

FACULTAD DE FÍSICA



Trabajo de Fin de Grado

LA TRANSICIÓN DE FASE DE KOSTERLITZ- THOULESS

Juan José Toledo Garrido

Sevilla, 2016-2017

Dirigido por:

José Manuel Romero Enrique

Luis Felipe Fernández Rull

Índice

Resumen.....	4
Abstract	4
Objetivos y Metodología.....	5
Introducción	6
1. Teoría de Landau para transiciones de fase.....	8
1.1. Teoría de Landau para el modelo n-vector	9
1.2. Teoría de Landau para el modelo n=2.....	10
2. Modelo XY	12
2.1. Energía libre elástica para el modelo XY	14
3. Parámetro de orden y función de correlación en el modelo XY	15
4. Defectos topológicos: vórtices	18
4.1. Pares de vórtices.....	19
4.2. Analogía con magnetismo	21
4.3. Rigidez de la onda de espín renormalizada.....	22
5. Transición de Kosterlitz-Thouless.....	24
5.1. Ecuaciones renormalizadas de Kosterlitz	27
6. Simulación	35
Conclusiones	38
Bibliografía	39

Resumen

En el siguiente trabajo vamos a estudiar la Transición de Kosterlitz-Thouless. Se trata de una transición de fases presente en el Modelo XY, un sistema bidimensional formado por espines fijos que rotan libremente y que interactúan con sus vecinos más cercanos. La importancia de dicha teoría radica en que se había demostrado que no cumplía los requisitos de transiciones de fases predichos en la teoría de Landau de parámetros de orden y ruptura de simetría, pese a que sí se esperaba una transición para el sistema, así como el papel crucial en dicha transición de los defectos topológicos del material, llamados vórtices. Lo que ocurre en esta transición es que, al alcanzar la temperatura crítica, pasamos de una fase de baja temperatura en la cual los vórtices forman parejas de vórtice y anti-vórtice a una fase donde encontramos vórtices desapareados que actúan como cargas libres en un gas de Coulomb. Esta teoría fue pionera en el estudio de la topología y llevó a los dos físicos que la formularon a ganar el Premio Nobel de Física en 2016.

Abstract

In the following project, the Transition of Kosterlitz-Thouless is going to be tackled. It is based on a transition of phases of the Model XY, a bidimensional system formed by steady spins that rotate and interact with its nearest neighbors. The importance of this theory lies in the fact that it has been proved that the phase-transition requirements noted by the Parameters of Order and Spontaneous Breaking Symmetry Theory, by Landau, had not been fulfilled, even though a transition for the system was expected, as well as the crucial labor of the topologic defects of the material, known as vortices. The main deal in this transition is that, reaching the critical heat, it goes from a low heat phase where the vortices pair with anti-vortices; to a phase where unbounded vortices act like free charges in a Coulomb gas. This pioneer theory in the research of topology made the two physics who formulated it to win the Physics Nobel Prize in 2016.

Objetivos y Metodología

Nuestro primer objetivo es describir el Modelo XY y demostrar que no cumple las condiciones de transición de fase de Landau. Para estudiar esto definiremos primero la teoría de transiciones de fases de Landau, así como lo que esperamos que ocurra en un sistema en el que el parámetro de orden tiene dos dimensiones como es el nuestro. Pasaremos a describir el Modelo XY partiendo de su Hamiltoniano y de su energía libre. Una vez realizado esto vamos a comprobar si cumple la teoría de Landau, analizando el parámetro de orden del sistema y la correlación de espines.

El segundo objetivo de este trabajo será describir la transición de Kosterlitz-Thouless, así como comprobar su validez. Comenzaremos describiendo los defectos topológicos del sistema, así como el efecto que tienen en la energía libre de este. Una vez realizado esto hallaremos, a partir de la energía libre de un vórtice, que existen dos fases estrechamente relacionadas con estos defectos. Haciendo uso del Hamiltoniano de un vórtice y de las funciones renormalizadas de Kosterlitz analizaremos más profundamente la transición. Por último, para dar muestra de la validez de la teoría expuesta, vamos a realizar una serie de simulaciones siguiendo el método de Monte Carlo a distintas temperaturas.

Introducción

En octubre de 2016 se hizo entrega del Premio Nobel de Física a Michael Kosterlitz, David J. Thouless y Duncan M. Haldane por sus estudios teóricos de las fases topológicas de la materia y de las transiciones de estas. A los dos primeros se les concedió el premio por el descubrimiento de la denominada “Transición de Kosterlitz-Thouless”.

Antes de explicar las aplicaciones que tuvo la Transición de Kosterlitz-Thouless vamos a ver qué otros trabajos llevaron a estos físicos a ganar el Premio Nobel. Tanto Thouless como Haldane han sido premiados por sus investigaciones en la conductancia Hall cuántica. Describieron fases de materia, que no podían ser identificadas por la ruptura de simetría, usando conceptos topológicos. A su vez, Haldane ha sido premiado por su teoría de cadenas de espines, donde los efectos de la topología son notables. Como vemos, la Transición de Kosterlitz-Thouless abrió un camino de estudios sobre la materia donde la topología cumplía un papel crucial.

Veamos ahora más detalladamente las aplicaciones que tuvo la Transición de Kosterlitz-Thouless. Por un lado tenemos la superfluidez, un estado de la materia donde no existe viscosidad y que se describe por la condensación de Bose-Einstein. Por otro lado tendremos la superconductividad, propiedad de algunos materiales que conducen corriente eléctrica sin presentar resistencia o pérdida de energía. Es descrita por la teoría BCS, donde pares de electrones llamados “pares de Cooper” son los responsables de dicha propiedad. Pese a que ambas teorías describen con éxito estas fases de la materia, presentan problemas para ser estudiadas por la teoría de Landau de ruptura de simetría y parámetros de orden para sistemas de una y dos dimensiones.

Antes de continuar vamos a definir un concepto importante en la teoría de transiciones de fase, el de “clase universal”. Según este, los sistemas con el mismo número de dimensiones y con igual naturaleza del parámetro de orden son sistemas de la misma clase universal y podrán ser estudiados de la misma forma. Por un lado tenemos el ya descrito Modelo XY, donde el parámetro de orden será la magnetización; es decir, el espín medio del sistema:

$$m = \langle S_x \rangle = S_0 \langle \cos \theta \rangle$$

Donde θ es el ángulo que forma el espín con el eje X. Debemos ahora ver cuál será el parámetro de orden para un superconductor y un superfluido. Mientras que el causante del primero es el par de Cooper, el otro se debe a la condensación de bosones. Por lo tanto, tomaremos su parámetro de orden como:

$$\varphi = \sqrt{\rho_s} e^{i\theta}$$

Siendo este la función de onda del par de Cooper, o bien de los bosones. El parámetro de orden de estos sistemas depende de un ángulo θ , que no es otra cosa que la fase de la función de onda. Por lo tanto, se cumplirá el concepto de clase universal entre un sistema superfluido, un sistema superconductor y el Modelo XY siempre que hablemos de sistemas bidimensionales. Es por esto que la Transición de Kosterlitz-Thouless tuvo

grandes aplicaciones en la descripción de la superfluidez y la superconductividad, así como para materiales magnéticos de dos dimensiones.

Cabría preguntarnos, ¿sigue siendo novedosa esta teoría? Volviendo al concepto de clase universal, debemos tener en cuenta que funciona para una región crítica vecina de la temperatura de transición. No obstante, gracias a la simulación cuántica, podemos usar el mismo Hamiltoniano para varios sistemas. Usando este método se ha encontrado la transición de Kosterlitz-Thouless en un gas de átomos de ^{87}Rb en condensación de Bose-Einstein.

1. Teoría de Landau para transiciones de fase

Un sistema físico es homogéneo cuando una propiedad cualquiera tiene el mismo valor en cualquier punto de este. Es natural encontrar sistemas que se encuentran divididos en diferentes partes homogéneas que se encuentran en contacto entre ellas. A cada una de estas partes se la llama fase.

Sean A y B, dos fases que coexisten en equilibrio. Deben cumplirse las siguientes propiedades:

- 1- La temperatura de A y de B debe tener el mismo valor:

$$T_A = T_B = T$$

- 2- La presión en ambas debe ser igual:

$$p_A = p_B = p$$

- 3- El potencial químico también debe ser el mismo para una y otra:

$$\mu_A(T, p) = \mu_B(T, p)$$

Como definimos la energía libre de Gibbs como $G = \mu N$, siendo N el número de partículas y considerando éste constante, obtenemos por la anterior propiedad que la energía libre de Gibbs debe ser igual para las dos fases:

$$G_A(T, p) = G_B(T, p)$$

Cabe definir los dos tipos de transiciones de fase según la clasificación de Ehrenfest: Por un lado, nos encontramos una transición de fase de primer orden donde la energía libre $G(T, P)$ es continua en la transición pero no así su derivada respecto a T y p. En este tipo de transiciones la capacidad calorífica tendrá un valor infinito. Por otro lado, una transición de fase de segundo orden es aquella donde $G(T, P)$ es continua en la transición, sus derivadas de primer orden lo son también, pero sus derivadas de segundo orden presentan divergencias. En algunos casos la capacidad calorífica puede ser discontinua, teniendo un valor finito.

1.1. Teoría de Landau para el modelo n-vector

Sea una transición de fase de segundo orden. $T_0(p)$ será la temperatura de la línea de coexistencia de dos fases en equilibrio:

- 1- Fase desordenada: fase simétrica.
- 2- Fase ordenada: fase no simétrica.

Definimos un parámetro que mida el orden de la fase en la que nos encontramos, de modo que se anule en la fase desordenada y sea distinto de cero en la fase ordenada. Lo llamamos parámetro de orden y lo escribiremos como \vec{m} . Este será un vector de dimensión n. Escribiremos m para denotar su módulo y \hat{m} para hacer referencia al valor de este en el equilibrio entre fases.

En lugar de trabajar con la energía libre de Gibbs lo haremos con la energía libre de Helmholtz, lo cual es más común para el tipo de sistemas que vamos a tratar posteriormente. Escribiendo ésta como potencias del parámetro de orden obtenemos:

$$F(T, p) = F_0(T, p) + \alpha(T, p)m + A(T, p)m^2 + C(T, p)m^3 + B(T, p)m^4 + \dots \quad (1.1)$$

En el equilibrio la energía libre presentará un mínimo por lo que su primera derivada debe ser nula y su segunda derivada debe ser positiva:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \eta}\right)_{m=\hat{m}} = 0 \quad (1.2)$$

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2}\right)_{m=\hat{m}} > 0 \quad (1.3)$$

Al introducir la igualdad (1.1) en la condición (1.2) vemos que α debe ser nulo. A su vez, para que exista una línea de coexistencia entre fases y no un único punto debe cumplirse que $C=0$. Los valores con índice mayor a 4 son despreciables, pues el parámetro de orden cerca del equilibrio debe ser cercano a cero. Siguiendo este razonamiento tendremos:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \eta}\right)_{m=\hat{m}} = 2A(T, p)\hat{m} + 4B(T, p)\hat{m}^3 = 0 \quad (1.4)$$

Si nos encontramos en la fase desordenada y el parámetro de orden es nulo la ecuación (1.4) se cumple siempre. Si, por el contrario, nos encontramos en la fase ordenada, el parámetro de orden en el equilibrio tiene un valor:

$$\hat{m}^2 = -\frac{A(T,p)}{2B(T,p)} \quad (1.5)$$

En la teoría que hemos tratado asumimos que $A(T,p)$ no tiene singularidad en el punto crítico, por lo que podemos expandirlo en potencias de la distancia hasta este punto:

$$A(T,p) = a(p)(T - T_0) \quad (1.6)$$

De modo que, si T es mayor que la temperatura de la línea de coexistencia tendremos una fase desordenada y si es menor tendremos una fase ordenada.

1.2. Teoría de Landau para el modelo $n=2$

Tomaremos ahora como parámetro de orden un vector de $n=2$:

$$\vec{m} = m_x \vec{x} + m_y \vec{y} \quad (1.7)$$

La ecuación (1.4) se cumplirá si el módulo del parámetro de orden es cero, es decir, si:

$$m_x = m_y = 0 \quad (1.8)$$

También se cumplirá si tenemos la igualdad (1.5), siendo en este caso la fase ordenada:

$$\hat{m}^2 = m_x^2 + m_y^2 = -\frac{2a(T-T_0)}{B} \quad (1.9)$$

Introducimos (1.6) en el resultado de la segunda derivada para cada fase, obtenemos:

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial m^2}\right)_{m=\hat{m}=0} = 2a(p)(T - T_0) > 0 \rightarrow \text{Fase desordenada para } T > T_0$$

Si se cumple (1.9):

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial m^2}\right)_{m=\hat{m}=-\frac{2a(T-T_0)}{B}} = -4a(p)(T - T_0) > 0 \rightarrow \text{Fase ordenada para } T < T_0$$

Por lo tanto, observaremos una transición entre una fase ordenada de baja temperatura y una desordenada de alta temperatura para un parámetro de orden de dos

dimensiones. En el caso del Modelo XY el parámetro de orden se tratará de la magnetización del sistema, como indicamos en la Introducción.

En la siguiente gráfica podemos observar la energía libre del sistema en la fase desordenada. Para la fase ordenada tendremos un resultado parecido, pero si observamos la gráfica a una escala menor, veremos que su base es como “el culo de una botella de vino”.

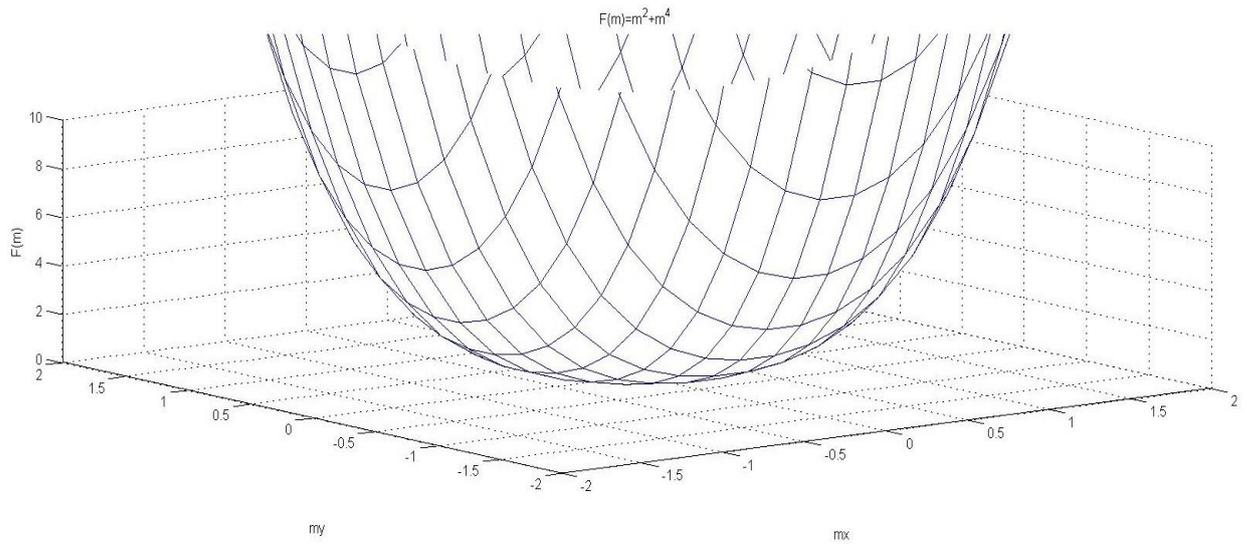


Fig. 1.1- Energía libre en la fase desordenada.

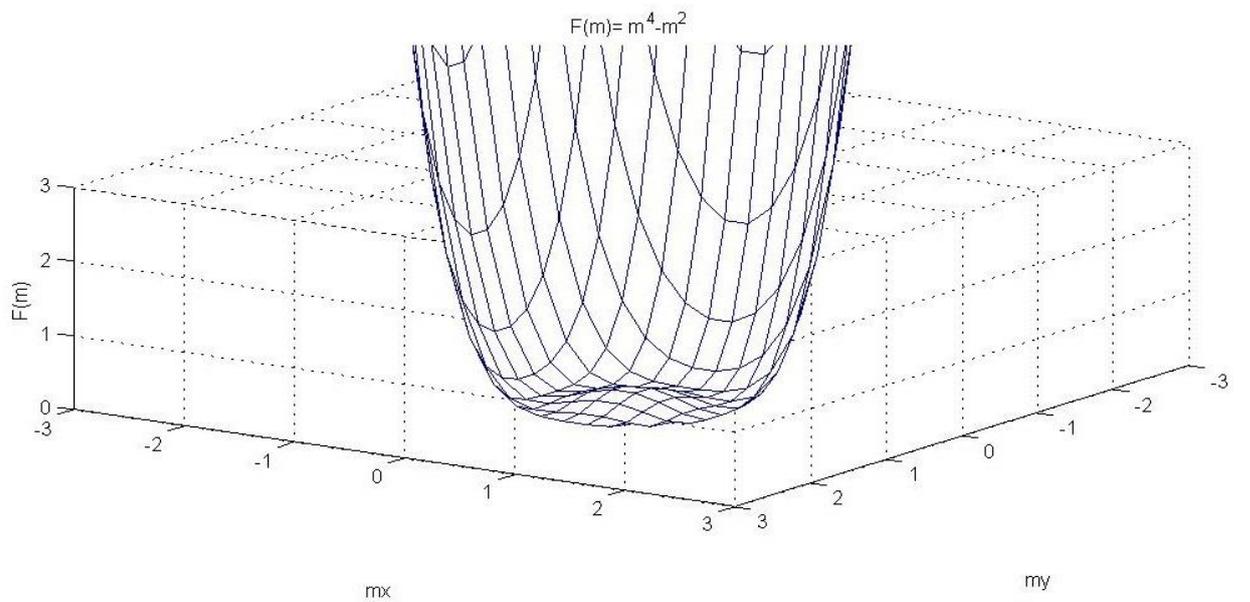


Fig. 1.2- Energía libre en la fase ordenada.

2. Modelo XY

Vamos a describir el Modelo XY: tenemos una red cuadrada infinita formada por espines fijos que pueden rotar libremente. La energía del sistema vendrá dada por la interacción de los espines con sus vecinos más cercanos en la red. Es, pues, un modelo similar al de Ising pero con los espines pudiendo tomar cualquier dirección en lugar de tener un valor de 1 ó -1. El hamiltoniano del sistema será:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (2.1)$$

Siendo la suma para los vecinos cercanos y θ el ángulo que forma el espín respecto al eje x. Asumimos que la dirección del espín varía lentamente al desplazarnos por la red, teniendo una dependencia:

$$\theta \approx \theta(\vec{r})$$

Vemos que para vecinos próximos, sus ángulos tendrán un valor parecido y por lo tanto su diferencia es cercana a cero. Podremos escribir el coseno como una serie de potencias en (2.1):

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \approx -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(1 - \frac{(\theta_i - \theta_j)^2}{2} + \dots \right) = -J2N + \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\theta_i - \theta_j)^2 \quad (2.2)$$

El primer término; al que denominaremos H_0 , se debe a que tenemos una red cuadrada de N espines. Para calcular el segundo miembro tenemos en cuenta que un espín interactúa con sus cuatro vecinos más cercanos separados por una distancia arbitraria que llamaremos "a", mostrados en la siguiente figura:

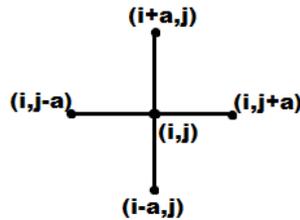


Fig. 2.1 – Vecinos próximos en el Modelo XY.

De modo que, teniendo en cuenta la dependencia del ángulo respecto a la posición, podemos escribir:

$$\theta_{(i,j)} - \theta_{(i,j+a)} = -\frac{\partial\theta}{\partial x}(x_{(i,j)} - x_{(i,j+a)}) = -a\frac{\partial\theta}{\partial x} \quad (2.3)$$

Hacemos lo propio para el resto de vecinos. Lo introducimos en (2.2), teniendo en cuenta que la interacción entre dos vecinos será contada dos veces, por lo que hay que dividirla entre dos. Obtenemos:

$$H = H_0 + \frac{J}{4} \sum_i \sum_k^4 (\theta_i - \theta_{jk})^2 = H_0 + \frac{J}{4} \sum_i a^2 \left\{ 2 \left(\frac{\partial\theta}{\partial x} \right)_i^2 + 2 \left(\frac{\partial\theta}{\partial y} \right)_i^2 \right\} \quad (2.4)$$

Esto nos lleva al siguiente hamiltoniano continuo:

$$H = H_0 + \frac{J}{2} \int d\vec{r} (\vec{\nabla}\theta)^2 \quad (2.5)$$

Podemos realizar ahora el tratamiento de campo medio, que consiste en dividir este hamiltoniano en la suma entre el hamiltoniano con un mínimo local más el debido a las fluctuaciones respecto al mínimo. Para ver cómo actúa θ en el mínimo local vamos a hacer uso del principio variacional para H . Según este, cuando el hamiltoniano presenta un mínimo, si tenemos dos caminos separados infinitesimalmente que empiezan y terminan en el mismo punto, la variación del hamiltoniano respecto a estos caminos debe ser nula. Esto ocurre siempre que uno de los dos caminos es el que minimiza la distancia recorrida (ver Fig. 2.2). Se formula del siguiente modo:

$$\delta H = H(\theta + \delta\theta) - H(\theta) = 0 \quad (2.6)$$

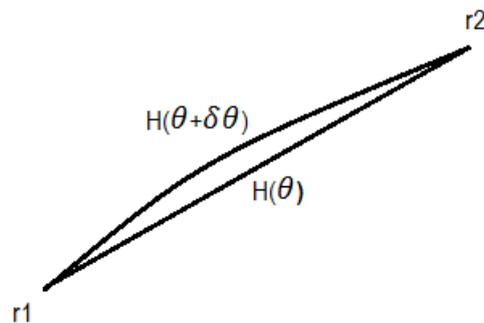


Fig. 2.2 – Ilustración del Ppo. Variacional.

De donde obtenemos:

$$H(\theta + \delta\theta) = \int_{r_1}^{r_2} d\vec{r} (\vec{\nabla}(\theta + \delta\theta))^2 = \int_{r_1}^{r_2} d\vec{r} \left((\vec{\nabla}\theta)^2 + (\vec{\nabla}\delta\theta)^2 + 2(\vec{\nabla}\theta)(\vec{\nabla}\delta\theta) \right) \quad (2.7)$$

Introduciendo (2.7) en (2.6) se tiene:

$$\delta H = H(\theta + \delta\theta) - H(\theta) = \int_{r_1}^{r_2} d\vec{r} \left((\vec{\nabla}\delta\theta)^2 + 2|\vec{\nabla}\theta||\vec{\nabla}\delta\theta| \right) \quad (2.8)$$

Debido a que $\delta\theta$ y sus derivadas son mucho más pequeñas que θ , asumiremos que el primer término de (2.8) se anulará. Para evaluar el segundo término integramos por partes:

$$\delta H = 2 \left([(\delta\theta)(|\vec{\nabla}\theta|)]_{r_1}^{r_2} - \int_{r_1}^{r_2} d\vec{r} (\delta\theta)(\nabla^2\theta) \right) = 0 \quad (2.9)$$

El primer término se anulará, puesto que $\delta\theta$ es cero en r_1 y r_2 . El segundo término será cero siempre que se cumpla que:

$$\nabla^2\theta = 0 \quad (2.10)$$

Tendremos un mínimo local de energía cuando el laplaciano de θ sea nulo, es decir, cuando se cumpla la ecuación de Laplace para dicho ángulo.

2.1. Energía libre elástica para el modelo XY

Volviendo al punto 1.2, vimos que el mínimo de la energía libre en la fase ordenada ocurre en el círculo de la base del “culo de una botella de vino”. El radio de este vendrá dado por el módulo del parámetro de orden, mientras que la posición en el círculo estará dada por el ángulo ϑ . No debemos confundir este ángulo con θ , que hace referencia a la orientación de un espín cualquiera, mientras ϑ lo hace para la orientación del parámetro de orden; es decir, de $\langle S_x \rangle$. Pequeñas variaciones en este ángulo no modificarán el valor de la energía libre. Buscamos escribir la energía libre en términos de $\vec{\nabla}\vartheta$, al igual que hicimos para el hamiltoniano. La expresión no tendrá términos lineales puesto que variaciones del ángulo no cambiarán la energía. Por lo tanto:

$$F_{el} = \frac{1}{2} \int d\vec{r} \rho_s (\vec{\nabla}\vartheta)^2 \quad (2.11)$$

Donde llamaremos a ρ_s "rigidez de onda de espín". Esta nos indica la cantidad de energía libre necesaria para aplicar un giro a los espines. Podemos escribir el hamiltoniano respecto a esta constante si lo describimos, al igual que la energía libre, en términos de θ en lugar de en términos de ϑ . Esto ya lo hicimos anteriormente, obteniendo la ecuación (2.5), lo que nos daría un hamiltoniano:

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \int \rho'_s[s(\vec{r})] d\vec{r} (\vec{\nabla}\theta)^2 \quad (2.12)$$

Donde introducimos $\rho'_s[s(\vec{r})]$, que depende del espín y sería un valor local de la rigidez que no incluiría los efectos de las fluctuaciones. Es trivial ver que debe coincidir con la constante J introducida anteriormente.

Según la teoría del campo medio:

$$F[\langle \vec{s}(\vec{r}) \rangle] = H[\langle \vec{s}(\vec{r}) \rangle] \quad (2.13)$$

Teniendo esto en cuenta vemos que para pequeñas fluctuaciones; es decir, para baja temperatura, se cumple:

$$\rho'_s[s(\vec{r})] = \rho_s = J \quad (2.14)$$

Trabajando en la ecuación (2.11) y siguiendo el procedimiento descrito en el anterior apartado llegaremos a la misma ecuación de Laplace que minimiza la energía para el caso de la energía libre elástica.

3. Parámetro de orden y función de correlación en el modelo XY

[3],[4] Queremos estudiar la transición de fases que presenta el sistema siguiendo la teoría de Landau, para ello vamos a observar la magnetización en este. Puesto que escogemos el origen de coordenadas de forma arbitraria, tendremos:

$$\langle S_x \rangle = \langle \cos\theta(\vec{r}) \rangle = \langle \cos\theta(0) \rangle \quad (3.1)$$

Realizamos transformadas de Fourier, teniendo en cuenta que el área es infinita:

$$\theta(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \hat{\theta}(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} \hat{\theta}(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (3.2)$$

Para calcular la media de la proyección de espín necesitaremos la transformada del hamiltoniano:

$$\vec{\nabla}\theta = \frac{1}{A}\sum_{\vec{k}}(-i\vec{k})\hat{\theta}(\vec{k})e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (3.3)$$

Introduciendo este término en el hamiltoniano (2.5):

$$H = H_0 + \frac{J}{2A^2}\sum_{\vec{k}}(-\vec{k}'\vec{k})\hat{\theta}(\vec{k})\hat{\theta}(\vec{k}')\int d\vec{r}e^{-i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{r}} \quad (3.4)$$

Debemos considerar las condiciones de contorno periódicas de la red:

$$e^{i\vec{q}0} = e^{i\vec{q}(mL_x\hat{x}+mL_y\hat{y})} \quad (3.5)$$

Que nos llevan a que la integral del hamiltoniano sea igual a:

$$\int d\vec{r}e^{-i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{r}} = A\delta(\vec{k}, -\vec{k}') \quad (3.6)$$

Tendremos, pues:

$$H = H_0 + \frac{J}{2A}\sum_{\vec{k}}(k^2)\hat{\theta}(\vec{k})\hat{\theta}(-\vec{k}) = H_0 + \frac{J}{2(2\pi)^2}\int d\vec{k}(k^2)\hat{\theta}(\vec{k})\hat{\theta}(-\vec{k}) \quad (3.7)$$

Podemos proceder ahora al cálculo del valor esperado de la proyección de espín:

$$\langle S_x \rangle = \frac{\int d\vec{r}\cos\theta(0)e^{-\beta H}}{\int d\vec{r}e^{-\beta H}} = \text{Re}\left(\frac{\int d\vec{r}e^{i\theta(0)}e^{-\beta H}}{\int d\vec{r}e^{-\beta H}}\right) \quad (3.8)$$

Siendo:

$$-\beta H + i\theta(0) = -\beta H_0 - \frac{\beta J}{2V}\sum_{\vec{k}}k^2\left(\hat{\theta}(\vec{k})\hat{\theta}(-\vec{k}) - \frac{2i}{\beta Jk^2}\theta(\vec{k})\right) \quad (3.9)$$

Escribiremos el último término como

$$\frac{2i}{\beta Jk^2}\theta(\vec{k}) = \frac{i}{\beta Jk^2}\left(\theta(\vec{k}) + \theta(-\vec{k})\right) \quad (3.10)$$

Al introducir (3.10) en (3.9) podemos escribir esta expresión como:

$$-\beta H + i\theta(0) = -\beta H_0 - \frac{\beta J}{2A}\sum_{\vec{k}}k^2\left\{\left(\hat{\theta}(\vec{k}) - \frac{i}{\beta Jk^2}\right)\left(\hat{\theta}(-\vec{k}) - \frac{i}{\beta Jk^2}\right) + \frac{1}{(\beta J)^2k^4}\right\} \quad (3.11)$$

Volvemos a (3.8). El primer término de (3.11) desaparecerá debido a que también aparece en el divisor. Pasa lo mismo con el primer término del sumatorio pues, si bien en el divisor de (3.8) no está centrado en el mismo punto, esto no afectará a la integral. Obtenemos, por lo tanto:

$$\langle S_x \rangle = \exp\left(\left(-\frac{k_B T}{2JV}\right)\sum_{\vec{k}}\frac{1}{k^2}\right) = \exp\left(\left(-\frac{k_B T}{2J}\right)\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\vec{k}\frac{1}{k^2}\right) \quad (3.12)$$

Evaluamos la integral en (3.10):

$$\int d\vec{k}\frac{1}{k^2} = 2\pi\int_{\pi/L}^{\pi/a} dk\frac{1}{k} = 2\pi\ln\left(\frac{L}{a}\right) \quad (3.13)$$

Teniendo en cuenta que L tiende a infinito, tendremos que (3.13) diverge. Al introducir esto en (3.8) vemos que:

$$\langle S_x \rangle = 0 \quad (3.14)$$

El parámetro de orden es nulo para cualquier temperatura. Esto nos dice que nos encontraremos en una fase desordenada en todo momento, sin que exista pues una transición de fase como predecía la teoría de Landau.

Procedemos ahora a calcular la función de correlación entre dos espines separados a una gran distancia, que viene descrita como:

$$\langle S_x S_{x'} \rangle = \langle \cos\theta(\vec{r}) \cos\theta(0) \rangle = \text{Re} \langle \exp(i(\theta(\vec{r}) - \theta(0))) \rangle \quad (3.15)$$

Siguiendo el procedimiento llevado a cabo para el cálculo del parámetro de orden obtenemos el siguiente resultado:

$$\langle S_x S_{x'} \rangle = \exp(-g(r)) \quad (3.16)$$

Donde:

$$g(r) = \frac{T}{J(2\pi)^2} \int d\vec{k} \frac{1 - e^{-ikr\cos(\theta)}}{k^2} \quad (3.17)$$

Como buscamos la correlación entre espines a larga distancia, podemos decir que r tiende a infinito, por lo tanto tendremos el siguiente resultado:

$$g(r) = \frac{T}{J2\pi} \ln\left(\frac{r}{L}\right) \quad (3.18)$$

Y, por lo tanto, la función de correlación va a ser:

$$\langle S_x S_{x'} \rangle = \left(\frac{r}{L}\right)^{-\frac{T}{J2\pi}} \quad (3.19)$$

La correlación depende algebraicamente de r con un exponente que tendrá cambios continuos con la temperatura. Este tipo de dependencia es la que esperamos encontrar cuando la temperatura se acerca a la temperatura crítica de una transición de fase. Como vemos, esto ocurre para cualquier temperatura que no sea nula.

En resumen, hemos encontrado que tenemos un parámetro de orden distinto de cero para ninguna temperatura no nula y es por ello que esperamos que el sistema se

encuentra en fase desordenada para cualquier temperatura, tenemos una función de correlación de largo alcance con dependencia algebraica para toda temperatura distinta de cero, algo que se espera para temperaturas cercanas a la correspondiente al punto crítico. Esto plantea un problema pues, además de contradecir la teoría de transiciones de fases de Landau, se había comprobado por simulación que estos sistemas sí que presentaban una transición entre dos fases distintas. Cabría ahora preguntarse qué es lo que origina esta transición, si no es el parámetro de orden. De los causantes de la transición es sobre lo que hablaremos en el siguiente punto.

4. Defectos topológicos: vórtices

Se había comprobado que el Modelo XY presentaba defectos topológicos, por lo que el estudio para estudiar sus efectos en el sistema es el siguiente paso más lógico. Vamos, por lo tanto, a describir los defectos que presenta el Modelo XY.

Un defecto topológico se caracteriza por una región donde el orden es destruido por una variable elástica que cambia lentamente en el espacio. En el caso del modelo XY recibe el nombre de “vórtices”.

Recordemos la ecuación (2.10) donde veíamos que teníamos un mínimo local de energía cuando se cumplía que el Laplaciano del ángulo de los espines tenía un valor nulo. Esto puede ocurrir en dos casos:

- 1- Si $\theta(r)=cte$.
- 2- Cuando tenemos vórtices en la dirección del campo.

Veamos esta última con mayor detalle. Un vórtice tendrá la forma de la siguiente figura:

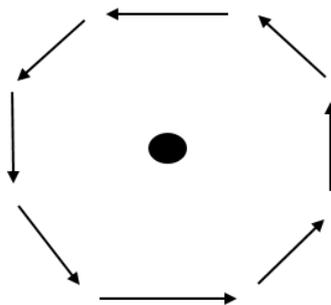


Fig. 4.1. Vórtice

Como vemos, tendremos una singularidad en el centro del vórtice, donde el ángulo no estará definido y el promedio de espines valdrá cero. El ángulo se incrementará un valor de 2π al realizar una vuelta completa al vórtice.

Las condiciones de contorno de un vórtice deben ser:

- 1- Para todas las curvas que encierren el centro del vórtice:

$$\oint \nabla\theta(\vec{r})d\vec{l} = 2\pi n \quad (4.1)$$

- 2- Para aquellas curvas que no lo encierren:

$$\oint \nabla\theta(\vec{r})d\vec{l} = 0 \quad (4.2)$$

Al número n se le llamará “carga topológica” y será la que caracterice el vórtice. Hemos asumido que θ es continuo en todo el espacio, podemos escribirlo en coordenadas polares ($\mathbf{r}=(r, \varphi)$) de forma que tendremos:

$$\theta(\vec{r}) = n \cdot \varphi + C \quad (4.3)$$

Vamos ahora a calcular la energía de un vórtice, para ello necesitamos conocer la divergencia de $\theta(\mathbf{r})$:

$$\vec{\nabla}\theta = \frac{n}{r}\vec{\varphi} \quad (4.4)$$

Se cumpliría así el Laplaciano que obtuvimos en (2.10). Procedemos a realizar el cálculo de la energía usando la ecuación (2.5):

$$E_{vor} = E_0 + \frac{J}{2}a^2 \int d\vec{r}(\vec{\nabla}\theta)^2 = E_0 + J\pi a^2 n^2 \int_a^L \frac{rdr}{r^2} = E_0 + J\pi a^2 n^2 \ln\left(\frac{L}{a}\right) \quad (4.5)$$

La energía depende de L , que tiende a infinito, y por lo tanto diverge. Se necesitaría energía infinita para destruir un vórtice y no es posible que una fluctuación pueda destruirlo. Esto puede explicarse simplemente viendo la figura anterior: no lograríamos hacer desaparecer el vórtice por deformaciones continuas de los espines, ya que estos no pueden ser distorsionados de forma que estén alineados sin que interfieran con otros espines próximos. Por esta propiedad este tipo de vórtices son topológicamente estables.

4.1. Pares de vórtices

Podemos pensar que, además de vórtices singulares, encontraremos vórtices separados por pequeñas distancias. Vamos a considerar un par de vórtices en el que uno tendrá

una carga topológica opuesta al otro, llamaremos a esto “par vórtice y anti-vórtice”. Mientras que para el vórtice se cumplirá la condición de contorno (4.1), para el anti-vórtice tendremos:

$$\oint \nabla\theta(\vec{r})d\vec{l} = -2\pi n \quad (4.6)$$

De modo que, si escogemos un camino que encierre al par tendremos una circulación igual a cero. Podemos realizar distorsiones en los espines de modo que el par se acerque y los vórtices se aniquilen. Es por ello que, a diferencia de un único vórtice, un par vórtice y anti-vórtice no requerirá de un gran coste de energía para llegar al estado uniforme con espines alineados. Además, notar en la siguiente figura cómo para distancias separadas del centro de los vórtices los espines ya se encuentran alineados.

Procederemos ahora a realizar el cálculo de la energía de interacción del par:

$$E_{2vor} = 2E_0 + \frac{J}{2} \int d\vec{r} (\vec{\nabla}\theta_1 + \vec{\nabla}\theta_2)^2 = 2E_0 + \frac{J}{2} \int d\vec{r} (\vec{\nabla}\theta_1)^2 + \frac{J}{2} \int d\vec{r} (\vec{\nabla}\theta_2)^2 + J \int d\vec{r} \vec{\nabla}\theta_2 \vec{\nabla}\theta_1 = 2E_0 - 2\pi J n^2 \ln\left(\frac{R}{a}\right) \quad (4.7)$$

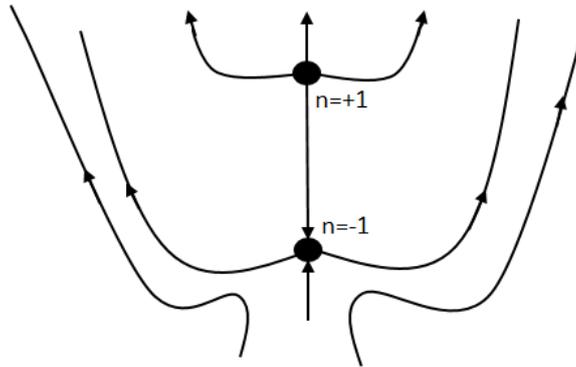


Fig. 4.2. Par vórtice anti-vórtice.

Donde R es la distancia entre los centros del vórtice y el anti-vórtice. El segundo término de la segunda igualdad se cancela con el tercero, eliminándose así la divergencia de la energía que teníamos para un único vórtice debido a su dependencia del logaritmo neperiano de L, tendiendo este a infinito. A diferencia del caso de un único vórtice, la energía de un par sí es finita; por lo que crearlo y destruirlo sí sería posible. Cabría

denotar también que el signo negativo de la energía; debido a que cada vórtice tenía una carga topológica de signo opuesto, nos dice que la interacción entre ellos es atractiva.

4.2. Analogía con magnetismo

Vamos a introducir una nueva anotación a partir de aquí:

$$\vec{v}_s = \vec{\nabla}\theta$$

Al igual que al realizar un camino alrededor del centro del vórtice obteníamos un valor para la integral de $2\pi n$, cabe recordar que al hacer lo propio para el campo magnético \mathbf{H} alrededor de una corriente lineal de carga I se tenía la siguiente relación:

$$\oint \vec{H} d\vec{l} = 2\pi I \quad (4.8)$$

Además, debemos destacar que la condición de minimización de energía que nos dice que el Laplaciano de θ debe valer cero también tiene análogo magnético:

$$\vec{\nabla}^2 \vec{v}_s = 0 \leftrightarrow \vec{\nabla}^2 \vec{B} = 0 \quad (4.9)$$

Es natural, por lo tanto, introducir un campo que actúe como la densidad superficial de corriente \mathbf{J} :

$$\oint \vec{v}_s d\vec{l} = \int \vec{\nabla} \wedge \vec{v}_s d\vec{S} = \int \vec{m} d\vec{S} = 2\pi \sum n_\alpha \quad (4.10)$$

Donde el sumatorio se debe a que podemos estar encerrando más de un vórtice y donde hemos añadido el campo:

$$\vec{m} = \vec{\nabla} \times \vec{v}_s \quad (4.11)$$

Este campo debe valer cero en el centro del vórtice. Su divergencia será nula. Para un vórtice, tomando una línea paralela al vector unitario en la dirección z tendremos un análogo a la densidad de corriente de un cable:

$$\vec{m} = 2\pi z n \delta^{(2)}(\vec{r}_{vor} - \vec{r}) \quad (4.12)$$

Podemos escribir ahora la energía en términos de este campo, tal y como se hace para el magnetismo en términos de la densidad de corriente:

$$\vec{\nabla} \times \vec{m} = \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{v}_s) = -\nabla^2 \vec{v}_s \quad (4.13)$$

Haciendo uso de (4.9) podemos ver la dependencia de \mathbf{v}_s con \mathbf{m} :

$$\vec{v}_s = \vec{\nabla} \times \int d\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') \vec{m}(\vec{r}') \quad (4.14)$$

Donde $G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ es la función de Green para el menos Laplaciano de en dos dimensiones.

Procedemos ahora a introducir este término en la energía del vórtice:

$$E = \frac{1}{2} J \int d\vec{r}' \int d\vec{r} \vec{m}(\vec{r}) G(\vec{r} - \vec{r}') \vec{m}(\vec{r}') \quad (4.15)$$

O, en el espacio de Fourier:

$$E = \frac{1}{8\pi^2} J \int d\vec{k} \frac{\vec{m}(\vec{k}) \vec{m}(\vec{k}')}{k^2} \quad (4.16)$$

4.3. Rigidez de la onda de espín renormalizada

Una vez descrito qué es un vórtice y su energía, vamos a ver cómo afecta este a la energía libre del sistema. Para ello vamos a estudiar la rigidez de la onda de espín renormalizada por vórtices y otras fluctuaciones. Lo escribiremos igual que lo hicimos con anterioridad, pero añadiendo un superíndice R.

Primero, hacer notar que si exigimos que θ sea nulo en los bordes del sistema, tendremos que aunque este ángulo fluctúe, el valor medio de su gradiente debe ser cero:

$$\int d\vec{r} \langle \vec{\nabla} \theta \rangle = \int d\vec{S} \langle \theta \rangle = 0 \quad (4.17)$$

Escribiremos el valor de este ángulo respecto a un factor nulo en los bordes del sistema y de un parámetro externo \mathbf{v} :

$$\theta(\vec{r}) = \theta_0(\vec{r}) + \vec{v} \cdot \vec{r} \quad (4.18)$$

Calculemos ahora el valor del gradiente del ángulo ϑ , que hacía referencia al parámetro de orden:

$$\vec{\nabla} \vartheta = \frac{1}{A} \int d\vec{r} \langle \vec{\nabla} \theta \rangle = \frac{1}{A} \int d\vec{r} (\langle \vec{\nabla} \theta_0 \rangle + \vec{v}) = \vec{v} \quad (4.19)$$

Podemos ver la diferencia entre la energía libre dependiente de este parámetro externo y aquella donde es cero haciendo uso de la ecuación (2.11) y teniendo en cuenta que ahora tendremos una rigidez de onda de espín renormalizada:

$$F(\vec{v}) - F(0) = \frac{1}{2} \rho_s^R A v^2 \quad (4.20)$$

Procedamos al cálculo más detallado de la energía libre, pero antes notar que haremos una distinción en la ya descrita \mathbf{v}_s , que no incluirá el término externo \mathbf{v} . Vamos a descomponer esta en dos partes: una parte analítica longitudinal debida a las ondas de espín y otra singular transversal producto de los vórtices:

$$\vec{v}_s = \vec{v}_s^l + \vec{v}_s^t \quad (4.21)$$

La parte longitudinal tendrá una media espacial nula, debido a que el ángulo al que está referida es cero en los bordes del sistema. Pasemos al cálculo de F haciendo uso de la función de partición:

$$F(\vec{v}) = -k_B T \ln Z = -k_B T \ln \left(\text{Traza} \left(\exp \left(-\frac{H(\vec{v})}{k_B T} \right) \right) \right) \quad (4.22)$$

Teniendo en cuenta la ecuaciones (2.5), (2.14) y las vistas anteriormente tendremos un hamiltoniano escrito de la siguiente forma:

$$H(\vec{v}) = H_0 + \frac{1}{2} \rho_s \int d\vec{r} (\vec{v}_s^l + \vec{v}_s^t + \vec{v})^2 = H(0) + \rho_s \int d\vec{r} (\vec{v} \cdot \vec{v}_s) + \frac{1}{2} \rho_s \int d\vec{r} v^2 = H(0) + \rho_s \int d\vec{r} (\vec{v} \cdot \vec{v}_s) + \frac{1}{2} \rho_s A v^2 \quad (4.23)$$

Introduciendo esta expresión en (4.22) y evaluando la traza realizando un desarrollo en serie de potencias de v obtenemos la siguiente igualdad para la energía libre:

$$F(\vec{v}) = \frac{1}{2} \rho_s A v^2 + F(0) - k_B T \ln \left(\text{Traza} \left(\exp \left(-\frac{\rho_s}{k_B T} \int d\vec{r} (\vec{v} \cdot \vec{v}_s) \right) \right) \right) = \frac{1}{2} \rho_s A v^2 + F(0) - \frac{1}{2} \frac{\rho_s^2}{k_B T} \int d\vec{r} d\vec{r}' (\langle \vec{v}_{sj} \cdot \vec{v}_{si} \rangle) \vec{v}_j \cdot \vec{v}_i + O(v^4) \quad (4.24)$$

Como se indicó anteriormente, la parte longitudinal tendrá una contribución nula a la integral. Para resolverla haremos uso de la siguiente igualdad:

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow \infty} \langle \vec{v}_{si}^t(\vec{k}) \cdot \vec{v}_{sj}^t(-\vec{k}) \rangle \sim \delta_{ij} - k_i k_j \quad (4.25)$$

Obteniendo como resultado:

$$F(\vec{v}) - F(0) = \frac{1}{2} \rho_s A v^2 - \frac{1}{2} \frac{\rho_s^2}{k_B T} v^2 A \int d\vec{r} \langle \vec{v}_s^t(\vec{r}) \cdot \vec{v}_s^t(0) \rangle + O(v^4) \quad (4.26)$$

Si igualamos esta ecuación con (4.20) obtendremos el valor de la rigidez de onda de espín renormalizada:

$$\rho_s^R = \rho_s - \frac{\rho_s^2}{k_B T} \int d\vec{r} \langle \vec{v}_s^t(\vec{r}) \cdot \vec{v}_s^t(0) \rangle \quad (4.27)$$

Esta ecuación nos muestra cómo los vórtices; responsables de la velocidad transversal, reducen la rigidez de onda de espín. Es decir, será necesaria una energía libre menor para rotar los espines.

5. Transición de Kosterlitz-Thouless

Como vimos en el punto 3, pese a que el parámetro de orden es cero para largas distancias, lo que nos dice que el sistema se encuentra en fase desordenada, encontramos que la correlación entre espines decae algebraicamente y esto es algo que ocurre cerca de la temperatura crítica. Por otro lado, vimos que la existencia de vórtices hace decrecer la energía libre del sistema. Es por esto por lo que vamos a considerar que estos defectos topológicos tengan un papel en la transición de fases en el Modelo XY.

Vamos a definir la energía libre de un vórtice singular. Para ello, debemos escribir la entropía del mismo. Esta será el número de lugares que puede ocupar el centro del vórtice, teniendo en cuenta que el sistema es una red de área L^2 y que el radio del centro es de longitud a :

$$S = k_B \ln \left(\frac{L^2}{a^2} \right) \quad (5.1)$$

Introduciendo esto en la expresión de la energía libre $F=E-TS$ y recurriendo a la energía del vórtice obtenida en la ecuación (4.5) obtenemos:

$$F = E_0 + J\pi n^2 \ln \left(\frac{L}{a} \right) - 2Tk_B \ln \left(\frac{L}{a} \right) = E_0 + (\pi J n^2 - 2Tk_B) \ln \left(\frac{L}{a} \right) \quad (5.2)$$

El signo de la energía dependerá del valor de T . Como L tiende a infinito, si tenemos una energía libre positiva, el valor de esta será infinito y si es negativa menos infinito. Tomando n como 1 ó -1, que serán los vórtices que encontremos en el sistema, tenemos:

$$T < \frac{J\pi}{2k_B} \rightarrow F \sim \infty \quad (5.3)$$

$$T > \frac{J\pi}{2k_B} \rightarrow F \sim -\infty \quad (5.4)$$

Por lo tanto, existe una temperatura T_{KT} bajo la cual no pueden crearse vórtices y sobre la que es favorable la creación de estos. Esto no quiere decir que no existan vórtices en la “fase fría”. Como vimos en el punto 4.1, la energía de un par vórtice y anti-vórtice no posee la dependencia con L y; por lo tanto, es finita. Esto nos muestra que si bien no es posible tener vórtices individuales a bajas temperaturas, sí que será posible tener pares como los descritos anteriormente.

Tendremos así dos fases: una de baja temperatura donde los vórtices se agrupan por pares vórtice y anti-vórtice y otra donde encontraremos vórtices individuales. La primera se tratará de la fase algebraicamente ordenada y la segunda será la fase desordenada. Es trivial ver que la temperatura crítica será:

$$T_{KT} = \frac{J\pi}{2k_B} \quad (5.5)$$

Vamos a seguir estudiando esta transición de fases trabajando sobre el hamiltoniano de un vórtice. Escribiremos este en dos partes: una debida a los vórtices y otra a las ondas de espín. El hamiltoniano que hace referencia a las ondas de espín será dependiente de la parte analítica de θ descrita en el anterior subapartado:

$$H_{OE} = \frac{1}{2}J \int d\vec{r} (\vec{\nabla}\theta_{an})^2 \quad (5.6)$$

Para escribir el hamiltoniano debido a los vórtices recurriremos a la ecuación (4.15), pero reescribiremos la ecuación (4.12) del campo $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ en función de una densidad escalar de vórtice $n_v(\mathbf{r})$:

$$\vec{m}(\vec{r}) = 2\pi\vec{z}n_v(\vec{r}) \quad (5.7)$$

Quedándonos la ecuación (4.15) como:

$$H_v = 2\pi^2J \int d\vec{r}' \int d\vec{r} n_v(\vec{r})G(\vec{r} - \vec{r}')n_v(\vec{r}') \quad (5.8)$$

Procedemos a calcular la función de Green para obtener el hamiltoniano:

$$G(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} = \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{a}} dk \frac{1}{k} \int_0^{2\pi} \cos(krcos(\varphi)) \quad (5.9)$$

Para resolver la integral debemos introducir la función de Bessel de orden cero:

$$J_0(z) = \begin{cases} 1 - \frac{1}{2}z^2 + \dots & \text{si } z \ll 1 \\ \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \left(\cos\left(z - \frac{\pi}{4}\right) \right) + \dots & \text{si } z \gg 1 \end{cases} \quad (5.10)$$

Sustituimos $u=kr$ en (5.9), obteniendo:

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\frac{a}{L}}^{\frac{\pi r}{L}} du \frac{J_0(u)}{u} = \frac{1}{2\pi} \int_{\frac{a}{L}}^{\frac{\pi r}{L}} du \left(\frac{1}{u} - \frac{1-J_0(u)}{u} \right) = \frac{1}{2\pi} \left[\ln\left(\frac{L}{a}\right) - \int_{\frac{a}{L}}^{\frac{\pi r}{L}} du \left(\frac{1-J_0(u)}{u} \right) - \int_1^{\frac{\pi r}{L}} du \left(\frac{1-J_0(u)}{u} \right) \right] \quad (5.11)$$

Para calcular las dos integrales nos fijamos en la definición de la función de Bessel en (5.10) y vemos que cuando u tiende a cero:

$$\frac{1-J_0(u)}{u} \sim u \quad (5.12)$$

Y cuando u tiende a infinito:

$$\frac{J_0(u)}{u} \sim \frac{1}{u^{\frac{3}{2}}} \quad (5.13)$$

Introduciendo esto en (5.11) obtenemos:

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \left[\ln\left(\frac{L}{a}\right) - \ln\left(\frac{r}{a}\right) + const \right] \quad (5.14)$$

Volvemos a la expresión del hamiltoniano (5.8):

$$H_v = -\pi J \int d\vec{r}' \int d\vec{r} n_v(\vec{r}) \ln\left(\frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{a}\right) n_v(\vec{r}') + \frac{J}{2} \pi \ln\left(\frac{L}{a}\right) \left(\int d\vec{r} n_v(\vec{r}) \right)^2 \quad (5.15)$$

Donde la segunda integral nos lleva a la suma de todos los vórtices en el espacio:

$$\int d\vec{r} n_v(\vec{r}) = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \quad (5.16)$$

Este término va acompañado de un logaritmo neperiano dependiente de L , que es infinito. Para que el término no diverja debe cumplirse que el sumatorio visto en la ecuación anterior sea nulo. Es decir, la vorticidad total será cero para que la energía no tienda a infinito.

Debemos introducir en la expresión del hamiltoniano la parte dependiente del centro de cada uno de los vórtices. Por cada vórtice que exista, tendremos este término de

energía, teniendo en cuenta que los vórtices que encontremos tendrán una carga topológica igual a 1, -1 y 0 podemos escribirlo del siguiente modo:

$$H_v = -\pi J \int d\vec{r}' \int d\vec{r} n_v(\vec{r}) \ln\left(\frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{a}\right) n_v(\vec{r}') + E_c \sum_{\alpha} n_{\alpha}^2 \quad (5.17)$$

Tenemos en cuenta que la distancia entre vórtices debe ser igual o mayor que “a” para que dos vórtices no ocupen el mismo lugar en la red. Es conveniente escribir el término anterior como una red de vórtices con un parámetro de red a:

$$H_v = -\pi J \sum_{\vec{r}_i, \vec{r}_j} n(\vec{r}_i) \ln\left(\frac{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}{a}\right) n(\vec{r}_j) + E_c \sum_{\alpha} n_{\alpha}^2 \quad (5.18)$$

Comparamos este hamiltoniano con el correspondiente a un gas de Coulomb en dos dimensiones:

$$H_{Coulomb} = -\sum_{i,j} q_i q_j \ln\left(\frac{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}{a}\right) \quad (5.19)$$

Como se observa, aquí las cargas sustituirían a la carga topológica del vórtice. Podemos decir, pues, que en nuestro sistema tenemos cargas puntuales de carga n_{α} y densidad de carga $n_v(\mathbf{r})$. El hecho de que hayamos obtenido que la vorticidad total debe ser cero no es otra cosa que la neutralidad de carga. Así, volviendo a la transición de fases y siguiendo con la comparación, vemos que tenemos una fase de baja temperatura donde las cargas forman “partículas” neutras y otra fase de cargas libres.

5.1. Ecuaciones renormalizadas de Kosterlitz

Estudiemos ahora con más detenimiento la rigidez de onda de espín renormalizada obtenida en la ecuación (4.27) haciendo uso del hamiltoniano en (5.18). Comenzaremos escribiendo ρ_s^R en función del campo \mathbf{m} :

$$\rho_s^R = \rho_s - \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\rho_s^2}{k_B T} \frac{1}{k^2} \langle \vec{m}(\vec{k}) \cdot \vec{m}(-\vec{k}) \rangle \quad (5.20)$$

Utilizando la expresión (5.7) y añadiendo un nuevo término $K = \rho_s/T$ y K_R (lo propio para el valor renormalizado) tendremos:

$$K_R = K - (2\pi)^2 K \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k^2} \langle n_v(\vec{k}) \cdot n_v(-\vec{k}) \rangle \quad (5.21)$$

Vamos a calcular el valor medio:

$$\langle n_v(\vec{k}) \cdot n_v(-\vec{k}) \rangle = \frac{1}{A} \int d\vec{r}' \int d\vec{r} \langle n_v(\vec{r}) \cdot n_v(\vec{r}') \rangle e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (5.22)$$

Haremos uso del desarrollo de Taylor de la exponencial haciendo que k tienda a cero. Para ello tendremos en cuenta que cuando esto ocurre $n_v(\mathbf{k})$ será nulo debido a la neutralidad de la carga. Es por esto que en la serie sólo nos aparecerán los términos pares:

$$\langle n_v(\vec{k}) \cdot n_v(-\vec{k}) \rangle = -k^2 \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{4A} \int d\vec{r}' \int d\vec{r} \langle n_v(\vec{r}) \cdot n_v(\vec{r}') \rangle (\vec{r} - \vec{r}')^2 + O(k^4) \quad (5.23)$$

Para realizar el cálculo vamos a tener en cuenta que el valor de la densidad, dentro de una celda de área a^2 es el valor de la carga topológica encerrada en esa celda por unidad de área. Es decir:

$$\langle n_v(\vec{r}) \cdot n_v(\vec{r}') \rangle = \frac{1}{a^4} \langle n_i \cdot n_j \rangle \quad (5.24)$$

Siendo n_i y n_j la carga topológica de la celda i y la celda j respectivamente. Nuestro siguiente paso será calcular este valor medio haciendo uso del hamiltoniano que aparece en (5.18):

$$\langle n_i \cdot n_j \rangle = \frac{\sum_{i,j} (n_i \cdot n_j) e^{-H/Tk_B}}{\sum_{i,j} e^{-H/Tk_B}} \quad (5.25)$$

Para hacerlo escribiremos la expresión en series del siguiente factor al que llamaremos “fugacidad”:

$$y = e^{-E_c/Tk_B} \quad (5.26)$$

Para bajas temperaturas este valor será pequeño, por lo que nos quedaremos con los primeros términos de la serie. En el divisor el primer término será aquel donde la carga es cero, dando como resultado la unidad. Debido a la imposición de la neutralidad de carga el primer término que tendremos será aquel en el que aparezca un vórtice -1 y uno +1 o bien un vórtice +1 y uno -1 (es decir, tendremos la misma contribución dos veces). El hamiltoniano de (5.18) será:

$$H_v = 2\pi J \ln \left(\frac{\vec{r} - \vec{r}'}{a} \right) + 2E_c \quad (5.27)$$

Introduciendo este término en (5.25), teniendo en cuenta (5.26) y la doble contribución tenemos finalmente:

$$\langle n_i \cdot n_j \rangle = -2y^2 \left(\frac{\vec{r} - \vec{r}'}{a} \right)^{-2\pi K} \quad (5.28)$$

Usamos este término en (5.24), obteniendo la siguiente expresión:

$$\langle n_v(\vec{k}) \cdot n_v(-\vec{k}) \rangle = \frac{k^2 y^2}{2Aa^4} \int d\vec{r}' \int d\vec{r} a^2 \left(\frac{\vec{r} - \vec{r}'}{a} \right)^{2-2\pi K} = k^2 y^2 \pi \int_a^L \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a} \right)^{3-2\pi K} \quad (5.29)$$

Por último, introducimos esto en (5.22). Nos interesa saber el comportamiento para bajas temperaturas, por lo que evaluaremos K_R^{-1} :

$$K_R^{-1} = \left(K - 4\pi^3 y^2 K^2 \int_a^L \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a} \right)^{3-2\pi K} \right)^{-1} = K^{-1} \left(1 - 4\pi^3 y^2 K \int_a^L \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a} \right)^{3-2\pi K} \right)^{-1} \quad (5.30)$$

Tenemos en cuenta que, a baja temperatura, el valor de K es muy grande. Es por esto que suponemos que el valor entre paréntesis también lo será y, al estar elevado a -1, será un valor pequeño. Podemos, pues, escribir la anterior expresión del siguiente modo:

$$K_R^{-1} = K^{-1} \left(1 + 4\pi^3 y^2 K \int_a^L \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a} \right)^{3-2\pi K} \right) \quad (5.31)$$

Quedando finalmente la siguiente ecuación:

$$K_R^{-1} = K^{-1} + 4\pi^3 y^2 \int_a^L \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a} \right)^{3-2\pi K} \quad (5.32)$$

Como vemos, cuando tenemos bajas temperaturas la integral de la expresión anterior convergerá, y habrá una corrección de K_R^{-1} del orden de y^2 . Si, por el contrario, nos encontramos a temperaturas altas, la integral diverge. Estudiemos con más detalle este último caso. Para ello dividiremos la integral en dos partes:

$$\int_a^L \rightarrow \int_a^\infty = \int_a^{ae^{dl}} + \int_{ae^{dl}}^\infty \quad (5.33)$$

Donde "l" será el parámetro de escala. Al hacer esto estamos aumentando la escala a la que vemos el sistema y eliminamos así las fluctuaciones de ondas de espín de longitud de onda corta. Incluiremos la primera integral en la constante K^{-1} :

$$K(l)^{-1} = K^{-1} + 4\pi^3 y^2 \int_a^{ae^{dl}} \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a} \right)^{3-2\pi K} \quad (5.34)$$

Dejando la ecuación (5.32) de la siguiente forma:

$$K_R^{-1} = K(l)^{-1} + 4\pi^3 y^2 \int_a^\infty \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a}\right)^{3-2\pi K} \quad (5.35)$$

Ahora reescribiremos $a \rightarrow ae^{dl}$. Necesitaremos introducir una fugacidad renormalizada para ello:

$$y(l) = ye^{(2-\pi K)dl} \quad (5.36)$$

Volviendo a (5.35) tendremos finalmente:

$$K_R^{-1} = K(l)^{-1} + 4\pi^3 y(l)^2 \int_a^\infty \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a}\right)^{3-2\pi K(l)} \quad (5.37)$$

Donde hemos introducido $y(l)$ además de cambiar el exponente de la integral como dependiente de $K(l)$ en lugar de K . Queremos estudiar cómo cambian $K(l)^{-1}$ y $y(l)$ al variar el factor de escala. Vamos a suponer que el valor “ dl ” es pequeño, volviendo a la ecuación (5.34) sustituiremos la exponencial que aparece en el límite superior de la integral por su serie de Taylor:

$$K(l)^{-1} = K^{-1} + 4\pi^3 y^2 \int_a^{a(1+dl)} \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a}\right)^{3-2\pi K} \quad (5.38)$$

Calculamos ahora su derivada en función de “ l ”, tomando el valor “ dl ” como cercano a cero:

$$\frac{dK^{-1}(l)}{dl} = 4\pi^3 y^2 \left(\frac{a(1+dl)}{a}\right)^{3-2\pi K} \approx 4\pi^3 y^2 \quad (5.39)$$

Sabemos que la descripción de la derivada es:

$$\frac{dK(l)^{-1}}{dl} = \lim_{dl \rightarrow 0} \frac{K(l+dl)^{-1} - K(l)^{-1}}{dl} \quad (5.40)$$

En la ecuación (5.39) tomamos $l=0$. Tomando l como un valor cualquiera, obtendríamos en la derivada:

$$\frac{dK(l)^{-1}}{dl} = 4\pi^3 y(l)^2 \quad (5.41)$$

Derivando (5.36) se tiene:

$$\frac{dy(l)}{dl} = (2 - \pi K(l))y(l) \quad (5.42)$$

Veamos qué significado físico tienen las dos ecuaciones anteriores. Primero debemos observar, como ya se dijo anteriormente, que al aumentar el parámetro de escala estamos eliminando fluctuaciones de ondas de espín de longitud de onda corta, que se aglutinan dentro de los términos anteriores. Si aumentamos este parámetro progresivamente cada vez incluiremos más fluctuaciones y más ondas de espín dentro de estos. Es por esto que es de esperar que $K(l)^{-1}$ incremente su valor al aumentar el parámetro de longitud. Observemos ahora la fugacidad. Fijándonos en la ecuación (5.42), vemos que para que el hecho de que su valor decrezca o aumente dependerá del valor que tome $K(l)$. Si este es menor a $2/\pi$ la fugacidad decrecerá. Si, por el contrario, $K(l)$ es mayor que $2/\pi$, su valor crecerá. Para explicar esto hay que tener en cuenta que, además de eliminar fluctuaciones y ondas de espín, al aumentar la escala los vórtices de un par van a acortar la distancia que los separa, llegando a hacer que se aniquilen cuando estén lo suficientemente unidos. Es decir, aumentar la escala destruye pares de vórtice y anti-vórtice. Como la fugacidad del sistema depende del número de vórtices, es natural pensar que en el caso en el que $\gamma(l)$ decrece al aumentar el parámetro de escala tendremos pares de vórtices y en el caso en el que crece los vórtices estarán libres, de modo que no podrán aniquilarse. Esto es lo que esperábamos que ocurriera en la Transición de Kosterlitz-Thouless descrita anteriormente.

Tras un análisis en la vecindad del punto crítico [6], obtenemos los resultados que podemos observar en la siguiente gráfica:

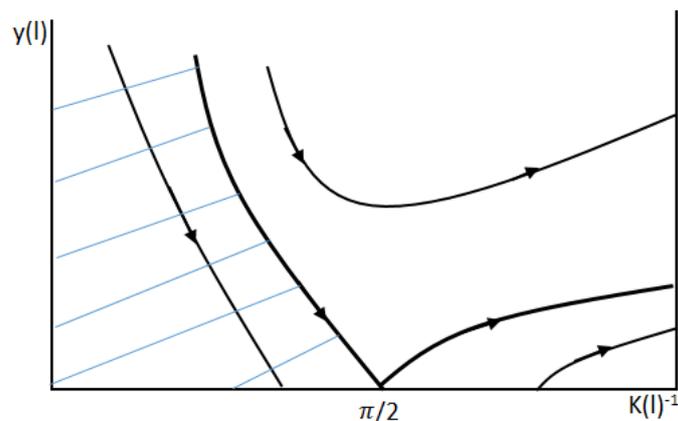


Fig. 5.1. Representación de la fugacidad frente a $K(l)^{-1}$

Como vemos, existe una línea que divide dos zonas: una en la cual la fugacidad tenderá a cero para un valor arbitrario de $K(l)$ y otra donde se incrementará. Justo en la línea donde esto ocurre la fugacidad va a cero en el punto crítico. Al mismo tiempo, si partimos del punto crítico, la fugacidad aumentará rápidamente. Tenemos; pues, un punto donde una pequeña fluctuación separará los pares de vórtices, creando así vórtices libres. La temperatura correspondiente a la separatriz será la del punto crítico, calculada en la ecuación (5.5).

Teniendo en cuenta que para temperaturas menores a la del punto crítico la fugacidad decae a cero, podemos regresar a los cálculos realizados en el punto 3, en los que sólo tuvimos en cuenta las ondas de espín. Recordamos que la correlación de espines de la ecuación (3.19) decaía algebraicamente. En la proximidad del punto crítico tendremos:

$$\langle S_x S_{x'} \rangle = \left(\frac{r}{L}\right)^{-\frac{T}{J2\pi}} = \left(\frac{r}{L}\right)^{-\frac{1}{2\pi K_R(T_{KT}^-)}} \quad (5.43)$$

K renormalizada no es otra cosa que $K(l)$ con l tendiendo a infinito, de modo que aglutine los efectos de las fluctuaciones y las ondas de espín. De tal forma que:

$$K_R(T_{KT}^-) = \lim_{l \rightarrow \infty} K(T_{KT}^-) = \frac{2}{\pi} \quad (5.44)$$

La correlación de espines nos queda como:

$$\langle S_x S_{x'} \rangle = \left(\frac{r}{L}\right)^{-\frac{1}{4}} \quad (5.45)$$

Tras el análisis en el punto crítico ya mencionado obtenemos los siguientes resultados.

Para $T=T_{KT}$ tendremos una corrección logarítmica de la correlación:

$$\langle S_x S_{x'} \rangle = \frac{\ln^{\frac{1}{8}}\left(\frac{r}{a}\right)}{r^{\frac{1}{4}}} \quad (5.46)$$

Mientras que para $T>T_{KT}$ obtendremos la siguiente longitud de correlación:

$$\xi \sim \exp\left(\frac{b'}{T-T_{KT}}\right) \quad (5.47)$$

Por último, se tiene que la rigidez de onda de espín renormalizada presentará un salto:

$$\rho_s^R = \begin{cases} \rho_s^R(T_{KT}^-) \left[1 + b(T_{KT} - T)^{\frac{1}{2}} \right] & \text{si } T < T_{KT} \\ 0 & \text{si } T > T_{KT} \end{cases} \quad (5.48)$$

Donde se cumplirán las relaciones:

$$\frac{\rho_s^R(T_{KT}^-)}{T_{KT}} = \frac{2}{\pi} \quad (5.49)$$

$$bb' = 2\pi \quad (5.50)$$

Vamos a explicar qué significado físico tiene la ecuación (4.48). Como sabemos, un vórtice reduce la rigidez renormalizada. Cuando nos encontramos en la fase de baja temperatura al aumentar la temperatura se activarán cada vez más pares de vórtices, es por esto que al tener una temperatura más cercana al punto crítico tendremos una rigidez menor. Una vez lleguemos a la fase de mayor temperatura, dejaremos de tener pares para tener vórtices libres que no podrán aniquilar otros vórtices, por lo que su efecto será mayor. Es por esto que la rigidez se ve reducida hasta obtener un valor nulo al llegar a esta fase. Como vemos, la energía libre necesaria para aplicar un giro a un espín será menor conforme aumentemos la temperatura ya que está relacionada con la rigidez de onda de espín.

Estudiemos ahora la capacidad calorífica del sistema en el punto crítico. La densidad de la energía libre en este punto se puede estudiar como una relación de la temperatura y del volumen de correlación:

$$f \sim \frac{T_{KT}}{\xi^2} \quad (5.51)$$

En el punto crítico tendremos una singularidad esencial de la energía libre. Si calculamos ahora su segunda derivada:

$$c_v = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \sim \xi^{-4} \quad (5.52)$$

vemos que también existirá una singularidad para la capacidad calorífica del sistema. Así, derivando la ecuación (5.52) volveremos a obtener una singularidad esencial, repitiéndose esto cada vez que realicemos una derivada. Nos encontramos, pues, con una transición de fase que no se ajusta a la clasificación de Ehrenfest que comentamos en el punto 1. Esta transición tendría un orden infinito.

Por último, teniendo en cuenta que para la fase de altas temperaturas nos encontramos con un sistema de “cargas libres”, podemos estudiar este sistema como un gas de Coulomb. Cuando la densidad de carga es lo suficientemente alta es posible usar la teoría de campo medio para el Hamiltoniano obtenido en la ecuación (5.17). Obtenemos una constante dieléctrica del material [6]:

$$\epsilon = \frac{1}{1 + \frac{1}{(q\lambda)^2}} \quad (5.53)$$

Donde $\lambda \sim \xi$. Esto nos lleva al siguiente potencial de Coulomb, característico de cargas móviles:

$$V(q) = \frac{1}{q^2 \epsilon(q)} = \frac{1}{q^2 + \lambda^2} \quad (5.54)$$

6. Simulación

Comprobaremos que existe la transición de fase para el Modelo XY, así como también cómo evoluciona la energía y la capacidad calorífica respecto a la temperatura. Para ello utilizaremos el Método de Monte Carlo en un sistema de espines que rotan libremente como el descrito para el Modelo XY. El Método de Monte Carlo nos sirve para evaluar valores medios de propiedades estadísticas. Primero generaremos configuraciones del sistema. Para ello, partiendo de la configuración anterior, aplicamos una pequeña variación en la variable θ asociada a un nodo elegido al azar. Calculamos la variación de energía ΔU que posee tras dicha modificación, y se acepta la nueva configuración con una probabilidad igual a $\min(1, e^{-\beta\Delta U})$ (si no se acepta, la nueva configuración es la anterior). Este procedimiento se repite para obtener las propiedades de interés del sistema mediante su promedio a lo largo de la simulación.

Realizaremos esto para dos sistemas cuadrados: uno de 60x60 celdas y otro de 100x100. El parámetro que vamos a variar es la temperatura, que estará definida como $T^* = Tk_B/J$.

Primero comprobaremos que el sistema presenta una transición de fases. Como hemos visto, cerca de la transición encontraremos una función de correlación de espines algebraica, mientras que para temperaturas más altas tendremos una dependencia exponencial.

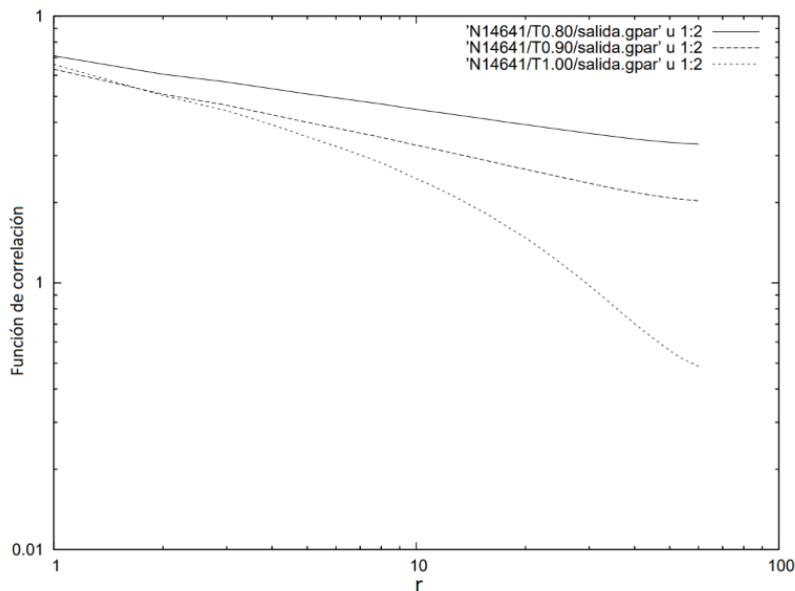


Fig. 6.1. Función de correlación en función de r para distintas temperaturas en un sistema de 60x60 celdas.

Hemos representado en una escala logarítmica la función de correlación frente a la distancia para $T=0,8$; $T=0,9$ y $T=1,0$. Como vemos, el decaimiento pasa de ser algebraico a ser exponencial en torno a una temperatura de $T=0,9$. Esto nos dice que tenemos una transición de fase cercana a esta temperatura. También notar como las dimensiones del sistema han afectado al decaimiento, siendo más lento cuanto mayor es el sistema.

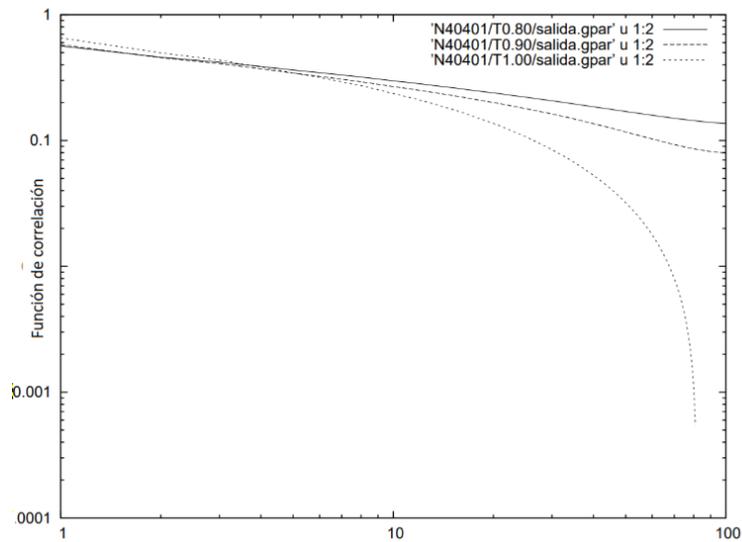


Fig. 6.2. Función de correlación en función de r para distintas temperaturas en un sistema de 100×100 celdas.

Estudiemos ahora las propiedades termodinámicas del sistema:

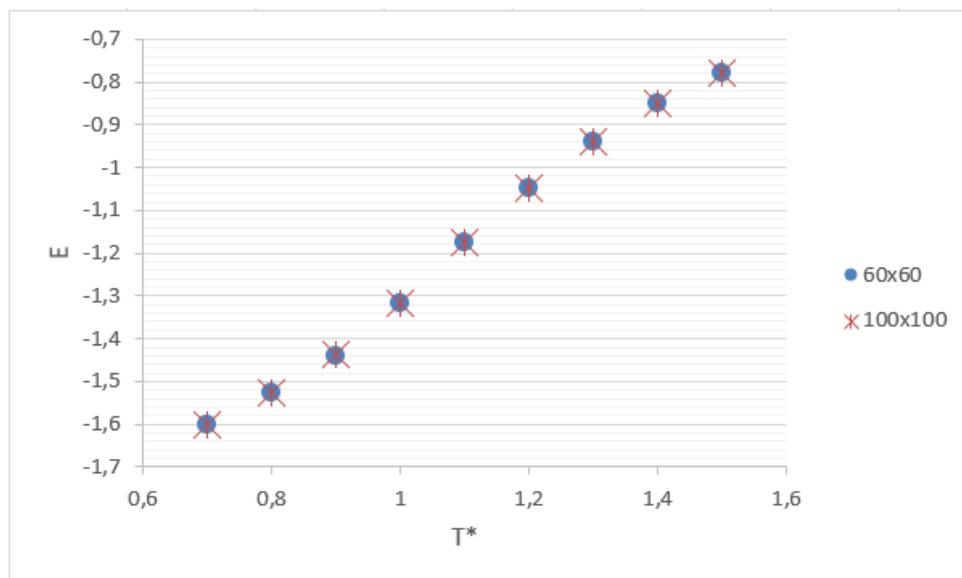


Fig. 6.3. Energía en función de la temperatura.

Vemos que la energía crece al aumentar T^* . Como explicamos anteriormente al aumentar T activamos cada vez más vórtices, lo que reduce F y facilita que los espines se alineen. Este hecho aumentará la energía. El tamaño del sistema no afecta a esta propiedad.

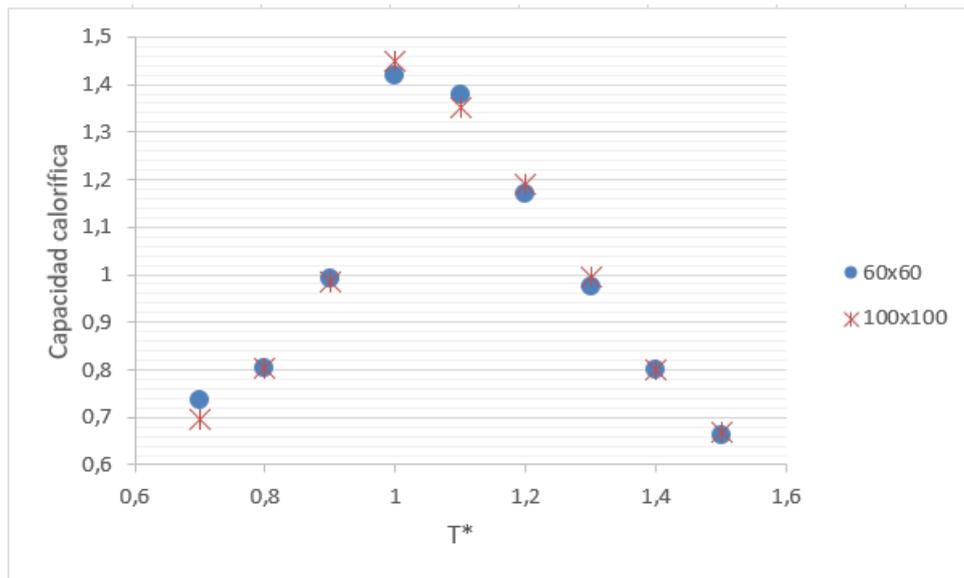


Fig. 6.4. Capacidad calorífica en función de la temperatura.

La capacidad calorífica presenta un máximo, algo que esperamos cuando ocurre una transición de fase. No obstante, este máximo no ocurre a la temperatura de transición, sino que está algo desplazado. Esto se debe al orden infinito de la transición comentado en el punto anterior. De nuevo, el tamaño del sistema no parece afectar a esta propiedad.

Conclusiones

Hemos demostrado tras un análisis matemático del Modelo XY que este no cumple las condiciones de transiciones de fase que esperábamos por el teorema de Landau. En su lugar ocurre una transición relacionada con los defectos topológicos del sistema. Estos defectos, llamados vórtices, pasan de formar pares de carga topológica opuesta en una fase de baja temperatura a ser vórtices libres que actúan como cargas libres en un gas de Coulomb. El principal motivo de que esto ocurra es que un vórtice posee energía libre infinita para la primera fase, por lo que es imposible que se cree, mientras que un par posee energía finita. En la segunda fase, una vez superada una energía crítica, los vórtices libres comienzan a crearse espontáneamente.

Hemos visto que los vórtices disminuyen la energía libre de Helmholtz del sistema, de modo que al aumentar la temperatura esta se verá reducida y requerirá menos energía de formar un espín, de modo que los espines se alinearán.

Por último, tras el estudio de las ecuaciones renormalizadas de Kosterlitz, hemos comprobado que tenemos una transición que no encaja con la clasificación de Ehrenfest. Esto se debe a que el calor específico presenta una singularidad de orden infinito en el punto crítico.

Bibliografía

- 1-VV. AA., *Scientific Background on the Nobel Prize in Physics 2016: Topological Phase Transition And Topological Phases Of Matter*. The Royal Swedish Academy of Science, 2016.
- 2-L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Statistical Physics*. Pergamon Press, 1980.
- 3-H.J. Jensen, *The Kosterlitz-Thouless Transition*. Department of Mathematics. Imperial College.
- 4-F. Wegner, *Spin-Ordering in a Planar Classical Heisenberg Model*. Zeitschrift für Physik 206, 465-470 (1967).
- 5-J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, *Ordering, Metastability and Phase Transitions in Two-Dimensional Systems*. J. Phys. C: Solid State Phys, Vol 6 (1973).
- 6-P.M. Chaikin and T.C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, 1995.
- 7-D. Frenkel and B. Smit. *Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications*. Academic Press, 1996.