tanto, para este valor de D concluimos en que existirá una transición de fase de segundo orden al aproximarse a la temperatura crítica obtenida anteriormente.

1.2. Vidrios de Espín y Modelo de Edwards-Anderson en dimensión infinita

1.2.1. Desorden Templado

Un sistema presenta desorden templado cuando un determinado número de parámetros que entran en definición son aleatorios, pero su valor está fijo durante el proceso de observación[15].

El desorden templado puede existir en materiales magnéticos reales debido a distintas razones, por ejemplo, a la naturaleza oscilante de las interacciones espín-espín combinadas con la aleatoriedad en las posiciones de los espines interactuantes (como en una aleación metálica de vidrios de espín AgMn) o debido a defectos en la estructura de la red, presencia de impurezas, etc.

El principal problema al trabajar con sistemas desordenados es que el desorden estudiado actualmente es templado. Formalmente, todos los resultados de las cantidades observables para un sistema dado deben depender de la matriz de interacción J_{ij} , es decir, los resultados son definidos por un número macroscópico de parámetros aleatorios. Aparentemente los resultados de este tipo son imposibles de calcular y por lo tanto, son inútiles. Por lo tanto, las cantidades a llamadas observables deben depender de características promedios generales de interacciones aleatorias, lo que nos lleva al concepto de autopromedio.

1.2.2. Autopromedio

La especulación tradicional acerca de por qué debería esperarse que se produzca el fenómeno de autopromedio es la siguiente. Se sabe que la energía libre de un sistema es proporcional al volumen V del mismo. Por lo tanto, en el límite termodinámico $V \rightarrow \infty$ la principal contribución a la energía libre proviene del

volumen, y no del límite, que suele producir efectos de los siguientes órdenes en el pequeño parámetro $1/V$. Cualquier sistema macroscópico puede ser dividido en un número macroscópico de subsistemas macroscópicos. Entonces la energía libre total del sistema consistiría en la suma de las energías libres de los subsistemas mas la contribución proveniente de las interacciones de los subsistemas en sus contornos. Si todas las interacciones en el sistema son de rango pequeño (lo que sería cierto en un sistema realista), las contribuciones de las interacciones mutuas de los subsistemas serán únicamente los efectos de contorno, los que desaparecerían en el límite termodinámico. Por lo tanto, la energía libre total puede ser representada como una suma del número macroscópico de términos. Cada uno de estos términos es una cantidad templada aleatoria porque contiene, como parámetros, los elementos de la matriz de interacción espín-espín.

De acuerdo a la ley de los grandes números, la suma de varias cantidades aleatorias pueden ser representados como su valor promedio obtenido de su distribución estadística. Por lo tanto, la energía libre total de un sistema macroscópico debe ser autopromediada sobre las realizaciones de interacciones aleatorias de acuerdo con su distribución estadística.

1.2.3. Método de réplicas

La energía libre se calcula mediante el logaritmo de la función de partición, por lo tanto, para calcular la observable termodinámica, se tiene que promediar el logaritmo de la función de partición sobre la distribución dada de J_{ij} s aleatorios después de calcular sobre sí mismo la función de partición.

Formalmente las réplicas[10] se describen de la siguiente manera. Para obtener la energía libre física (autopromediada) de un sistema aleatorio templado, tenemos que promediar el logaritmo de la función de partición:

$$F \equiv \overline{F_J} = -\frac{1}{\beta} \overline{\ln(Z_J)} \quad (1.75)$$

Donde $\overline{(\dots)}$ denota el promedio sobre las interacciones aleatorias J_{ij} con una función de distribución $P[J]$ dada:

$$\overline{(\dots)} \equiv \left(\prod_{\langle i,j \rangle} \int dJ_{ij} \right) P[J](\dots) \quad (1.76)$$

y la función de partición es:

$$Z_J = \sum_{\sigma} \exp(-\beta H[J, \sigma]) \quad (1.77)$$

Para ejecutar este procedimiento de promediado, se inventó el siguiente "truco". Consideremos la potencia entera n de la función de partición dada en 1.77. Esta cantidad es la función de partición del n réplicas idénticas no interactuantes del sistema original (es decir, acoplamientos idénticos fijos J_{ij}):

$$Z_J^n = \left(\prod_{a=1}^n \sum_{\sigma^a} \right) \exp \left(-\beta \sum_{a=1}^n H[J, \sigma_a] \right) \quad (1.78)$$

Aquí, el término a etiqueta a las réplicas. Introducimos la siguiente cantidad:

$$F_n = -\frac{1}{\beta n} \ln(Z_n) \quad (1.79)$$

donde

$$Z_n \equiv \overline{Z_J^n} \quad (1.80)$$

Ahora, si se toma un límite formal $n \rightarrow 0$ en la expresión 1.79 la expresión física de la energía libre 1.75 es obtenida:

$$\lim_{n \rightarrow 0} F_n = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln(Z_n) = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln \left[\overline{\exp(n \ln Z_J)} \right] = -\frac{1}{\beta} \overline{\ln Z_J} = F \quad (1.81)$$

Por lo tanto, el esquema para el método de réplicas puede ser descrito en los siguientes pasos:

1. La cantidad F_n para el entero n debe ser calculado
2. La continuación analítica de la función obtenida del parámetro n debe realizarse para un n no entero arbitrario
3. Se debe tomar el límite $n \rightarrow 0$

Si la energía libre parece ser una función analítica de la temperatura y los demás parámetros (de modo que pueda representarse como la serie en potencias de β), entonces se puede probar fácilmente que el método de réplica es correcto en un sentido estricto. En todos los casos, cuando los cálculos pueden realizarse mediante algún otro método, se confirman los resultados del método de réplica.

1.2.4. Física del estado vidrio de espín

Antes de realizar cálculos detallados se introducirá un entendimiento cualitativo del fenómeno físico general que toma lugar en la mecánica estadística de los vidrios de espín con desorden templado fuerte.

Frustraciones

Debido a la amplia cantidad de modelos estadísticos de vidrios de espín, solo revisaremos el modelo mas simple, el cual está formulado en términos de espines clásicos de Ising, descritos por el siguiente Hamiltoniano:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (1.82)$$

Este sistema consiste en N espines Ising $\sigma_i (i = 1, 2, \dots, N)$, tomando valores ± 1 los cuales están localizados en los vértices de la red. Las interacciones espín - espín J_{ij} son aleatorias en valores y signos. Las propiedades de cada sistema son definidos por una función de distribución estadística $P[J_{ij}]$, cuya forma no

es importante por el momento.

El fenómeno revelado por un desorden templado fuerte[10][11], el cual a los sistemas difíciles de estudiar, son como siguen. Consideramos un sistema de tres espines interactuantes. Asumimos por simplicidad que las interacciones entre ellos pueden ser diferentes solo en sus signos, siendo iguales en valores absolutos. Por lo tanto, para el estado fundamental de cada sistema podemos encontrar dos diferentes situaciones.

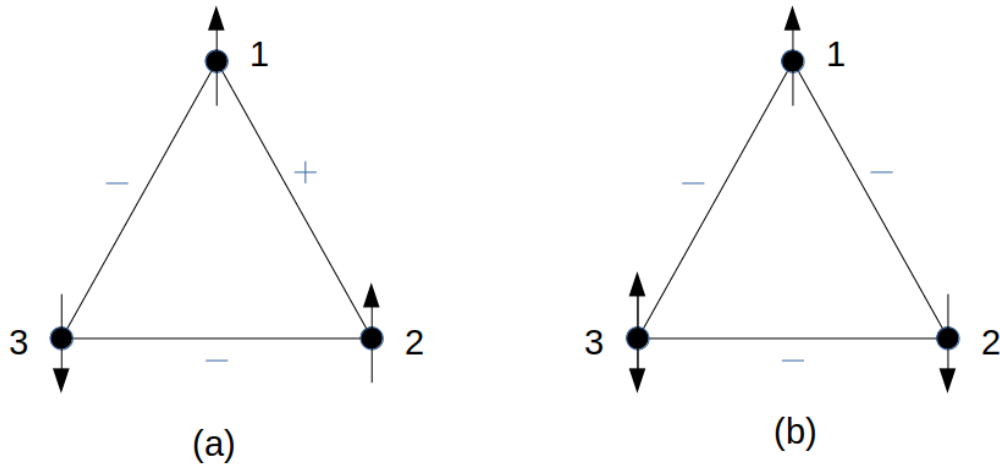


Figura 1.13: Frustraciones en el sistema de tres espines. (a) Sin frustración: El producto de las interacciones a lo largo del triángulo es positivo (b) Triángulo frustrado: el producto de las interacciones a lo largo del triángulo es negativo

Si las tres interacciones J_{12} , J_{23} y J_{13} mostradas en la figura 1.13 son positivas, o dos de ellos son negativos mientras que el tercero es positivo, entonces el estado fundamental de este sistema de tres espines es único (excepto por el cambio global de signos de todos los espines). Este es el caso cuando el producto de las interacciones a lo largo del triángulo es positivo.

Por otro lado, si el producto de las interacciones a lo largo del triángulo es negativo (una de las interacciones es negativa, o las tres interacciones son negativas)

el estado fundamental del sistema es degenerado. Se puede ver fácilmente, de espín en espín a lo largo del triángulo, que en este caso la orientación (+ o -) de uno de los espines se mantiene "insatisfecho" respecto a las interacciones con sus vecinos.

También se puede comprobar fácilmente que un fenómeno similar tiene lugar en cualquier cadena de espín cerrada de longitud arbitraria, siempre que el producto de las interacciones espín-espín a lo largo de la cadena sea negativo. Este fenómeno se llama frustración[10][11][12].

Se puede apreciar que no todos los desórdenes inducen frustraciones. Por otro lado, las frustraciones describen la parte relevante del desorden, que pueden afectar las propiedades del estado fundamental del sistema. En otras palabras, si el desorden no produce frustraciones, se puede considerar como irrelevante. En algunos casos los desórdenes irrelevantes simplemente se eliminan por redefinición de las variables de espín del sistema.

Quiebre de Ergodicidad

Formalmente de acuerdo a los argumentos de autopromedio, para derivar una observable termodinámica de un sistema de espines desordenados, se tiene que encontrar la forma de promediar el logaritmo de la función de partición sobre los parámetros aleatorios J_{ij} simultáneamente con el cálculo de la función de partición. Está claro que este problema no es fácil, pero podemos tomarlo como un problema técnico.

Todo sería simple si la energía libre en el límite termodinámico fuera una función analítica de la temperatura y otros parámetros. Actualmente, para la mayoría de sistemas no triviales de interés en la mecánica estadística, no lo son. Debido a la rotura espontánea de alguna simetría en el límite termodinámico,

existe una transición de fase y esto transforma a la energía libre en una función no analítica de los parámetros involucrados.

Consideremos nuevamente el modelo de Ising Ferromagnético, el cual en términos muy simples ilustra las consecuencias físicas de este fenómeno. Debido a que el hamiltoniano de este sistema es invariante respecto al cambio global de signos de todos los espines, cualquier cantidad termodinámica que sea impar en espines debe ser igual a cero. En particular esto debe ser cierto para la cantidad que describe la magnetización global del sistema. Si el volumen N del sistema es finito, estos argumentos son perfectamente correctos. Por otro lado, en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ nos enfrentamos a otra situación no trivial. De acuerdo a cálculos simples, la energía libre como una función de la magnetización global adquiere la forma de doble pozo a temperaturas bajas como se muestra en la figura 1.14. El valor de la energía de la barrera que separa los dos estados fundamentales es proporcional al volumen del sistema y se vuelve infinito en el límite $N \rightarrow \infty$. En otras palabras, a temperaturas bajo T_c el espacio de todos los estados microscópicos del sistema están divididos en dos valles iguales separados por la barrera infinita.

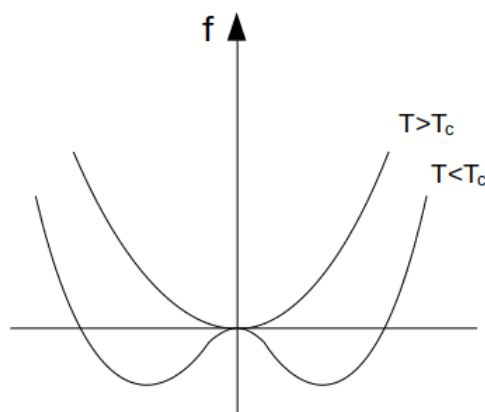


Figura 1.14: Energía libre de un sistema Ising Ferromagnético con campo magnético externo igual a cero

Por otro lado, de acuerdo a la hipótesis ergódica[10][12] de la mecánica estadística, se asume que en el límite de tiempo de observación infinita, el sistema visita todos sus estados microscópicos varias veces y se asume que es posible aplicar la aproximación de la mecánica estadística: para el cálculo de cantidades promediadas usamos el promedio sobre el ensamble de estados que corresponden con la distribución de probabilidad en lugar de sobre todo el tiempo. En la situación en consideración, cuando se toma el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ antes de que el tiempo de observación llegue al infinito (es este orden de un sistema macroscópico), lo asumido anteriormente no funciona.

Cualquiera sea la dinámica interna del sistema, nunca puede ser posible saltar sobre barreras de energía infinitas separando dos valles del espacio entre estados. Por otro lado, en las observables termodinámicas, solo la mitad de los estados contribuyen (estos son los estados que están en un lado de la barrera), y esta es la razón de que, en la observable termodinámica, la magnetización global del sistema parezca no ser diferente de cero.

En términos de la mecánica estadística, este fenómeno es llamado rotura de ergodicidad y se manifiesta así misma como una rotura espontánea de simetría: debajo de T_c la observable termodinámica se vuelve no simétrica con respecto al cambio global de signos de todos los espines. Como consecuencia, en los cálculos de función de partición bajo T_c , se debe tomar en cuenta solo la mitad de todos los estados microscópicos del sistema (los estados que pertenecen a un valle).

Secuencia continua de transiciones de fase

La existencia de varios estados mínimos locales en el espín frustrado no significa que automáticamente a bajas temperaturas estos estados creen valles separados por barreras infinitas de energía libre[10]. Debido a las fluctuaciones térmicas que son muy fuertes en sistemas de bajas dimensiones, las barreras de energía

pueden fusionarse y en este caso, el estado fundamental de la energía libre puede parecer única. por lo tanto, no habrá rotura espontánea de simetría y en alguna temperatura finita el sistema estará en un estado paramagnético "simétrico".

También podría suceder que debido a algunas propiedades de simetría, el mínimo global de la energía libre de una muestra dada se logre a bajas temperaturas en alguna configuración de espín no trivial única (por supuesto, en este caso el estado de espín "contraparte" que difiere por el cambio global de los signos de los espines también debe ser el estado fundamental).

Esto significa que a una temperatura suficientemente baja (debajo de una temperatura crítica de transición de fase T_c), el sistema debe 'congelarse' en este único estado aleatorio de espines el cual se caracterizará por valores diferentes de cero del promedio térmico de las magnetizaciones locales del espín en cada posición $\langle \sigma_i \rangle$. Ya que este estado fundamental es aleatorio, los valores de las magnetizaciones locales $\langle \sigma_i \rangle$ tendrán fluctuaciones de valores y signos de posición en posición de modo que el parámetro usual de orden ferromagnético que describe la magnetización global del sistema, $m = 1/N \sum_i \langle \sigma_i \rangle$, debe ser cero (en el límite de volumen infinito). Por otro lado, este estado puede ser caracterizado por otro parámetro de orden termodinámico (usualmente llamado el parámetro de orden de Edwards-Anderson):

$$q = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i \rangle^2 \neq 0 \quad (1.83)$$

De acuerdo a la teoría de campo medio de los vidrios de espín, la rotura espontánea de simetría en un estado vidrio de espín se encuentra no solo en una temperatura crítica T_c sino que también ocurre en cualquier temperaturas bajo T_c . Según la figura 1.15, bajo T_c una secuencia continua de transiciones de fase toma lugar y la energía libre parece no ser analítica en cualquier temperaturas bajo T_c .

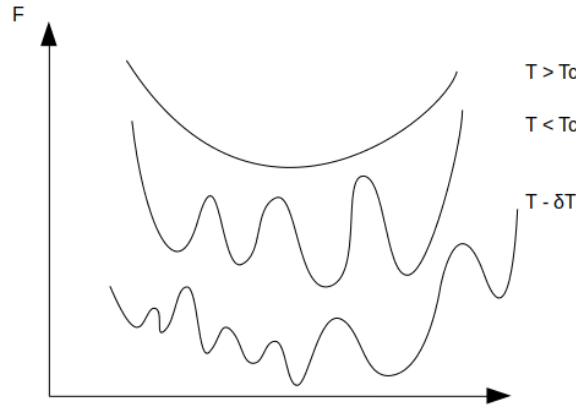


Figura 1.15: Estructura cualitativa de la energía libre de los vidrios de espín a diferentes temperaturas

En términos cualitativos generales este fenómeno puede ser descrito de la siguiente manera. Debajo de una temperatura crítica T_c , el espacio de los estados del espín es dividido en varios valles (el número diverge en el límite termodinámico), separado por barreras infinitas de energía libre. En la temperatura $T = T_c - \delta T$ cada valle se caracteriza por tener valores diferentes de cero en el promedio local de magnetizaciones de espín $\langle \sigma_i \rangle_{\langle \alpha \rangle}$ el cual fluctúa en signo y magnitud de sitio en sitio. Aquí $\langle \dots \rangle$ denota el promedio térmico dentro de un valle particular α . El parámetro de orden, que describe el grado de congelamiento del sistema dentro de los valles, puede ser definido como:

$$q(T) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i \rangle_{\langle \alpha \rangle}^2 \quad (1.84)$$

De acuerdo a la teoría de campo medio de vidrios de espín, el valor de q depende solo de la temperatura y parece ser el mismo para todos los valles, por lo tanto, cuando $T \rightarrow T_c$, $q(T) \rightarrow 0$.

A una mayor disminución de la temperatura aparecen nuevas transiciones de fase debido a la rotura de ergodicidad y por lo tanto, cada valle se divide en varios nuevos separados por barreras infinitas de energía libre. El estado del sistema en todos los nuevos valles puede ser caracterizado por el parámetro de orden (1.84) y su valor crece mientras que la temperatura disminuye.

Parámetro de Orden

Consideremos los siguientes experimentos imaginarios. Fijamos un estado arbitrario del espín y a una temperatura dada T bajo T_c dejamos que el sistema entre en equilibrio térmico. Para cada experimento se toma un estado del espín aleatorio al inicio. Entonces cada experimento se caracterizará por algunos valores en equilibrio del promedio local de magnetizaciones de espín $\langle \sigma_i \rangle_{\langle \alpha \rangle}$, donde α denota el número de experimento. Debido a que existe un gran número de valles en el espacio de fases en el que el sistema puede quedar atrapado, estas magnetizaciones en general pueden ser diferente para cada experimento.

Luego, podemos introducir la cantidad que describiría en qué medida los estados que se han obtenido en diferentes experimentos están cerca unos de otros:

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i^N \langle \sigma_i \rangle_{\langle \alpha \rangle} \langle \sigma_i \rangle_{\langle \beta \rangle} \quad (1.85)$$

Queda claro que $|q_{\alpha\beta}| \leq 1$ y que el máximo valor de $q_{\alpha\beta}$ es obtenido cuando los dos estados en los experimentos α y β coinciden (en este caso, la superposición (1.85) coincide con (1.84) que fue introducida solo para un valle). También está claro que cuanto menos correlacionados están los dos estados diferentes, menor es el valor de la superposición (1.85) que tienen. Si los dos estados no son correlacionados, entonces su superposición en el límite termodinámico es igual a cero. En conclusión, la superposición $q_{\alpha\beta}$ define el tipo de métrica en el espacio de estados (la cantidad $q_{\alpha\beta}^{-1}$ puede ser condicionalmente llamada "distancia" en el espacio de estados)

Para describir las propiedades estadísticas de estas superposiciones, podemos introducir la siguiente función de distribución de probabilidad:

$$P(q) = \sum_{\alpha\beta} \delta(q_{\alpha\beta} - q) \quad (1.86)$$

Parece que es en términos de esta función de distribución $P(q)$ que el estado de vidrio de espín parece esencialmente diferente de cualquier otro estado termodinámico "ordinario".

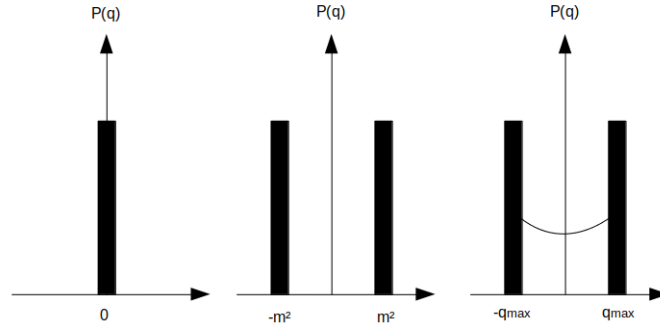


Figura 1.16: Función de distribución de probabilidad $P(q)$ (de izquierda a derecha): En fase paramagnética, en fase ferromagnética, en fase vidrio de espín

Posibles tipos de función $P(q)$ están mostrados en la figura 1.16. La fase paramagnética se encuentra caracterizada por un único mínimo global de la energía libre, en la que en todos los sitios la magnetización es igual a cero. Por lo tanto, la función de distribución $P(q)$ en esta fase es una función delta en $q = 0$. En la fase ferromagnética existen dos mínimos de energía libre con magnetizaciones por sitio $\pm m$. De este modo, la función de distribución $P(q)$ solo contiene dos picos delta en $q = \pm m^2$.

De acuerdo a la teoría de campo medio de los vidrios de espín, la distribución de función $P(q)$ se ve diferente. Aquí, entre los dos picos delta en $q = \pm q_{max}(T)$ hay una curva continua. El valor de $q_{max}(T)$ es igual a la superposición máxima entre dos estados fundamentales, los que se autosuperponen. Debido a que el número de valles en el sistema es macroscópicamente grande y sus autosuperposiciones son todas iguales, la función $P(q)$ tiene dos picos delta en $q = \pm q_{max}(T)$. La existencia de una curva continua en el intervalo $(0, \pm q_{max}(T))$ es una consecuencia directa del origen de los estados involucrados de los espines debido a que aparecen como el resultado de un proceso continuo de fragmentación de los valles en unos más y más pequeños los mismos que forman un tipo de jerarquía que es necesariamente correlativa. por lo tanto, la función de distribución

$P(q)$ puede ser considerado como el parámetro de orden físico adecuado para describir las peculiaridades de la fase de vidrio de espín

Ultrametricidad

Como ya se dijo anteriormente, los estados vidrio de espín están organizados en un tipo de estructura jerárquica. Se puede probar que este sofisticado espacio de estados puede ser descrito en términos de cantidades termodinámicas bien definidas.

Introduciremos una función de distribución $P(q_1, q_2, q_3)$ más complicada, la cual permite a la probabilidad de tres estados vidrio de espín arbitrarios tener superposiciones iguales a q_1 , q_2 y q_3 :

$$P(q_1, q_2, q_3) = \sum_{\alpha\beta\gamma} \delta(q_{\alpha\beta} - q_1) \delta(q_{\alpha\gamma} - q_2) \delta(q_{\beta\gamma} - q_3) \quad (1.87)$$

Se puede mostrar que la función $P(q_1, q_2, q_3)$ no es igual a cero solo si al menos dos de las tres superposiciones son iguales unas con otras y su valor no es mayor que la tercera. En otras palabras, la función $P(q_1, q_2, q_3)$ no es cero solo en los siguientes tres casos: $q_1 = q_2 \leq q_3$; $q_1 = q_3 \leq q_2$; $q_3 = q_2 \leq q_1$. En todos los otros casos, la función $P(q_1, q_2, q_3)$ es igual a cero. Esto significa que en el espacio de estados vidrios de espín, no existen triángulos con todos los tres lados diferentes. Los espacios que tienen las propiedades métricas mencionadas en la parte anterior son llamadas ultramétricas.

La ilustración más simple de una estructura ultramétrica se puede realizar en términos del árbol jerárquico de la figura 1.17. Aquí el espacio de estados vidrios de espín son identificados en el conjunto de puntos finales del árbol. La métrica en este espacio es definida de modo que la superposición (la distancia) entre cualquiera de dos estados depende solo del número de generaciones en su ancestro más cercano en el árbol (cuando el número de generaciones incrementa, el valor de las superposiciones disminuye). Se puede verificar fácilmente que un espacio con estas métricas es ultramétrico.

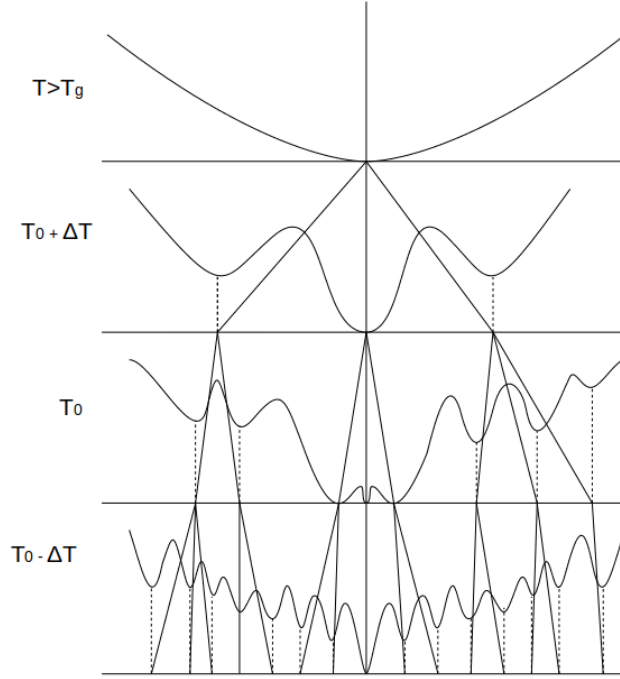


Figura 1.17: El árbol jerárquico de los estados vidrios de espín

En la teoría de campo medio de los vidrios de espín, un árbol ilustrativo de estados actualmente describe la fragmentación jerárquica del espacio de estados vidrios de espín en valles. Si para el eje vertical en la figura 1.17 asignamos un valor discreto de superposiciones q , entonces el conjunto de estados vidrios de espín en todas las temperaturas dadas $T < T_c$ puede ser obtenido en la sección de cruce del árbol al nivel $q = q_{max}(T)$. Después de disminuir la temperatura a un valor nuevo $T' < T$, cada uno de los estados al nivel $q_{max}(T)$ da vida a numerosos descendientes, los que son puntos finales del árbol al nuevo nivel $q_{max}(T') > q_{max}(T)$. Después de incrementar la temperatura a un valor mayor $T'' > T$, todos los estados que tienen ancestros comunes al nivel $q_{max}(T'') < q_{max}(T)$ se unen en un solo estado. Si $T \rightarrow T_c$, $q_{max}(T) \rightarrow 0$, el cual es el nivel del 'gran ancestro' (paramagnético) de todos los estados vidrios de espín.

Debido a que la función $q_{max}(T)$ es determinada por la temperatura, significa que esta es la temperatura que define el nivel de el árbol al cual la sección de

cruce horizontal debe ser hecha y revela todos los estados vidrios de espín a esta temperatura. Todos los estados que están bajo este nivel son indistinguibles, mientras todos los estados sobre este nivel forman la 'evolución histórica' de los estados vidrios de espín a una temperatura dada.

1.2.5. Teoría de Campo Medio de los Vidrios de Espín

Modelo de Interacción de Rango Infinito

El modelo de Sherrington y Kirkpatrick (SK) de los vidrios de espín [13] es definido por el siguiente hamiltoniano de espines Ising:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (1.88)$$

donde la interacción espín-espín J_{ij} son variables templadas aleatorias que son descritas por una distribución gaussiana simétrica independiente por cada par de sitios (i,j):

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}J} \exp\left(-\frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2}\right) \quad (1.89)$$

De acuerdo a la definición anterior, cada espín interactúa con todos los otros espines del sistema. por esta razón la estructura del espacio (dimensionalidad, tipo de red, etc) de este modelo es irrelevante. El espacio aquí es solo el conjunto de N sitios en el cual los espines Ising son colocados y todos estos espines pueden ser considerados vecinos cercanos. En el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ una estructura puede ser interpretado como una red de dimensiones infinitas y es esta propiedad la que hace que la aproximación de campo medio sea exacta.

De acuerdo a la distribución de probabilidad obtenemos:

$$J_0 = \overline{J_0}/N; \quad J = \overline{J}/N^{1/2} \quad (1.90)$$

Se puede verificar que debido a la normalización de orden $1/N$ elegida para el

promedio de los cuadrados de los valores de los acoples J_{ij} , el promedio de la energía del sistema aparenta ser del orden de N , como debería ser para un sistema físico definido. Está claro que la estructura microscópica del modelo definido arriba no es completamente física. Este modelo tiene dos grandes ventajas: Primero, tiene solución exacta y segundo, la solución parece ser no trivial. Por otro lado, en un nivel cualitativo, la interpretación física de esta solución puede ser generalizada para sistemas físicos aleatorios 'normales'. Si fueran descubiertos (por ejemplo en un experimento), los vidrios de espín reales demostrarían propiedades físicas predichas por la solución del modelo SK.

Solución de Simetría de Réplicas

Siguiendo el procedimiento habitual, calculamos la energía libre media. (El promedio de la energía libre y no la función de partición corresponde a tratar un sistema "templado" en lugar de uno "recocido").

Usamos la identidad

$$\ln x = \lim_{n \rightarrow 0} (x^n - 1)/n \quad (1.91)$$

Denotamos la función de partición como sigue:

$$Z_J = \text{Tr} \left\{ \exp \left(\sum_{i \neq j} \frac{\beta J_{ij} S_i S_j}{2} \right) \right\} \quad (1.92)$$

Usando la definición de energía libre y aplicando el promedio templado sobre los J s aleatorios obtenemos:

$$\langle F_J \rangle_J = \frac{\langle \ln(Z_J) \rangle_J}{\beta} \quad (1.93)$$

Usando la identidad 1.91 en 1.93

$$\langle \ln(Z_J) \rangle = \frac{\langle Z_J^n \rangle_J - 1}{n} \quad (1.94)$$

Donde n es el número de la réplica. Llamamos réplica a una copia del sistema con mismas características y no necesariamente los mismos valores de espines. Denotamos la función de partición para la réplica α de la siguiente manera:

$$Z_J^n = Z_{J,1} Z_{J,2} \dots Z_{J,n} = Tr_n \left\{ \exp \left(\sum_{\alpha=1}^n \sum_{i \neq j} \frac{\beta J_{ij} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha}}{2} \right) \right\} \quad (1.95)$$

Para obtener el valor medio se debe integrar alrededor de todos los J_{ij} s aleatorios de la siguiente manera:

$$\langle Z_J^n \rangle_J = \int \prod_{ij} [P(J_{ij}) dJ_{ij}] tr_n \left\{ \exp \left(\sum_{\alpha=1}^n \sum_{i \neq j} \frac{\beta J_{ij} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha}}{2} \right) \right\} \quad (1.96)$$

Reemplazando $P(J_{ij})$:

$$\langle Z_J^n \rangle_J = \int \prod_{ij} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}J} \exp \left(\frac{-(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2} \right) dJ_{ij} \right] tr_n \left\{ \exp \left(\sum_{\alpha=1}^n \sum_{i \neq j} \frac{\beta J_{ij} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha}}{2} \right) \right\}$$

$$\langle Z_J^n \rangle_J = \int \prod_{i \neq j} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}J} \exp \left(\frac{-(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2} \right) dJ_{ij} \right] tr_n \left\{ \prod_{i \neq j} \exp \left(\sum_{\alpha=1}^n \beta J_{ij} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} \right) \right\}$$

$$\langle Z_J^n \rangle_J = \int \prod_{i \neq j} tr_n \left\{ \exp \left(\sum_{\alpha=1}^n \beta J_{ij} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} - \frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}J} dJ_{ij} \right\} \quad (1.97)$$

Usando la siguiente identidad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-a(x - x_0)^2 + bx) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a} + bx_0\right) \quad (1.98)$$

Donde:

$$a = \frac{1}{2J^2} \quad b = \beta \sum_{\alpha}^n (S_{i,\alpha} S_{j,\alpha})$$

Aplicamos la identidad 1.98 en la ecuación 1.97:

$$\begin{aligned} \langle Z_J^n \rangle_J &= tr_n \left\{ \prod_{i \neq j} \exp \left(\frac{(\beta J)^2}{2} \left(\sum_{\alpha=1}^n S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} \right)^2 + \beta J_0 \sum_{\alpha=1}^n S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} \right) \right\} \\ \langle Z_J^n \rangle_J &= tr_n \left\{ \exp \left(\sum_{i \neq j} \left[\frac{(\beta J)^2}{4} \left(\sum_{\alpha,\beta} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} S_{i,\beta} S_{j,\beta} \right) + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha=1}^n S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} \right] \right) \right\} \end{aligned} \quad (1.99)$$

Realizando la siguiente transformación:

$$\sum_{i \neq j} \sum_{\alpha=1}^n S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} = \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i,j}^N S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=j}^N S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} \quad (1.100)$$

Desarrollando el segundo término tenemos:

$$\sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=j}^N S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} = \sum_{\alpha=1}^n (S_{1,\alpha} S_{1,\alpha} + S_{2,\alpha} S_{2,\alpha} + S_{3,\alpha} S_{3,\alpha} + \dots + S_{N,\alpha} S_{N,\alpha})$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=j}^N S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} &= (S_{1,1} S_{1,1} + S_{2,1} S_{2,1} + S_{3,1} S_{3,1} + \dots + S_{N,1} S_{N,1}) + \\ &\quad (S_{1,2} S_{1,2} + S_{2,2} S_{2,2} + S_{3,2} S_{3,2} + \dots + S_{N,2} S_{N,2}) + \\ &\quad (S_{1,3} S_{1,3} + S_{2,3} S_{2,3} + S_{3,3} S_{3,3} + \dots + S_{N,3} S_{N,3}) + \\ &\quad \dots + \\ &\quad (S_{1,n} S_{1,n} + S_{2,n} S_{2,n} + S_{3,n} S_{3,n} + \dots + S_{N,n} S_{N,n}) \end{aligned}$$

$$\sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=j}^N S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} = Nn \quad (1.101)$$

Reemplazando 1.101 en 1.100 obtenemos:

$$\begin{aligned} \sum_{i \neq j} \sum_{\alpha=1}^n S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} &= \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i,j}^N S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} - Nn \\ \sum_{i \neq j} \sum_{\alpha=1}^n S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} &= \sum_{\alpha=1}^n \sum_i^N S_{i,\alpha} \sum_j^N S_{j,\alpha} - Nn \end{aligned}$$

Debido a que $i = 1, 2, 3 \dots N$ y $j = 1, 2, 3 \dots N$, la sumatoria puede depender de i o de j de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \sum_{i \neq j} \sum_{\alpha=1}^n S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} &= \sum_{\alpha=1}^n \sum_i^N S_{i,\alpha} \sum_i^N S_{i,\alpha} - Nn \\ \sum_{i \neq j} \sum_{\alpha=1}^n S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} &= \sum_{\alpha=1}^n \left(\sum_i^N S_{i,\alpha} \right)^2 - Nn \end{aligned} \quad (1.102)$$

Del mismo modo, realizamos el procedimiento anterior y encontramos la siguiente relación:

$$\sum_{i \neq j} \sum_{\alpha, \beta} (S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} S_{i,\beta} S_{j,\beta}) = 2 \sum_{\alpha \neq \beta} \left(\sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} S_{i,\beta} \right)^2 - N(n^2 - n) + n(N^2 - N) \quad (1.103)$$

Reemplazando 1.102 y 1.103 en 1.99 y considerando que en el límite termodinámico los términos lineales en N pueden ser despreciados respecto a los términos cuadráticos en N :

$$\langle Z_J^n \rangle_J = tr_n \left\{ \exp \left[\frac{(\beta J)^2}{4} \left(2 \sum_{\alpha \neq \beta} \left(\sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} S_{i,\beta} \right)^2 - N(n^2 - n) \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + n(N^2 - N) + \frac{\beta J_0}{2} \left(\sum_{\alpha=1}^n \left(\sum_i^N S_{i,\alpha} \right)^2 - Nn \right) \right] \right\}$$

$$\langle Z_J^n \rangle_J = tr_n \left\{ \exp \left[\frac{(\beta J)^2}{4} \left(2 \sum_{\alpha \neq \beta} \left(\sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} S_{i,\beta} \right)^2 + nN^2 \right) \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha=1}^n \left(\sum_i^N S_{i,\alpha} \right)^2 \right] \right\}$$

$$\langle Z_J^n \rangle_J = tr_n \left\{ \exp \left[\frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \left(\sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} S_{i,\beta} \right)^2 + \frac{(\beta J)^2 n N^2}{4} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha=1}^n \left(\sum_i^N S_{i,\alpha} \right)^2 \right] \right\}$$

$$\langle Z_J^n \rangle_J = \exp \left(\frac{(\beta J)^2 n N^2}{4} \right) tr_n \left\{ \exp \left[\frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \left(\sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} S_{i,\beta} \right)^2 \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha=1}^n \left(\sum_i^N S_{i,\alpha} \right)^2 \right] \right\} \quad (1.104)$$

Los términos cuadráticos pueden ser linealizados por medio de la transformación de Hubbard-Stratonovich:

$$\exp(\lambda a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2} + \sqrt{2\lambda}ax\right) dx \quad (1.105)$$

Aplicando la transformación 1.105 al argumento de la traza en la ecuación 1.104 obtenemos:

$$\begin{aligned} \langle Z_J^n \rangle_J &= \exp\left(\frac{(\beta J)^2 n N^2}{4}\right) \\ tr_n \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\sum_{\alpha \neq \beta}^n \left(-\frac{q_{\alpha,\beta}^2}{2} + \sqrt{2 \left(\frac{(\beta J)^2}{2} \right)} \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} S_{i,\beta} q_{\alpha,\beta} \right) \right] dq_{\alpha,\beta} \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\sum_{\alpha}^n \left(-\frac{x_{\alpha}^2}{2} + \sqrt{2 \left(\frac{\beta J_0}{2} \right)} \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} x_{\alpha} \right) \right] dx_{\alpha} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle Z_J^n \rangle_J &= \exp\left(\frac{(\beta J)^2 n N^2}{4}\right) \\ tr_n \left\{ \prod_{\alpha \neq \beta} \frac{dq_{\alpha,\beta}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\sum_{\alpha \neq \beta}^n \frac{q_{\alpha,\beta}^2}{2} + \beta J \sum_{\alpha \neq \beta}^n \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} S_{i,\beta} q_{\alpha,\beta} \right) \right. \\ &\quad \left. \prod_{\alpha} \frac{dx_{\alpha}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\sum_{\alpha}^n \frac{x_{\alpha}^2}{2} + (\beta J_0)^{(1/2)} \sum_{\alpha}^n \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} x_{\alpha} \right) \right\} \end{aligned} \quad (1.106)$$

Realizando el reemplazo $J_0 = \frac{\bar{J}_0}{N}$ y $J = \frac{\bar{J}}{N^{1/2}}$

$$\begin{aligned} \langle Z_J^n \rangle_J &= \exp\left(\frac{(\beta \bar{J})^2 n N}{4}\right) \\ tr_n \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\alpha \neq \beta} \frac{dq_{\alpha,\beta}}{\sqrt{2\pi}} \right] \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\alpha} \frac{dx_{\alpha}}{\sqrt{2\pi}} \right] \exp \left(-\sum_{\alpha \neq \beta}^n \frac{q_{\alpha,\beta}^2}{2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\beta J}{N^{1/2}} \sum_{\alpha \neq \beta}^n \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} S_{i,\beta} q_{\alpha,\beta} - \sum_{\alpha}^n \frac{x_{\alpha}^2}{2} + \left(\frac{\beta J_0}{N} \right)^{(1/2)} \sum_{\alpha}^n \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} x_{\alpha} \right) \right\} \end{aligned} \quad (1.107)$$

Realizamos el siguiente remplazo $x_\alpha = N^{1/2}x_\alpha$ y $q_{\alpha,\beta} = N^{1/2}q_{\alpha,\beta}$

$$\begin{aligned} \langle Z_J^n \rangle_J &= \exp \left(\frac{(\beta \bar{J})^2 n N}{4} \right) \\ tr_n \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\alpha \neq \beta} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dq_{\alpha,\beta} \right] \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\alpha} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dx_{\alpha} \right] \exp \left(-N \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{q_{\alpha,\beta}^2}{2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \beta \bar{J} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} S_{i,\beta} q_{\alpha,\beta} - N \sum_{\alpha} \frac{x_{\alpha}^2}{2} + (\beta \bar{J}_0)^{(1/2)} \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} x_{\alpha} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle Z_J^n \rangle_J &= \exp \left(\frac{(\beta \bar{J})^2 n N}{4} \right) \\ tr_n \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\alpha \neq \beta} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dq_{\alpha,\beta} \right] \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\alpha} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dx_{\alpha} \right] \exp \left(-N \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{q_{\alpha,\beta}^2}{2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - N \sum_{\alpha} \frac{x_{\alpha}^2}{2} \right) \exp \left(\beta \bar{J} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} S_{i,\beta} q_{\alpha,\beta} + (\beta \bar{J}_0)^{(1/2)} \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} x_{\alpha} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle Z_J^n \rangle_J &= \exp \left(\frac{(\beta \bar{J})^2 n N}{4} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\alpha \neq \beta} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dq_{\alpha,\beta} \right] \\ &\quad \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\alpha} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dx_{\alpha} \right] \exp \left(-N \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{q_{\alpha,\beta}^2}{2} - N \sum_{\alpha} \frac{x_{\alpha}^2}{2} \right) \\ &\quad tr_n \left\{ \exp \left(\beta \bar{J} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} S_{i,\beta} q_{\alpha,\beta} + (\beta \bar{J}_0)^{(1/2)} \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N S_{i,\alpha} x_{\alpha} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle Z_J^n \rangle_J &= \exp\left(\frac{(\beta\bar{J})^2 n N}{4}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\alpha \neq \beta} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dq_{\alpha,\beta} \right] \\
&\int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\alpha} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dx_{\alpha} \right] \exp\left(-N \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{q_{\alpha,\beta}^2}{2} - N \sum_{\alpha} \frac{x_{\alpha}^2}{2}\right) \quad (1.108) \\
&tr_n \left\{ \prod_i \exp\left(\beta\bar{J} \sum_{\alpha \neq \beta} S_{i,\alpha} S_{i,\beta} q_{\alpha,\beta} + (\beta\bar{J}_0)^{(1/2)} \sum_{\alpha} S_{i,\alpha} x_{\alpha}\right) \right\}
\end{aligned}$$

Utilizando la propiedad:

$$tr\left\{\prod_i \exp[\dots]\right\} = \prod_i tr\{ \exp[\dots]\} = tr\{ \exp[\dots]\}^N = \exp[N \log(tr\{ \exp[\dots]\})]$$

La ecuación 1.108 queda de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
\langle Z_J^N \rangle_J &= \exp\left(\frac{(\beta J)^2 n N}{4}\right) \int \left[\prod_{\alpha} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dx_{\alpha} \right] \left[\prod_{\alpha \neq \beta} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dq_{\alpha,\beta} \right] \quad (1.109) \\
&\exp[-N g(x_{\alpha}, q_{\alpha,\beta})]
\end{aligned}$$

Donde

$$\begin{aligned}
g(x_{\alpha}, q_{\alpha,\beta}) &= \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{q_{\alpha,\beta}^2}{2} + \sum_{\alpha} \frac{x_{\alpha}^2}{2} - \log \left(tr_{\alpha} \exp \left[\beta\bar{J} \sum_{\alpha \neq \beta} S_{\alpha} S_{\beta} q_{\alpha,\beta} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (\beta\bar{J}_0)^{(1/2)} \sum_{\alpha} S_{\alpha} x_{\alpha} \right] \right) \quad (1.110)
\end{aligned}$$

De esta manera la densidad de energía libre se obtiene tomando el siguiente limite:

$$\beta f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} \left\{ \exp \left(\frac{(\beta \bar{J})^2 n N}{4} \right) \int \left[\prod_{\alpha} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dx_{\alpha} \right] \left[\prod_{\alpha \neq \beta} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dq_{\alpha, \beta} \right] \exp[-N g(x_{\alpha}, q_{\alpha, \beta})] - 1 \right\} \quad (1.111)$$

Tomando el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ la integral I puede ser evaluada por el método punto de silla y se garantiza que la integral es dominada por el mínimo de $g(x_{\alpha}, q_{\alpha, \beta})$ de modo que:

$$I = \int \left[\prod_{\alpha} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dx_{\alpha} \right] \left[\prod_{\alpha \neq \beta} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dq_{\alpha, \beta} \right] \exp[-N g(x_{\alpha}, q_{\alpha, \beta})]$$

$$I = \exp[-N \min(g(x_{\alpha}, q_{\alpha, \beta}))] \quad (1.112)$$

Reemplazando en la densidad de energía tenemos

$$\beta f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} \left\{ \exp \left(\frac{(\beta \bar{J})^2 n N}{4} \right) \exp[-N \min(g(x_{\alpha}, q_{\alpha, \beta}))] - 1 \right\}$$

$$\beta f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} \left\{ \exp \left[Nn \left(\frac{(\beta \bar{J})^2}{4} - \frac{1}{n} \min(g(x_{\alpha}, q_{\alpha, \beta})) \right) \right] - 1 \right\} \quad (1.113)$$

En la composición de límites, el producto Nn es pequeño, por lo tanto, por expansión de Taylor hasta el segundo término, tenemos:

$$\beta f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} \left\{ 1 + Nn \left(\frac{(\beta \bar{J})^2}{4} - \frac{1}{n} \min(g(x_{\alpha}, q_{\alpha, \beta})) \right) - 1 \right\}$$

$$\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \left\{ -\frac{(\beta \bar{J})^2}{4} + \frac{1}{n} \min(g(x_{\alpha}, q_{\alpha, \beta})) \right\} \quad (1.114)$$

Realizando la siguiente transformación:

$$\begin{aligned} x_\alpha &= (\beta \bar{J}_0)^{1/2} m_\alpha \\ q_{\alpha,\beta} &= (\beta \bar{J}) q_{\alpha,\beta} \end{aligned} \quad (1.115)$$

Podemos escribir la ecuación 1.114 como sigue:

$$\beta f = -\frac{(\beta \bar{J})^2}{4} + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \min(g(m_\alpha, q_{\alpha,\beta})) \quad (1.116)$$

Donde

$$g(m_\alpha, q_{\alpha,\beta}) = \frac{\beta \bar{J}_0}{2} \sum_{\alpha} m_\alpha^2 + \frac{(\beta \bar{J})^2}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \log(\text{tr}_\alpha \exp(H_{ef})) \quad (1.117)$$

Donde obtenemos el Hamiltoniano efectivo en el espacio de las ry se encuentra dado por

$$H_{ef} = \beta \bar{J}_0 \sum_{\alpha} m_\alpha S_\alpha + (\beta \bar{J})^2 \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta} S_\alpha S_\beta \quad (1.118)$$

Tomando los extremos de $g(m_\alpha, q_{\alpha,\beta})$ de modo que obtenemos las expresiones m_α y $q_{\alpha,\beta}$:

$$\frac{\partial g}{\partial m_\alpha} = 0 \rightarrow m_\alpha = \frac{\text{tr}_\alpha \{S_\alpha \exp(H_{ef})\}}{\text{tr}_\alpha \{\exp(H_{ef})\}} \quad (1.119)$$

$$\frac{\partial g}{\partial q_{\alpha,\beta}} = 0 \rightarrow q_{\alpha,\beta} = \frac{\text{tr}_\alpha \{S_\alpha S_\beta \exp(H_{ef})\}}{\text{tr}_\alpha \{\exp(H_{ef})\}} \quad (1.120)$$

Siendo $\alpha \neq \beta$ donde $\langle \rangle$ denota la media térmica en relación H_{ef} . Estas ecuaciones pueden ser escritas según:

$$m_\alpha = \langle S_\alpha \rangle \quad (1.121)$$

$$q_{\alpha,\beta} = \langle S_\alpha S_\beta \rangle \quad (1.122)$$

En este punto se "asume" que las réplicas son indistinguibles:

$$m_\alpha = m, \forall \alpha \quad (1.123)$$

$$q_{\alpha,\beta} = q, \forall (\alpha, \beta) \quad (1.124)$$

Aplicando la hipótesis de la simetría de réplicas la función $g(m_\alpha, q_{\alpha,\beta})$ resulta:

$$g(m, q) = \frac{\beta \bar{J}_0 n m^2}{2} + \frac{(\beta \bar{J})^2 n(n-1)}{4} q^2 - \log(\text{tr}_\alpha \exp(H_{ef})) \quad (1.125)$$

Donde ahora H_{ef} es:

$$H_{ef} = \beta \bar{J}_0 m \sum_{\alpha} S_{\alpha} + (\beta \bar{J})^2 q \sum_{\alpha \neq \beta} S_{\alpha} S_{\beta} \quad (1.126)$$

Considerando que

$$\sum_{(\alpha \neq \beta)} S_{\alpha} S_{\beta} = \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha} \right)^2 - \frac{n}{2} \quad (1.127)$$

Entonces

$$g(m, q) = \frac{\beta \bar{J}_0 n m^2}{2} + \frac{n(n-1)q^2(\beta \bar{J})^2}{4} + \frac{nq(\beta \bar{J})^2}{2} - \log \text{tr} \left\{ \exp \left[\beta \bar{J}_0 m \sum_{\alpha} S_{\alpha} + \frac{q(\beta \bar{J})^2}{2} \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha} \right)^2 \right] \right\} \quad (1.128)$$

Utilizando la identidad 1.105 para linealizar $(\sum_{\alpha} S_{\alpha})^2$, por lo tanto, 1.128 queda

de la siguiente manera:

$$g(m, q) = \frac{\beta \bar{J}_0 n m^2}{2} + \frac{n(n-1)q^2(\beta \bar{J})^2}{4} + \frac{nq(\beta \bar{J})^2}{2} - \log \text{tr} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} + \beta \bar{J}_0 m \sum_{\alpha} S_{\alpha} + \beta \bar{J} q^{1/2} z \sum_{\alpha} S_{\alpha} \right] \right\} \quad (1.129)$$

Al ultimo término de la ecuación lo separamos para realizar operaciones sobre el:

$$\begin{aligned} A &= \log \text{tr} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} + \beta \bar{J}_0 m \sum_{\alpha} S_{\alpha} + \beta \bar{J} q^{1/2} z \sum_{\alpha} S_{\alpha} \right] \right\} \\ A &= \log \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] \text{tr} \prod_{\alpha} \exp \left[\beta \bar{J}_0 m S_{\alpha} + \beta \bar{J} q^{1/2} z S_{\alpha} \right] \\ A &= \log \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] \prod_{\alpha} \text{tr} \{ \exp \left[\beta \bar{J}_0 m S_{\alpha} + \beta \bar{J} q^{1/2} z S_{\alpha} \right] \} \end{aligned} \quad (1.130)$$

El trazo sobre una única réplica α se puede representar de la siguiente manera:

$$\text{tr} \{ \exp \left[\beta \bar{J}_0 m S_{\alpha} + \beta \bar{J} q^{1/2} z S_{\alpha} \right] \} = 2 \cosh \xi \quad (1.131)$$

Donde

$$\xi = \beta \bar{J}_0 m + \beta \bar{J} q^{1/2} z \quad (1.132)$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} A &= \log \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] \prod_{\alpha} (2 \cosh \xi) \\ A &= \log \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (2 \cosh \xi)^n \end{aligned} \quad (1.133)$$

Haciendo uso de la identidad $x^n = \exp(n \log(x))$ sobre la ecuación 1.133, tenemos:

$$A = \log \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] \exp[n \log(2 \cosh \xi)] \quad (1.134)$$

Teniendo en cuenta el límite $n \rightarrow 0$, se utiliza la aproximación $\exp(\delta) = 1 + \delta$ sobre la ecuación 1.134 y obtenemos:

$$A = \log \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (1 + n \log(2 \cosh \xi)) \quad (1.135)$$

Considerando la integral par $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp(-z^2/2) = 1$ podemos reemplazar:

$$A = \log \left\{ 1 + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (n \log(2 \cosh \xi)) \right\} \quad (1.136)$$

Utilizando la identidad $\log(1 + \delta) \equiv \delta$ sobre la ecuación 1.136 entonces tenemos:

$$A = n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (\log(2 \cosh \xi)) \quad (1.137)$$

Insertando este resultado en la ecuación 1.129 tenemos:

$$g(m, q) = \frac{\beta \bar{J}_0 n m^2}{2} + \frac{n(n-1) q^2 (\beta \bar{J})^2}{4} + \frac{n q (\beta \bar{J})^2}{2} - n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (\log(2 \cosh \xi))$$

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} g(m, q) = \frac{\beta \bar{J}_0 m^2}{2} + \frac{(n-1) q^2 (\beta \bar{J})^2}{4} + \frac{q (\beta \bar{J})^2}{2} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (\log(2 \cosh \xi))$$

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} g(m, q) = \frac{\beta \bar{J}_0 m^2}{2} - \frac{q^2 (\beta \bar{J})^2}{4} + \frac{q (\beta \bar{J})^2}{2} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (\log(2 \cosh \xi)) \quad (1.138)$$

Reemplazando este resultado en la ecuación 1.116 tenemos:

$$\beta f = -\frac{(\beta \bar{J})^2}{4} + \frac{\beta \bar{J}_0 m^2}{2} - \frac{q^2 (\beta \bar{J})^2}{4} + \frac{q (\beta \bar{J})^2}{2} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (\log(2 \cosh \xi))$$

$$\beta f = -\frac{(\beta \bar{J})^2}{4} (1 - q)^2 + \frac{\beta \bar{J}_0 m^2}{2} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (\log(2 \cosh \xi)) \quad (1.139)$$

Minimizamos la energía libre para poder obtener las condiciones de equilibrio:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\beta f)}{\partial m} = 0 &\rightarrow m \beta \bar{J}_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (\beta \bar{J}_0 \frac{2 \sinh \xi}{2 \cosh \xi}) \\ \frac{\partial(\beta f)}{\partial m} = 0 &\rightarrow m = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (\tanh \xi) \end{aligned} \quad (1.140)$$

Del mismo modo se deriva respecto a q :

$$\frac{\partial(\beta f)}{\partial q} = 0 \rightarrow q = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] (\tanh^2 \xi) \quad (1.141)$$

Vamos a determinar por P, F y SG las fases Paramagnética, Ferromagnética y Vidrio de Espín respectivamente. Cuando $\bar{J}_0 = 0$ entonces $m = 0$, debido a la función par del integrando en z . Si $q = 0$ se presenta la fase P y si $q \neq 0$ se presenta la fase SG. en el caso $\bar{J}_0 \neq 0$ se presentan dos fases si $m = 0$, siendo la fase P cuando $q = 0$ y SG cuando $q \neq 0$. Cuando $m \neq 0$ y $q \neq 0$ la fase es F.

En las proximidades de la fase P, m y q tienden a 0 por lo tanto, ξ también tiende a 0. por lo tanto, podemos realizar las siguientes aproximaciones:

$$\tanh \xi \approx \xi - \frac{1}{3}\xi^3 \quad (1.142)$$

$$\tanh^2 \xi \approx \xi^2 - \frac{2}{3}\xi^4 \quad (1.143)$$

Aplicando a 1.140 y 1.141 obtenemos lo siguiente:

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] \left(\xi - \frac{1}{3}\xi^3 \right) \quad (1.144)$$

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] \left(\xi^2 - \frac{2}{3}\xi^4 \right) \quad (1.145)$$

Desarrollando las integrales mediante propiedades de funciones simétricas siguientes:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{z^n dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] = \begin{cases} 0, & \text{n impar} \\ 1, & \text{en otros casos} \end{cases} \quad (1.146)$$

Entonces tenemos los siguientes resultados:

$$m = \beta \bar{J}_0 m - \frac{1}{3}(\beta \bar{J}_0)^3 m^3 - (\beta \bar{J}_0)(\beta \bar{J})^2 m q \quad (1.147)$$

$$q = (\beta \bar{J}_0)^2 m^2 + (\beta \bar{J})^2 q - \frac{2}{3}(\beta \bar{J}_0)^4 m^4 - 4(\beta \bar{J}_0)^2 (\beta \bar{J})^2 m^2 q - 2(\beta \bar{J})^4 q^2 \quad (1.148)$$

De la ecuación 1.147 podemos obtener la frontera P-F cuando $\beta \bar{J}_0 = 1$, que implica que la recta $T = \bar{J}_0/k_\beta$ divide la fase paramagnética de la ferromagnética en el diagrama de fases Temperatura vs el valor medio de J_0 .

Del mismo modo, a partir de la ecuación 1.148 se obtiene la frontera SG-P, cuando $m = 0$ y $(\beta \bar{J})^2 = 1$, entonces la recta horizontal $T = \bar{J}/k_\beta$ divide la región vidrio de espín con la paramagnética.

Para el caso de $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) expresamos la ecuación 1.141 se convierte en:

$$q = 1 - \frac{k_\beta T}{\bar{J} q^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(k_\beta T \xi - \bar{J}_0 m)^2}{2\bar{J}^2 q} \right]^2 \xi \quad (1.149)$$

Podemos despreciar el término $k_\beta T \xi$ debido a que $k_\beta T \xi \ll \bar{J}_0 m$, por lo tanto:

$$q \approx 1 - \frac{k_\beta T}{\bar{J} q^{1/2}} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{(\bar{J}_0 m)^2}{2\bar{J}^2 q} \right] \quad (1.150)$$

Como $q = 1 + O(T)$ donde $O(T) \rightarrow 0$ cuando pertenece a un exponente, en el lado derecho de la ecuación 1.150, q puede ser reemplazado por $q = 1$

$$q \approx 1 - \frac{k_\beta T}{\bar{J} q^{1/2}} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{(\bar{J}_0 m)^2}{2\bar{J}^2} \right] \quad (1.151)$$

Cuando $T = 0$, $q = 1$, significa que el parámetro de orden del estado vidrio espín alcanza su máximo. Ahora se revisará la ecuación 1.140 cuando $T \rightarrow 0$. Vemos que la función \tanh tiene asíntotas en +1 y -1 dependiendo de si el

argumento es positivo o negativo respectivamente, entonces, cuando $T = 0$

$$\tanh \xi = \begin{cases} 1, & \text{si } z < \Lambda \\ -1, & \text{su } z > \Lambda \end{cases} \quad (1.152)$$

Donde $\Lambda = -\frac{\bar{J}_0 m}{J}$ entonces:

$$m = - \int_{-\infty}^{\Lambda} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] + \int_{-\Lambda}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] \quad (1.153)$$

Definimos las funciones Error y Error complementaria según:

$$\operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2}} \right) = 2 \int_0^x \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] \quad (1.154)$$

$$\operatorname{erfc} \left(\frac{x}{\sqrt{2}} \right) = 2 \int_x^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{z^2}{2} \right] \quad (1.155)$$

Las que cuenta con las siguientes propiedades:

$$\operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf}(x) \quad (1.156)$$

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) \quad (1.157)$$

Entonces, para $T = 0$

$$m = \operatorname{erf} \left(\frac{\bar{J}_0 m}{\sqrt{2J}} \right) \quad (1.158)$$

Expandiendo en x las funciones

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{10} - \dots \right); \quad \text{si } x \rightarrow 0 \quad (1.159)$$

$$\operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{\exp(-x^2)}{\sqrt{\pi}x} \left(1 - \frac{1}{2x^2} + \dots \right); \quad \text{si } x \rightarrow \infty \quad (1.160)$$

En el límite $\frac{\bar{J}_0}{\bar{J}} \gg 1$:

$$m \approx 1 - \frac{\sqrt{2\bar{J}}}{\sqrt{\pi}\bar{J}_0 m} \exp\left(-\frac{(\bar{J}_0 m)^2}{2\bar{J}^2}\right) \quad (1.161)$$

Del mismo modo que se hizo con q , se aproxima $m \approx 1$ en el segundo término de la ecuación y resulta:

$$m \approx 1 - \frac{\sqrt{2\bar{J}}}{\sqrt{\pi}\bar{J}_0} \exp\left(-\frac{(\bar{J}_0)^2}{2\bar{J}^2}\right); \quad \text{cuando } T = 0, \frac{\bar{J}_0}{\bar{J}} \gg 1 \quad (1.162)$$

En el límite en que $m \rightarrow 0$

$$m \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{\bar{J}_0 m}{\sqrt{2\bar{J}}} - \frac{1}{3} \frac{(\bar{J}_0 m)^3}{2^{3/2}\bar{J}^3} \right] \quad (1.163)$$

La solución con $m \neq 0$ en la ecuación anterior es

$$m \approx (18\pi)^{1/4} \frac{\bar{J}}{\bar{J}_0} \left[\left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} - \frac{\bar{J}}{\bar{J}_0} \right]^{1/2}; \quad \text{cuando } T = 0, m \rightarrow 0 \quad (1.164)$$

La frontera SG-F se obtiene a partir de la ecuación 1.163 por métodos numéricos. Obtenemos el diagrama de fase teórico según la figura 1.18:

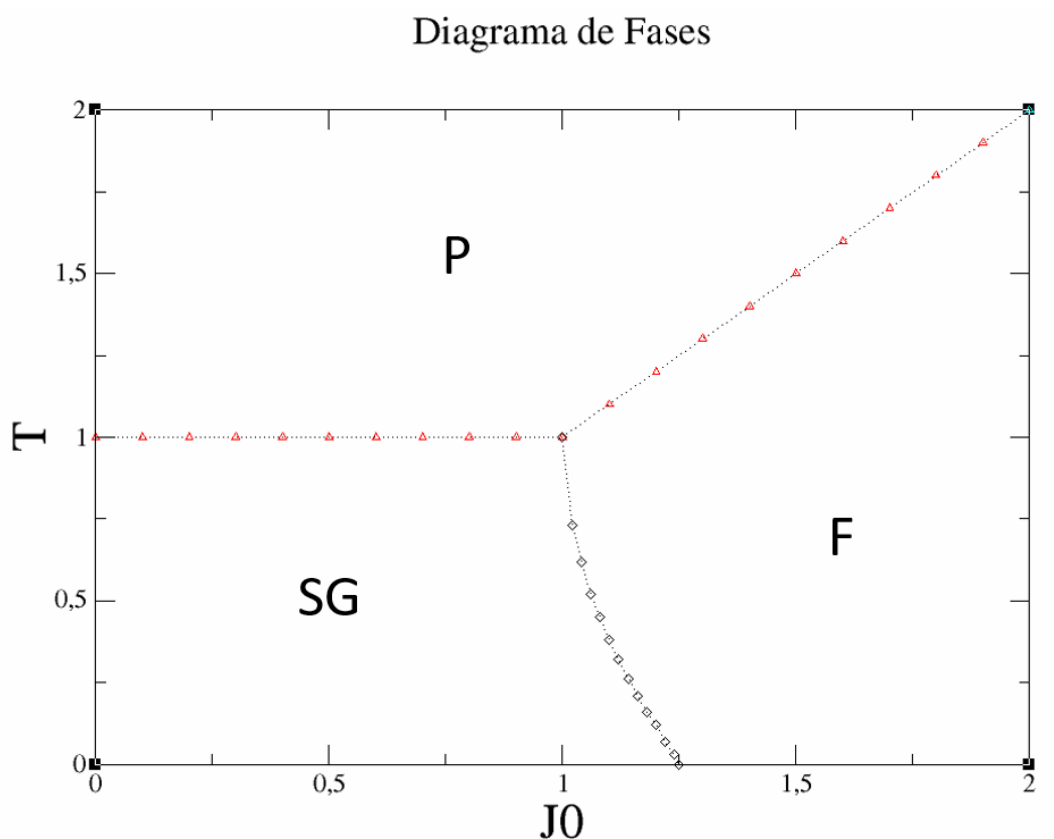


Figura 1.18: Diagrama de fases (Paramagnética, Ferromagnética y Vidrio de espín) mostrada para distintos valores de Temperatura y J_0

Se puede observar que sobre $T = 1$ existe fase paramagnética hasta $J_0 = 1$, luego, cuando J_0 es mayor a 1, la fase paramagnética existirá con la variación a temperaturas mayores a 1 según el gráfico de diagrama de fases.

La fase ferromagnética aparece para valores de J_0 mayores a 1 siempre y cuando la temperatura sea menor a la necesaria para pasar la frontera hacia la fase paramagnética.

La fase vidrio de espín aparece para temperaturas menores a 1 y para J_0 menores a 1.25 siguiendo el diagrama de fases. Esta es la fase de interés por lo que se han estudiado las condiciones necesarias para la existencia de la fase vidrio de espín

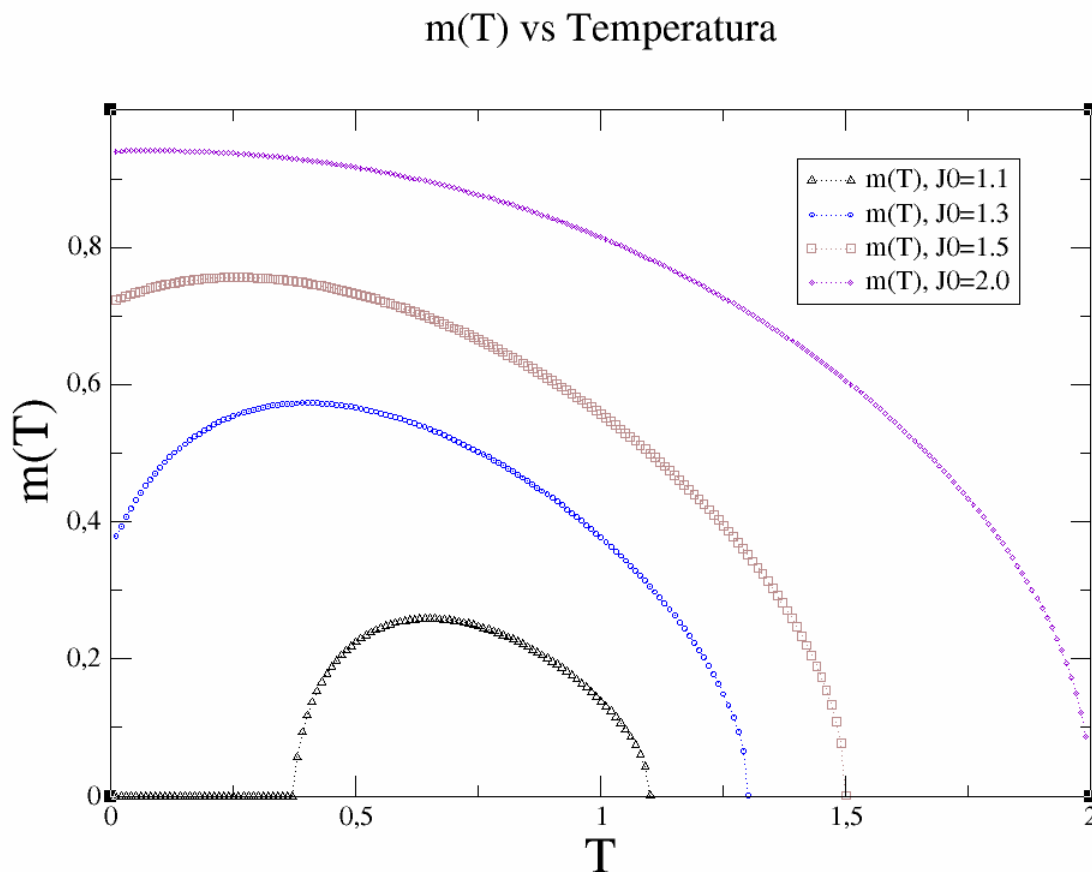


Figura 1.19: Variación de la magnetización por espín según $J_0 = 1.1, 1.3, 1.5, 2.0$

En la figura 1.19 vemos que la fase vidrio de espín se caracteriza por $m = 0$ y $q \neq 0$. En el gráfico anterior se puede observar que para el valor $J_0 = 1.1$ existe la posibilidad de una fase vidrio de espín entre las temperaturas $T = 0$ hasta $T = 0.37$.

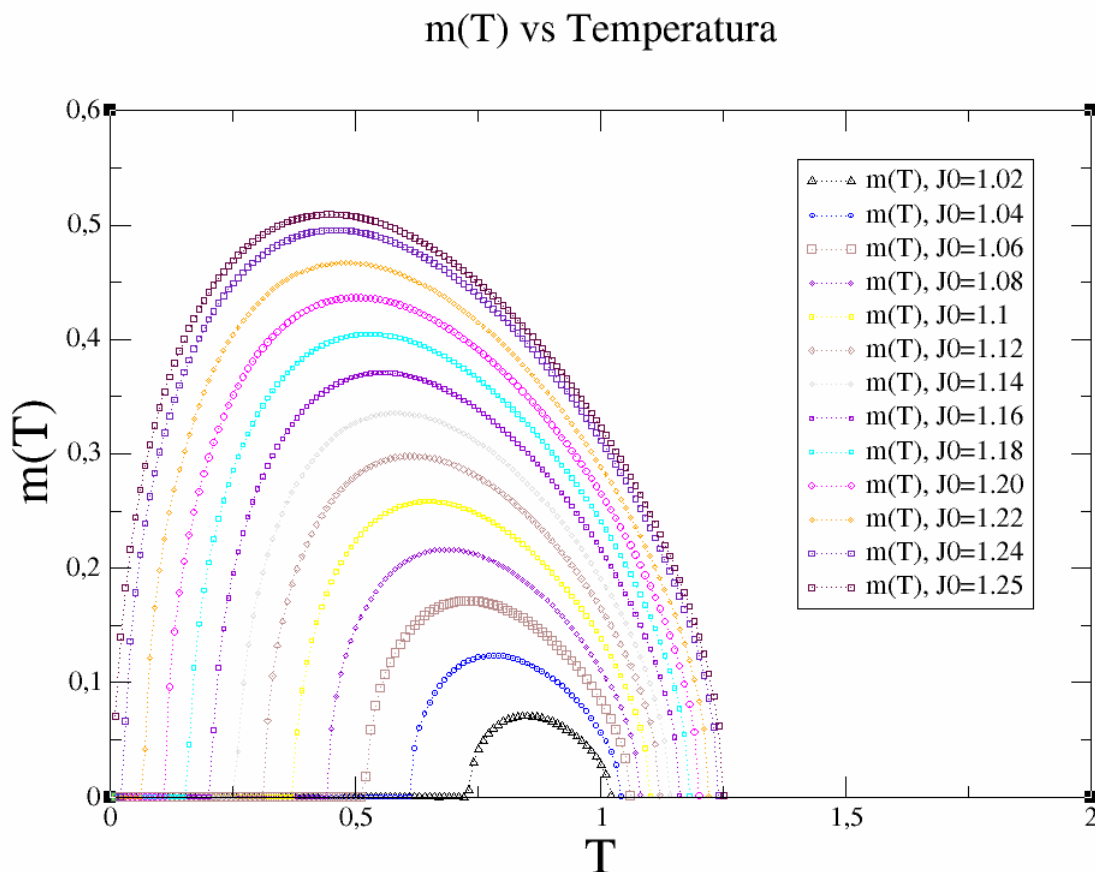


Figura 1.20: Comportamiento de la magnetización por espín desde $J_0 = 1$ hasta $J_0 = 1,25$

La figura 1.20 muestra el comportamiento de la fase vidrio de espín para valores de J_0 entre 1 y 1.25, el cual indica, que existe fase vidrio de espín cuando J_0 aumenta, sin embargo, el rango de temperaturas que admite la existencia de esta fase disminuye. Esto puede observarse en que el rango de temperaturas a la que la magnetización por espín es 0 decrece cuando J_0 aumenta. Cuando J_0 se acerca a 1.25, la temperatura llega a 0, lo que indica que el sistema ha llegado a la frontera con la fase ferromagnética. Por lo tanto, cuando la magnetización por espín es diferente de 0 y el parámetro de orden q es diferente de 0, se dice que estamos en la fase ferromagnética.

Por lo tanto, según el modelo SK, podemos obtener una aproximación analíticamente resoluble, sin embargo, existen problemas de estabilidad los cuales no se revisará en este apartado ya que la finalidad de este escrito es estudiar la fase vidrio espín del modelo de Edwards Anderson lo cual se revisa en el siguiente capítulo.

Capítulo 2

Métodos y Materiales

2.1. Materiales

Para el desarrollo del proyecto de tesis se utilizó un ordenador de escritorio con sistema operativo basado en Linux para poder realizar la escritura del apartado teórico y las simulaciones requeridas para la demostración del cálculo analítico.

Se utilizó el procesador LaTeX para realizar la escritura del mismo y aprovechar las características de texto científico formateado de modo que no exista inconvenientes en la escritura de fórmulas matemáticas.

El uso de este editor de texto científico se hace viable debido al tipo de licencia utilizada, siendo este un software libre.

Se desarrollaron los algoritmos en lenguaje C, usando el entorno de desarrollo Visual Studio Code el cual es de libre licencia y la librería MPI para el procesamiento paralelo multinúcleo.

2.2. Método

El análisis teórico del proyecto de tesis se realiza en cuatro pasos que son críticos para la correcta comprensión del mismo y se enumeran a continuación:

2.2.1. Creación de la estructura teórica

Se debe establecer una estructura teórica de modo que el presente proyecto de tesis sirva como un medio de consulta para cualquier alumno o profesional que requiera consultar la información para realizar una continuación al estudio.

2.2.2. Revisión de la bibliografía

La bibliografía ha sido elegida de modo que el alumno o profesional pueda ampliar los conceptos indicados en el presente proyecto de tesis y cabe resaltar que se debe tener conocimiento del idioma inglés a nivel intermedio para poder ayudarse de las diferentes tecnologías de traducción en tiempo real debido a que existe una combinación de textos completos y artículos científicos.

2.2.3. Escritura del apartado teórico estructurado

Se realiza la escritura de modo que el proyecto quede lo más sintético posible, ampliando los desarrollos matemáticos de modo que el alumno o profesional encuentre oportuno los pasos a seguir para los distintos modelos de espines y encontrar la relación entre ellos.

2.2.4. Simulaciones computacionales para comprobar los cálculos analíticos.

Se realizan simulaciones con el método Montecarlo para comprobar los procesos analíticos realizados en el modelo de Ising, Blume-Capel, SK y Edwards Anderson. Se presentan los resultados gráficamente al final de cada apartado de simulación, de modo que se pueda visualizar de una manera amigable siguiendo la descripción en cada pie de imagen.

Capítulo 3

Resultados y discusión

Las simulaciones de los modelos de Ising incrementan su costo computacional dependiendo de las interacciones entre los espines y la cantidad de vecinos y las dimensiones en las que se trabaje. La programación secuencial en este caso puede resolver los problemas mas simples, sin embargo, los requerimientos computacionales se incrementan cuando la complejidad de los modelos aumentan.

Los procedimientos y simulaciones han sido realizadas en un entorno de desarrollo en lenguaje C usando la librería MPI(Message Passing Interface)[14] de modo que se puede realizar cálculos en distintos núcleos del CPU de modo paralelo y sincronizado. Con este método de programación se aprovecha la mayor parte de la capacidad del CPU dependiendo de la optimización del algoritmo.

Para los procedimientos de equilibrio de temperaturas bajas se ha utilizado Parallel Tempering, el cual evita que el sistema quede atrapado en un mínimo local de energía el cual no es el mínimo real de energía esperado para el sistema.

3.1. Parallel Tempering

La característica multinúcleo de los CPU actualmente nos permite tener la facilidad de ejecutar distintos procesos en distintos núcleos, lo cual nos permite acelerar las simulaciones computacionales que requieren mucha potencia de máquina.

Parallel Tempering aprovecha esta característica de los CPU de modo que, al realizar intercambio de información entre los distintos núcleos por cada proceso, el modelo simulado se retroalimenta y permita recorrer el camino correcto.

El modelo SK es un modelo complicado debido al difícil equilibrio a bajas temperaturas ya que aquí uno puede encontrar mínimos locales de energía los cuales, utilizando otros métodos distintos a Parallel Tempering, pueden tomarse como mínimos globales verdaderos de energía lo cual sería un error.

Parallel Tempering se aplica al modelo SK para realizar el intercambio de información entre los sistemas de espines vecinos simulados (a distintas temperaturas), lo cual permite "escapar" al sistema de mínimos locales y encontrar los mínimos globales reales.

Parallel Tempering aplicado al modelo SK funciona de la siguiente manera:

En una red de espines donde el par de vecinos i, j interactúa a través de la variable aleatoria J_{ij} , el Hamiltoniano no es único, porque depende del conjunto $\{J_{ij}\}$ que contiene todas las interacciones seleccionadas según una probabilidad $P(J_{ij})$. Supongamos que tres espines S_1, S_2 y S_3 , que forman un triángulo equilátero, interactúan a primeros vecinos según la siguiente distribución bimodal de probabilidad:

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{2}\delta(J_{ij} - J_0) + \frac{1}{2}\delta(J_{ij} + J_0) \quad (3.1)$$

Esto significa que tenemos las siguientes variables aleatorias para las interacciones: J_{12} , J_{13} , J_{23} . Según la distribución de la ecuación anterior, cada una de estas tres interacciones asume el valor J_0 con probabilidad 0.5 y $-J_0$ con probabilidad 0.5. Esto significa que hay 8 diferentes conjuntos de interacciones para este sistema triangular de espines. A cada una de estas le llamamos muestras.

Sabemos que el Hamiltoniano de una muestra de N espines es dada por:

$$H_{ij} = \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j \quad (3.2)$$

donde $S_i = \pm 1$, $i = 1, 2, 3, \dots, N - 1, N$. Si $P(J_{ij})$ es dada por la ecuación (4.1) la fase es vidrio de espines (SG) cuando $T < T_c$. Cuando $T > T_c$ la fase es paramagnética (P). La transición SG-P es de segundo orden. Para que exista una temperatura crítica diferente a cero, el sistema debe estar en una dimensión superior a la dimensión crítica inferior d_{inf} . Se ha determinado que $2 < d_{inf} < 3$.

No hay fase vidrio en 2D para una temperatura mayor que cero, pero en 3D, 4D,...sí hay. En estos casos T_c depende de la dimensión y la geometría de la red. También, al no ser d_{inf} entera, es fractal. Por otro lado, vimos que, en dimensión infinita, es decir, cuando las interacciones son de tipo campo medio, el parámetro de orden vidrio no es único sino que hay infinitos parámetros que lo pueden definir, ya que hay un infinito quiebre de simetría entre réplicas. Sin embargo, se ha comprobado que en bajas dimensiones el parámetro de orden es único.

Debajo de una dimensión crítica superior d_{sup} el parámetro de orden es bastante simple. De esta manera, para $d_{inf} < d < d_{sup}$, la naturaleza de la fase vidrio no tiene la complejidad (Replica-symmetry breaking) de la solución exacta de Parisi, sino que es explicado por una visión de gotas (Droplet Picture). Teóricamente se ha determinado que $d_{sup} = 6$. También, cuando $d > d_{sup}$, la fase vidrio puede resistir a un campo magnético menor que un campo crítico, pero cuando $d < d_{sup}$, la fase vidrio no resiste al más mínimo campo aplicado.

Para construir $P(q)$ debemos obtener un histograma del parámetro q en el intervalo $[0,1]$, con un número considerable de muestras a una temperatura muy baja lo más próxima de cero, ya que en $T = 0$ no se puede hacer la simulación. Es decir, $P(q) = [P(q)(J_{ij})]_J$, donde $[...]_J$ es el promedio sobre un número grande de muestras, y $P(q)(J_{ij})$ es la distribución de q para una muestra. El parámetro de orden se define de la siguiente forma:

$$q = q^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \quad (3.3)$$

donde N es el número de espines del sistema. Los índices α y β representan a dos diferentes réplicas del sistema a la misma temperatura. Esta definición de q es coherente con lo que significa la fase vidrio. En otras palabras, mide el grado de congelamiento de los espines al simular dos réplicas del sistema a una misma temperatura y medir, en el equilibrio, la correlación de todos los espines con sus correspondientes en otra réplica. En bajas temperaturas, el modelo EA debe presentar un valor de q cercano a uno, y después de una cierta temperatura crítica q debe ser cero.

No obstante, existe un gran problema al simular el modelo EA. Es difícil alcanzar el equilibrio, y solo tamaños pequeños se pueden simular. Al simular valores pequeños de L , los resultados pueden presentar efectos de tamaño finito que pueden ocultar la verdadera naturaleza de la fase vidrio. Para esto, se

debe hacer un análisis de escala a fin de proyectarse al límite termodinámico ($L \rightarrow \infty$), es decir, a un tamaño macroscópico.

Para equilibrar el sistema se usa el algoritmo de Parallel Tempering, que es el algoritmo de Metrópolis aplicando en dos niveles. Para implementar este algoritmo se escoge un intervalo de temperaturas y se particiona en M valores, donde la mínima es T_1 y la máxima es T_M . Después, se crean M copias del sistema, donde cada copia j , se va a simular a la temperatura T_j , donde $j = 1, 2, 3, \dots, M$. La idea es que T_M sea un poco mayor a la temperatura crítica y T_1 lo más cercana a cero. En la práctica, esta copia nunca equilibra si T_1 es menor que 0.1 o 0.2.

Si cada copia se hace simular individualmente por el algoritmo de Metrópolis, el equilibrio es muy difícil de alcanzar para las copias a bajas temperaturas, o su tiempo de equilibrio es enorme. Esto se debe a que las copias a bajas temperaturas se quedan atrapadas en estados metaestables, es decir, en mínimos locales de la energía libre, sin poder visitar otros estados posibles. Para acelerar el tiempo de equilibrio, y mantener el equilibrio cumpliendo la condición de balance detallado, se creó el Parallel Tempering. Esta técnica consiste en hacer que las copias a bajas temperaturas se alimenten de configuraciones de espines de las copias de altas temperaturas, pero manteniendo el balance detallado. Esto significa que después de un cierto tiempo de simulación independiente, copias vecinas, es decir, copias a temperaturas vecinas, van a intercambiar de configuraciones de espín con cierta probabilidad y después cada copia vuelve a evolucionar independientemente. Entonces, sean las copias vecinas con temperaturas T_j y T_{j+1} , con energías E_j y E_{j+1} , respectivamente.

Cuando se les pregunte si pueden intercambiar sus valores de espines, lo harán con la siguiente probabilidad:

$$p = \exp\left(\left(\frac{1}{T_j} - \frac{1}{T_{j+1}}\right)(E_j - E_{j+1})\right) \quad (3.4)$$

Se simula cada copia a su respectiva temperatura independientemente de las otras copias, y después de cierto tiempo se hace un barrido de metrópolis entre las copias para que haya un desplazamiento de configuraciones de espines. Se puede comprobar que con este algoritmo el sistema alcanza el equilibrio mucho más rápido que si las copias evolucionaran independientemente.

Para calcular el parámetro de orden mencionado antes, se debe replicar el sistema. Es decir, se debe simular simultáneamente, dos réplicas del sistema para cada temperatura. Una forma de hacer esto es crear M nodos de MPI, donde cada nodo contiene una copia α a temperatura T_j , con su respectiva réplica β a la misma temperatura. En la figura 3.1 y 3.2 se puede observar la comparación del algoritmo de Parallel Tempering con un algoritmo secuencial.

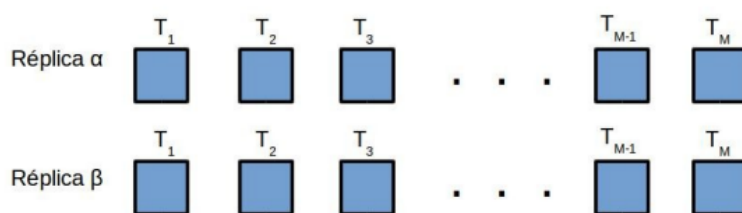


Figura 3.1: Simulación secuencial de cada temperatura para cada réplica

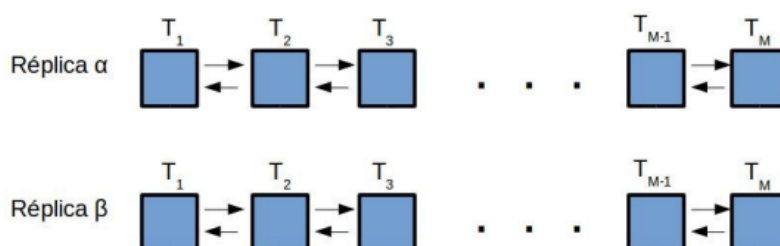


Figura 3.2: Simulación paralela para las temperaturas en cada réplica, Parallel Tempering se basa en el intercambio de configuraciones entre temperaturas

Cabe mencionar que con esto simulamos solo una muestra (one sample realization). Para calcular un promedio $[\dots]_J$ se debe repetir la simulación para muchas muestras a fin de tener la mejor estadística posible, ya que nunca nos alcanzaría el tiempo para simular las infinitas muestras que pueden existir en una red de tamaño considerable.

En la figura 3.3 se verifica la eficiencia del algoritmo Parallel Tempering comparado con los métodos tradicionales.

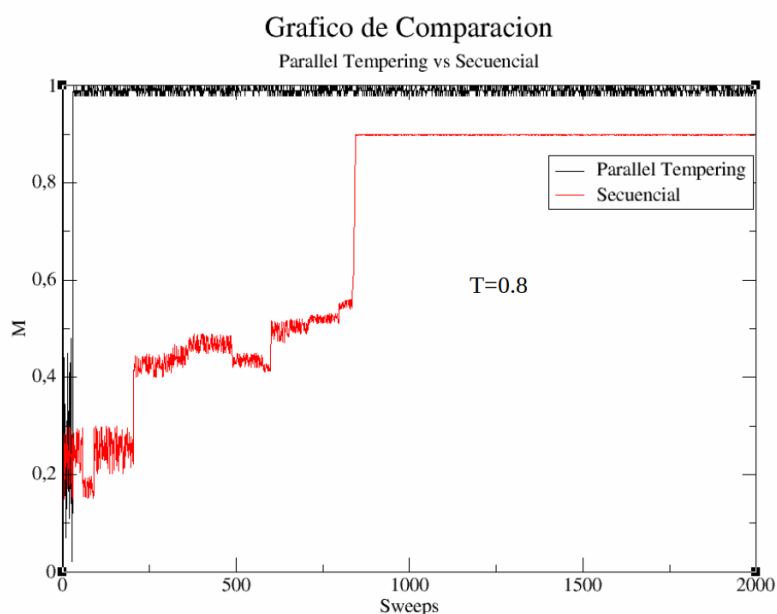


Figura 3.3: Comparación de rapidez del algoritmo Parallel Tempering para el equilibrio de magnetización por espín contra el algoritmo tradicional secuencial

3.2. Modelo de Edwards-Anderson en la Red Cúbica

El modelo de Edwards-Anderson ha sido simulado para red cubica en los tamaños de $L = 4, 8, 10$ Obteniendo las fases vidrio de espín según los siguientes gráficos.

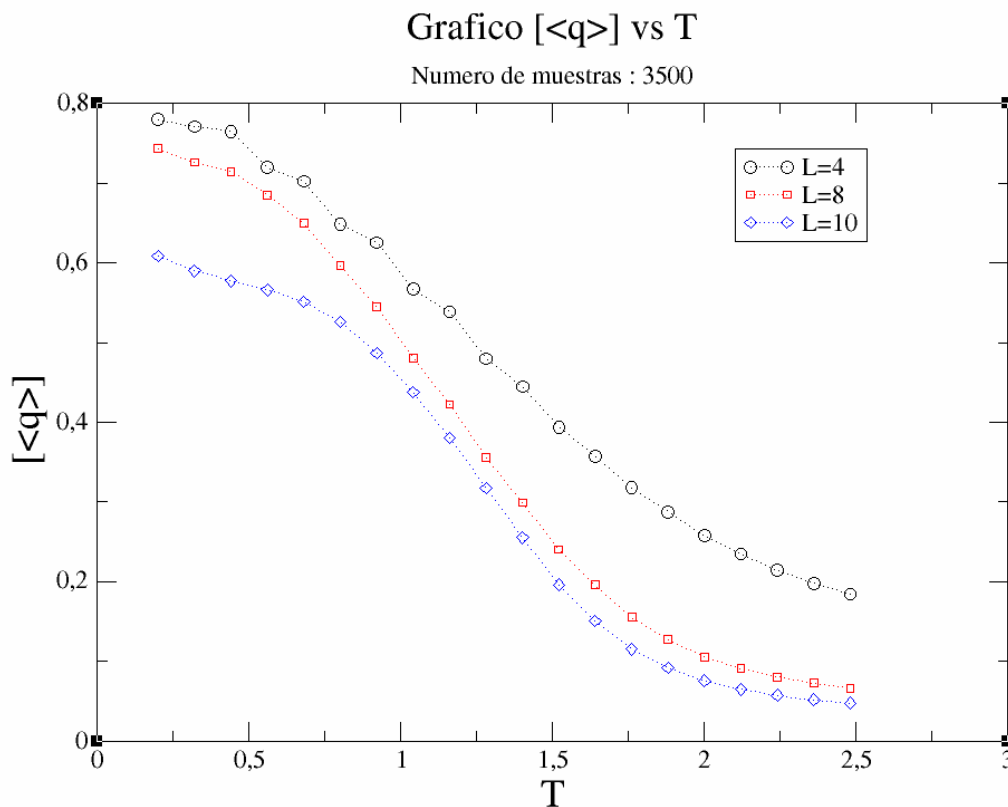


Figura 3.4: Representación del parámetro de orden q y su comportamiento con el aumento de la temperatura

La simulación se realizó sobre 3500 muestras. En la figura 3.4 se observa que el parámetro de orden inicia el descenso en la temperatura crítica para cada tamaño de la red. Esta temperatura crítica se ubica alrededor de $1.xx$.

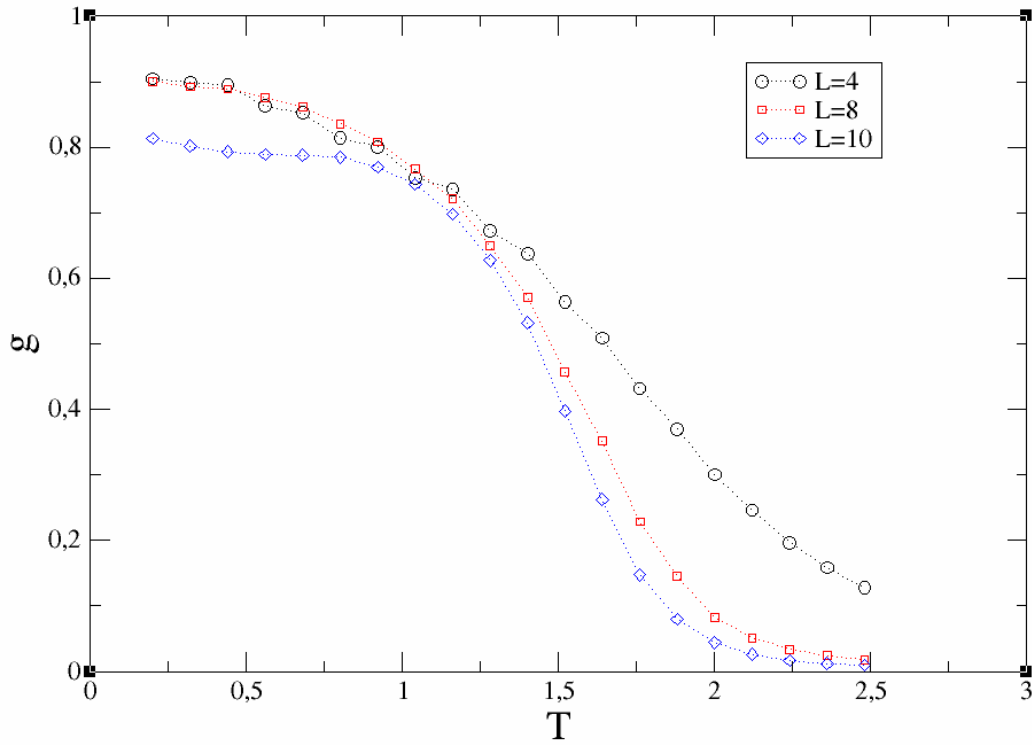


Figura 3.5: Representación del cumulante de Binder. Debido a la cantidad pequeña de muestras y por consiguiente, el efecto finito, podemos verificar el acercamiento de las tres líneas aproximadamente a la $T_c = 0,99$

El cumulante de cuarto orden mostrado en la figura 3.5 nos permite encontrar la temperatura crítica el cual es la intersección de las tres curvas generadas por las simulaciones. Se debe tener en cuenta el efecto de escala finita, el cual, debido a la capacidad computacional limitada, nos encontramos con un acercamiento entre curvas y no una intersección sin embargo es suficiente para estimar la temperatura crítica a la cual existe una transición de fase.

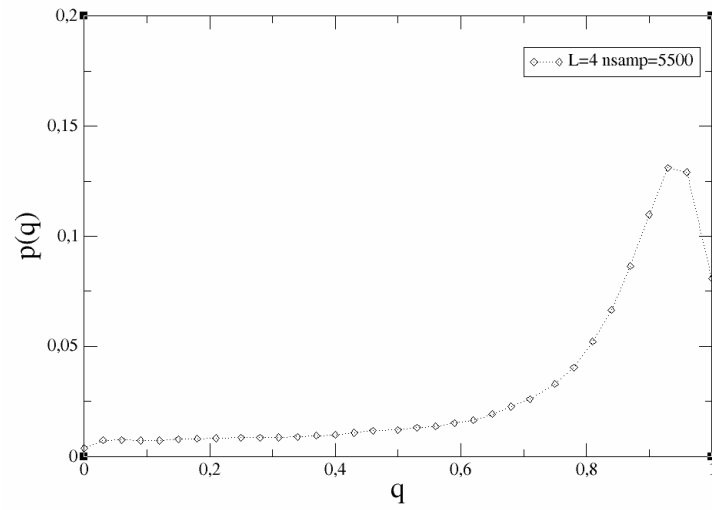


Figura 3.6: Histograma de q para 5500 muestras

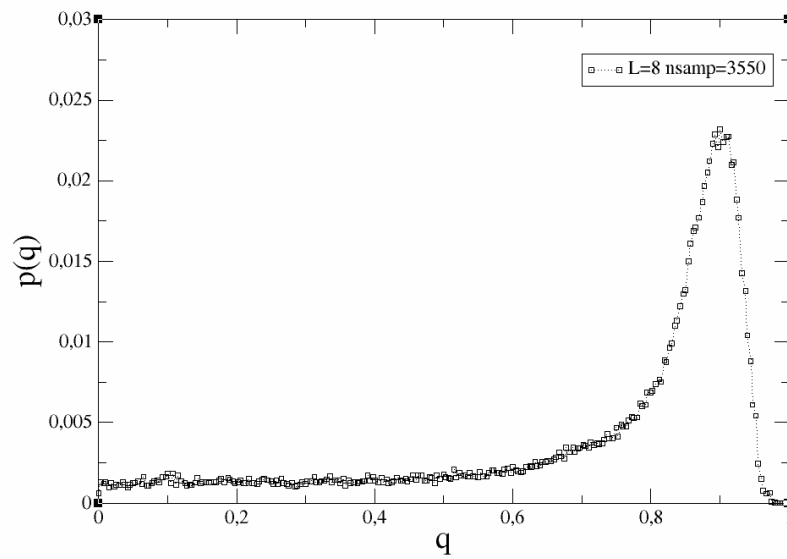


Figura 3.7: Histograma de q para 3550 muestras

La fase vidrio de espín se identifica debido a que existe un pico para el histograma de q cercano al valor de 1 como el mostrado en las figuras 3.6 y 3.7. Para distintos tamaños de red se puede verificar la existencia de un pico alrededor de $q = 0,8$. Todas estas simulaciones se hicieron para valores de $T = 0,2$ hasta $T = 2$ debido a la inestabilidad del modelo a temperaturas menores.

Para $L = 10$, la curva del parámetro de orden está deformada en bajas temperaturas porque el número de muestras simuladas para ese tamaño no ha sido suficiente para hacer que el promedio sobre muestras sea convergente. Esto se nota más en bajas temperaturas, cerca de $T = 0$

Capítulo 4

Conclusiones

En esta tesis ha sido estudiado el modelo de Edwards-Anderson (EA) mediante técnicas analíticas y computacionales de la Física Estadística, especialmente la fase vidrio de espín que se presenta en bajas temperaturas. En dimensión infinita, este modelo es también conocido como el modelo Sherrington-Kirkpatrick (SK), se ha obtenido su diagrama de fases al obtener analíticamente la energía libre considerando que el parámetro de orden es simétrico al intercambiar el índice de réplicas. Sin embargo, esta consideración conduce a una inestabilidad termodinámica a bajas temperaturas, ya que la energía libre obtenida no es un mínimo global. En consecuencia, la solución exacta de este problema muestra que en altas dimensiones la simetría del parámetro de orden debe ser quebrado infinitamente para que la energía libre sea mínima a bajas temperaturas. Esto significa que en altas dimensiones el parámetro de orden es múltiple y complejo (solución de Parisi). Por otro lado, se realizaron simulaciones con el algoritmo de Parallel Tempering para el modelo EA en la red cúbica, a fin de verificar que la fase vidrio existe en esta dimensión, obteniendo una temperatura crítica aproximada de $T_c = 0,99$. Por otro lado, el histograma (la función $P(q)$) del parámetro de orden para $L = 4$, muestra las características complejas de la solución de Parisi, con una dispersión considerable alrededor del pico del histograma. Sin embargo, para $L = 8$, el pico del histograma se hace más agudo, lo que significa que la solución de Parisi es solo un efecto de tamaño finito en

bajas dimensiones. La tendencia es que al aumentar el tamaño del sistema, la complejidad del parámetro de orden disminuya. Entonces, en el límite termodinámico (cuando L tiende a infinito), $P(q)$ debe ser una delta de Dirac, lo cual indica que para bajas dimensiones el parámetro de orden es único y simple.

Capítulo 5

Recomendaciones

Para próximos estudios e investigación en este campo se recomienda evaluar el método de rotura de simetría para el estudio de la transición de fase, el cual permite dar el salto a las redes neuronales de modo que se pueda utilizar métodos más efectivos para la simulación de transiciones de fase y para encontrar las temperaturas críticas a costa de la complejidad programática que ésta conlleva.

Bibliografía

- [1] Reif, F.: "Fundamentals of Statistical and Thermal Physics". McGraw-Hill, New York, 1965.
- [2] L. E. Reichl, A Modern Course in Statistical Physics. Wiley, 2nd ed., 1998.
- [3] K. Huang, Statistical Mechanics. Wiley, 2nd ed., 1987.
- [4] R. K. Pathria, Statistical Mechanics. Butterworth-Heinemann, 2nd ed., 1996.
- [5] C. Kittel, H. Kroemer, Thermal Physics. W. H. Freeman and Company, 2nd ed., 1980.
- [6] J. M. Yeomans, Statistical Mechanics of Phase Transitions. Clarendon Press - Oxford, 1992.
- [7] P.V. Santos, F.A. da Costa, J.M. de Araújo, Mean-field solution of the Blume–Capel model under a random crystalfield, 2015.
- [8] J. Kotze, Introduction to Monte Carlo methods for an Ising Model of Ferromagnet, 2008.
- [9] M. Newmann, G. Barkena, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Oxford University Press, 1999.
- [10] Viktor Dotsenko, Introduction to the réplica Theory of Disordered Statistical Systems, Cambridge University Press, 2001.
- [11] David Sherrington, Spin Glasses: A Perspective, Rudolf Peierls Centre for Theoretical Physics, 2017.

- [12] Haijun Zhou, Lecture Notes on Statistical Physics and spin Glasses, Institute of Theoretical Physics, The Chinese Academy of Sciences, 2006.
- [13] D. Sherrington, S. Kirkpatrick, Solvable Model of a Spin-Glass, IBM Thomas J. Watson Research Center, Yorktown Heights, New York 10598, 1975.
- [14] W. Gropp, E. Lusk, A. Skjellum, Using MPI, The MIT Press, 2014.
- [15] K. Binder, A. P. Young, Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions, *Rev. Mod. Phys.* 58, 801 (1986).
- [16] K. Binder, Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions, *Zeitschrift für Physik B: Condensed Matter.* 43, 119 (1981).
- [17] Dietrich Stauffer, *Brazilian Journal of Physics*, 30, 787 (2000).
- [18] William Gropp et al., Using MPI, third edition: Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface (Scientific and Engineering Computation) third edition.
- [19] Shan-Ho Tsai, S. R. Salinas, Fourth-Order Cumulants to Characterize the Phase Transitions of a Spin-1 Ising Model, *Brazilian Journal of Physics*, vol.28, October 6, 1997
- [20] Octavio D. Rodriguez Salmon, Justo Rojas Tapia, Multicriticality in the Blume-Capel model under a continuous-field probability distribution, *Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Ciencias Físicas*, November 2, 2018
- [21] Colin G. West, Artur Garcia-Saez, and Tzu-Chieh Wei, Efficient evaluation of high-order moments and cumulants in tensor network states, C. N. Yang Institute for Theoretical Physics and Department of Physics and Astronomy, Stony Brook University, Stony Brook, NY 11794, April 2, 2015

Capítulo 6

Anexos

6.1. Algoritmo Montecarlo tradicional

1. Definir la cantidad de pasos (mcsweeps) a realizar (normalmente es un número muy grande, dependiendo de la capacidad computacional del ordenador).
2. Iniciar un bucle que inicie en 0 y termine en la cantidad de pasos (mcsweeps) indicados.
3. Iniciar un barrido desde el primer espín hasta el último espín de la red, en cada espín realizar una llamada al algoritmo de metrópolis tradicional pasando la temperatura T como argumento.
4. Al final de todos los pasos Montecarlo, se obtendrá una energía final la cual podrá ser procesada según las finalidades de la simulación.

6.2. Algoritmo Metrópolis tradicional

1. Definir la variación de la energía dE del sistema sumando el hamiltoniano H de los espines vecinos al espín en la red.
2. Obtener la temperatura T a partir de los argumentos enviados por el paso montecarlo.
3. Verificar si la variación de energía es mayor o menor que 0.
4. Si es menor que 0, invertir el espín e incrementar la energía total en un valor dE .
5. Si es mayor que 0, generar un número aleatorio y realizar lo siguiente:
 - a. Si este número aleatorio es mayor que $\exp(-dE/T)$, el spin no se invierte.
 - b. Si este número aleatorio es menor que $\exp(-dE/T)$, el espín se invierte y se incrementa la energía en un dE .

6.3. Generador de números aleatorios

```

uint64_t randomGen(uint64_t s[2])
{
    uint64_t s0 = s[0];
    uint64_t s1 = s[1];
    uint64_t result = s0 + s1;
    s1 ^= s0;
    s[0] = ((s0 << 55) | (s0 >> 9)) ^ s1 ^ (s1 << 14);
    s[1] = (s1 << 36) | (s1 >> 28);
    return result;
}

double aleatorio(uint64_t s[2])
{
    uint64_t n,m ;
    m = randomGen(s);
    n = (m>>12)|0x3FF0000000000000;
    return *(double *)&n - 1.0;
}

```


6.4. Generador de la red con estados iniciales aleatorios

```

void Jgen(int *Jij , int L, int L2, uint64_t *semilla){
    int x,y,z,d,J;
    for (x=0;x<L;x=x+1)
        for (y=0;y<L;y=y+1)
            for (z=0;z<L;z=z+1)
                for (d=0;d<=2;d=d+1){
                    if (aleatorio(semilla) < 0.5)
                        J = 1;
                    else
                        J = -1;
                    Jij[3*(L2*x+L*y+z)+d] = J;
                }
    }
}

```