

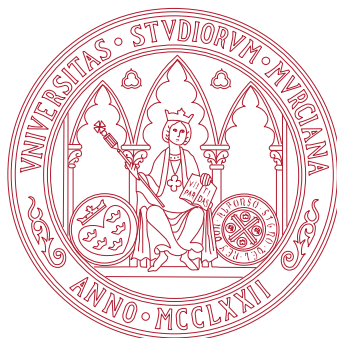


UNIVERSIDAD DE MURCIA

FACULTAD DE QUÍMICA

Simulaciones Numéricas en Modelos
de Loops

D. Pablo Serna Martínez
2014



DEPARTAMENTO DE FÍSICA

FACULTAD DE QUÍMICA

UNIVERSIDAD DE MURCIA

Simulaciones numéricas en modelos de loops

Memoria presentada para optar al grado de doctor en físicas por:

Pablo Serna Martínez

2014

Directores:

Andrés M. Somoza Gimeno

Miguel Ortuño Ortín

Agradecimientos

Primero quiero agradecer enormemente a los profesores Miguel Ortuño Ortín y Andrés M. Somoza Gimeno por darme la oportunidad de trabajar en estos modelos de loops, tan intrigantes y asombrosos, y por permitirme atisbar este pequeño recodo del conocimiento que es la física estadística y los modelos geométricos. Además, gracias a ellos he podido adquirir habilidades y formas de entender problemas que son ya parte de mi personalidad.

También quiero agradecer al profesor John T. Chalker por acogerme en su grupo en la universidad de Oxford y por sus críticas e ideas que tanto han ayudado al desarrollo de esta tesis. Al igual que al doctor Adam Nahum, antiguo estudiante suyo, con el que hemos explorado estos modelos de loops y al que tengo que agradecer también sus críticas, ideas y discusiones.

A Manuel Pino le tengo que agradecer el tiempo, las explicaciones, las discusiones, los buenos momentos y su apoyo, especialmente, cuando no eran tan buenos. También debo mi agradecimiento al resto de compañeros del departamento de Física, que de una forma u otra me han ayudado a mejorar en estos cuatro años de tesis, algunos de ellos son: Juan Francisco González, Sonia Jerez, Juan José Gómez, Manuel Caravaca, Raquel Llorente, Jesús Sánchez-La Casa, Rocío Baró, Elisa Palacios, José Juan Fernández-Melgarejo, Hugo Pérez. Quiero agradecer especialmente a Rafael García-Molina por sus numerosos consejos y por mostrarme la explicación física de fenómenos cotidianos en la naturaleza. Así como a Javier Abellán, por su insistencia en usar R , al final reconozco que ha resultado ser tremendamente útil. También, querría agradecer a Javier Prior sus consejos, sugerencias e información.

Por último, quiero agradecer a toda las personas que me han apoyado estos años:

a los amigos, a los que siempre han estado ahí, a los que se han ido y a los que han venido. Especialmente a mi familia, en particular, a mis padres: José María e Iluminada, a mi hermana Marina, y a mis abuelos Paca, Nina, Pepe y Joaquín. A pesar de que no les sea fácil entender lo que he hecho durante estos años de tesis, les agradezco su apoyo, amor y cariño.

Este trabajo ha sido posible gracias al apoyo económico de la beca FPU: AP2009-0668.

Publicaciones

El trabajo presentado en este documentado ha dado lugar a las siguientes publicaciones:

- Adam Nahum, J.T. Chalker, P. Serna, M. Ortuño y A.M. Somoza. 2011. 3D Loop models and the CP^{n-1} sigma model. *Physical Review Letters*, **207**, 110601.
- Adam Nahum, P. Serna, A.M. Somoza y M. Ortuño. 2013. Loop models with crossings. *Physical Review B*, **87**, 184204.
- Adam Nahum, P. Serna, M. Ortuño y A.M. Somoza. 2013. Length Distributions in Loop Soups. *Physical Review Letters*, **111**, 100601.
- Adam Nahum, J.T. Chalker, P. Serna, M. Ortuño y A.M. Somoza. 2013. Phase transitions in three-dimensional loop models and the CP^{n-1} sigma model. *Physical Review B*, **88**, 134411.

Dos trabajos en preparación:

- Adam Nahum, J.T. Chalker, P. Serna, M. Ortuño y A.M. Somoza. Deconfinement criticality in loop models and the NCPP¹ sigma model.
- P. Serna, M. Ortuño y A.M. Somoza, Adam Nahum, J.T. Chalker. 3D Loop models with crossings.

Se han realizado las siguientes contribuciones a congresos en forma de pósteres:

- P. Serna, M. Ortuño, A.M. Somoza. 2011. Anderson Localisation in Class C Network Models. *Strongly correlated electronic systems, beyond Fermi liquid theory*. Les Houches (Francia).
- P. Serna, A.M. Somoza, M. Ortuño, A. Nahum y J.T. Chalker. 2013. Loop models and quantum magnets. *New trends in complex quantum system dynamics*, Cartagena (España).
- P. Serna, M. Ortuño, A.M. Somoza, A. Nahum y J.T. Chalker. 2013. Loop models. *15th International Conference on Transport in Interacting and Disordered Systems (TIDS 15)*, Sant Feliu de Guíxols (España), Girona. Premio de la European Physical Society al mejor poster.
- A. Nahum, J. T. Chalker, P. Serna, M. Ortuno and A. M. Somoza. 2011. Loop models, vortex lines, and sigma models in three dimensions. *Workshop on Synergies between Field Theory and Exact Computational Methods in Strongly Correlated Quantum Matter*, ICTP - Trieste (Italia).

El trabajo ha dado lugar a las siguientes charlas invitadas:

- J. T. Chalker, A. Nahum, M. Ortuño, P. Serna and A. M. Somoza. 2012. Classical loop models and quantum phase transitions: Neel to VBS and VBL transitions in $SU(n)$ magnets. *KITP program: Frustrated magnetism and quantum spin liquids*, KITP Santa Barbara.
- M. Ortuño, P. Serna, A. M. Somoza, A. Nahum, J. T. Chalker. 2013. Loop models and quantum systems. *New trends in complex quantum system dynamics*, Cartagena (España).

Índice general

Introducción	1
1. Generalidades	5
1.1. Transiciones de fase	6
1.1.1. Caracterización de la transición	7
1.1.2. Teoría de Escala	14
1.1.3. Transición de fase cuántica	15
1.2. Modelos de loops	18
1.2.1. Percolación	19
1.2.2. Modelo de Ising	22
1.2.3. Modelos de loops $O(n)$	25
1.2.4. Representación de Fortuin-Kasteleyn y el modelo de Potts	28
1.2.5. Modelos de loops completamente empaquetados	28
1.2.6. Modelos de loops con cruces	31
1.3. Teorías de campos	35
1.3.1. Modelo sigma sobre \mathbb{RP}^{n-1}	35
1.3.2. Modelo sigma \mathbb{CP}^{n-1} en 2D	40
1.3.3. Modelo sigma en \mathbb{CP}^{n-1} tridimensional	42
2. Métodos Numéricos	45
2.1. Monte Carlo.	46
2.1.1. Muestreo por importancia	47
2.1.2. Proceso de Markov	48

2.1.3.	Balance detallado	49
2.1.4.	Algoritmo de Metropolis	51
2.1.5.	Equilibrio y tiempo de correlación	52
2.1.6.	Paralelización	53
2.2.	Técnicas especiales	54
2.2.1.	Matriz de transferencia	56
2.2.2.	Barajado	58
2.3.	Método de los múltiples histogramas	60
2.3.1.	Método del histograma	60
2.3.2.	Metodo de los múltiples histogramas	62
2.4.	Cálculo de errores.	65
2.4.1.	Método de bloques.	66
2.4.2.	Método bootstrap	68
3.	Modelos de loops en 3D con orientación y color	71
3.1.	Contexto	72
3.2.	Modelos	74
3.3.	Procedimiento de Monte Carlo	78
3.4.	Observables	80
3.5.	Criticalidad	83
3.5.1.	Comportamiento crítico para $n = 1$	83
3.5.2.	Comportamiento crítico para $n = 2$	86
3.5.3.	Identificación del carácter de la transición	90
3.5.4.	Comportamiento crítico para $n = 3$	98
3.5.5.	Red L en $n = 4$	102
3.5.6.	Dimensión fractal	105
3.6.	Fase extendida	106
3.6.1.	Consideraciones teóricas	106
3.6.2.	Distribución de Probabilidades	108
3.6.3.	Análisis	112

3.7. Conclusiones	114
4. Criticalidad de deconfinamiento	117
4.1. Generalidades	118
4.2. Modelo	125
4.3. Procedimiento de Monte Carlo	127
4.4. Caracterización de las fases y la transición	129
4.4.1. Parámetros de Orden	130
4.4.2. Número de curvas extendidas y longitud de correlación . . .	136
4.4.3. Fallo del escalado sin parámetros libres	141
4.4.4. Susceptibilidades	143
4.4.5. Dimensión fractal y correlaciones	146
4.5. Distribución de la energía	148
4.6. Fase anisótropa	155
4.7. Exponentes	156
4.8. Modelo de loops interactuantes con $n = 1$	159
4.9. Modelo de loops interactuantes con $n = 3$	162
4.10. Conclusiones	166
5. Modelos de Loops en 2D sin orientación	169
5.1. Contexto y antecedentes	169
5.2. Modelos	175
5.2.1. Loops completamente-empaquetados con cruces	175
5.3. Fase de Goldstone	180
5.3.1. Funciones de correlación	180
5.3.2. Número de curvas extendidas	183
5.3.3. Distribución de longitudes	186
5.4. Líneas críticas	189
5.4.1. WN crítico, ν , y y_{irr}	189
5.4.2. G_k , dimension fractal y distribución de longitudes	192
5.5. Consecuencias y Conclusiones	194

Summary	197
Conclusions	205
Bibliografía	209

Introducción

Los modelos de loops forman parte de una clase general de problemas de física estadística donde los grados de libertad, en vez de partículas o espines, son objetos extendidos de longitud variable y cuyas propiedades geométricas determinan los observables del sistema. Aquí usaremos la definición de un loop o lazo como camino cerrado en el espacio real (en d -dimensiones). Éste puede tener diversas propiedades como por ejemplo: dirección, el loop se recorre en uno de los sentidos; color, dos loops de dos colores diferentes no se pueden mezclar; ramificación, se puede llegar de un punto a otro del loop por dos caminos diferentes; y muchas otras propiedades. Los loops, además, pueden estar definidos tanto en una red discreta como en el espacio continuo, aunque en esta memoria nos centraremos en el caso discreto y su simulación. Las variables que determinan su estructura forman parte de la función de partición del modelo y por tanto de la física estadística del problema.

La importancia de los modelos de loops se debe a diversas razones. Primero, la clase de universalidad de las transiciones continuas puede clasificarse mediante las simetrías del modelo y su dimensionalidad, en este sentido, los modelos de loops permiten dar una descripción alternativa de estas transiciones de fase para muchos modelos con los que comparten las mismas simetrías. Segundo, los loops aparecen de forma natural en las expansiones de alta temperatura de la función de partición de diversos modelos magnéticos, como los modelos $O(n)$ (véase por ejemplo Cardy (1996)), llegando a dar una solución alternativa a la de Onsager al modelo de Ising en dos dimensiones (Vdovichenko, 1965). Tercero, en las simulaciones de transiciones de fase de modelos magnéticos, una de las formas de atenuar el fenómeno conocido como *critical slowing down*, o aumento del tiempo de correlación en

el punto crítico con el aumento del tamaño, es mediante el uso de algoritmos como el de Wolff, Swendsen-Wang o el algoritmo de gusano (véase por ejemplo (Newman y Barkema, 2001)). Éstos implican la construcción de loops entre sitios con estados relacionados. Además, los loops surgen de forma natural en modelos tan diversos como modelos magnéticos con frustración (Jaubert *et al.*, 2011, 2012; Khemani *et al.*, 2012), cuerdas cósmicas (Vachaspati y Vilenkin, 1984), vórtices ópticos (O'Holleran *et al.*, 2008), turbulencias (Bernard *et al.*, 2006), polímeros (de Gennes, 1972) o transiciones de Anderson (Gruzberg *et al.*, 1999; Beamond *et al.*, 2002; Ortuño *et al.*, 2009).

Respecto a la primera razón dada, uno de los problemas que suscitan mucho interés actualmente es el estudio de transiciones de fase cuánticas. El estudio de estas mediante modelos de loops que compartan sus propiedades críticas permitiría su caracterización mediante modelos clásicos (geométricos), con la reducción del coste computacional que implica esto. Por otra parte, algunos modelos de loops estudiados en esta memoria encontramos que están relacionados con una discretización de modelos sigma \mathbb{CP}^{n-1} . Actualmente hay un gran interés en el estudio de modelos magnéticos y en la búsqueda de un modelo con este tipo de simetrías que produzca una transición mediante un punto crítico de deconfinamiento (Senthil *et al.*, 2004a,b).

Esta memoria se estructura como sigue:

- En el primer capítulo, exponemos de forma resumida los conceptos previos y generalidades relevantes para el estudio de los modelos de loops. En particular, repasamos primero las definiciones de los exponentes críticos y la caracterización de las transiciones de fase. También recordaremos diferentes modelos de loops que aparecieron previamente en la literatura y que son de gran interés, además de introducir los modelos de loops que usaremos durante la memoria. Por último, daremos los aspectos básicos de las teorías de campos asociadas a los modelos de loops y sus discretizaciones.
- En el capítulo 2, explicamos las técnicas numéricas que usamos para el estudio

y caracterización de los modelos de loops. Describimos la estructura de los procesos de Monte Carlo, algunas técnicas especiales y métodos de estimación de errores.

- En el capítulo 3, estudiamos una clase de modelos de loops tridimensionales completamente empaquetados con orientación y color, cuyo comportamiento es el de la discretización de modelos sigma sobre \mathbb{CP}^{n-1} . En concreto, caracterizaremos el diagrama de fases, mediante el estudio detallado de las diferentes transiciones de fases, y la estadística de las longitudes de los loops, en la fase con loops extendidos.
- En el capítulo 4, estudiamos una modificación de los modelos de loops anteriores, con especial énfasis en el modelo con dos colores. La modificación vendrá en forma de interacciones que conducen al modelo a una transición candidata a formar parte de la clase de criticalidad cuántica de deconfinamiento. Caracterizaremos el diagrama de fases y haremos un estudio exhaustivo del carácter de la transición.
- En el capítulo 5, estudiamos un modelo de loops en dos dimensiones con cruces relacionado con los anteriores, en el que aparecen comportamientos universales atípicos. Caracterizaremos la fase extendida, donde encontraremos formas logarítmicas en los distintos observables, y las transiciones de fase, que son de una nueva clase de universalidad.

Generalidades

Actualmente gran parte de la literatura en física está relacionada con el comportamiento de sistemas en transiciones de fase. En particular, cuando éstas son continuas se da el fenómeno de universalidad: en modelos diferentes que comparten las mismas simetrías se obtienen comportamientos similares, en particular, los valores de los conocidos como exponentes críticos son iguales. En esta memoria vamos a caracterizar las transiciones de fases de varios modelos de loops. Por ello, en este capítulo vamos a repasar los conceptos básicos para la distinción del carácter de las transiciones de fase, y en caso de ser continua, las formas de determinar sus exponentes y propiedades críticas. Introducimos así la nomenclatura usual para los exponentes críticos que iremos usando a lo largo de este documento. También repasaremos diferentes modelos de loops que aparecieron previamente en la literatura y que son de gran interés por su similitud con los modelos que estudiamos aquí. Introduciremos la expresión de los modelos de loops como expansión de altas temperaturas de modelos magnéticos, lo que permitirá identificar estos modelos con discretizaciones de teorías de campos continuas, conocidas como modelos sigma.

En la sección 1.1 repasamos estos aspectos básicos de las transiciones de fase, concretamente, la diferencia entre transición de fase de primer orden y continua, y el análisis de la teoría de escala junto a la definición de los exponentes críticos. En la sección 1.2 introducimos los modelos de loops, veremos su importancia por su relación con otros modelos físicos y repasamos algunos resultados previos de la literatura. En la sección 1.3 damos un resumen y bosquejo de las discretizaciones y teorías efectivas que explican el comportamiento de los modelos de loops a largas distancias, trabajo que fue realizado por Adam Nahum y John T. Chalker.

1.1. Transiciones de fase

Desde el desarrollo del marco teórico proporcionado por las teorías Ginzburg-Landau y la caracterización de los puntos críticos tras la aparición de la teoría de grupo de renormalización (RG), se ha realizado un intenso trabajo en el estudio y caracterización de las distintas transiciones de fase. Concretamente, ha habido numerosas contribuciones a la determinación del orden de distintas transiciones de fase y de sus exponentes críticos en el caso de ser continua. Gracias a la teoría de escala y a las técnicas de análisis de tamaño finito, el estudio de estas transiciones también se puede realizar mediante simulaciones, que en general, implican el uso de sistemas de tamaño finito.

Así, el marco en el que queremos caracterizar las transiciones de fase será el de la física estadística. En ésta, como es ampliamente conocido, el objeto fundamental es la energía libre o la función de partición, cantidades en las que podremos observar las marcas de la transición, así como su carácter. Sin embargo, el acceso a estas cantidades mediante la simulación de Monte Carlo no es sencillo, y la caracterización de la transición suele estar supeditada a la medida de observables relacionados con ellas. En general, es común usar sus primeras derivadas como el parámetro de orden y la energía, o las segundas derivadas o funciones respuesta, entre las que se encuentran la susceptibilidad, el calor específico y las correlaciones. Las funciones de correlación permiten dar cuenta de las fluctuaciones del sistema, y a su vez permiten la definición de una cierta longitud conocida como *longitud de correlación*. Salvo pocas excepciones, esta longitud se comporta de forma esencialmente diferente según el orden de la transición, al igual que el resto de observables mencionados.

En general, las transiciones de fase son puntos en el espacio de parámetros del sistema en donde la energía libre no es analítica. El sistema cambia de fase cuando al variar uno de estos parámetros pasa por uno de estos puntos. El cambio de fase se caracteriza mediante el comportamiento del parámetro de orden asociado a la misma, que será por definición nulo en la fase *desordenada*, donde el sistema conserva las simetrías del hamiltoniano, y no nulo en la fase *ordenada*, donde una

de estas simetrías está rota globalmente.

Las transiciones de fase se clasifican en transiciones de *primer orden* y transiciones *continuas*. En las de primer orden se produce una discontinuidad en la primera derivada de la energía libre, bien sea el parámetro de orden o la energía. Estas transiciones vienen caracterizadas por la existencia de un *calor latente*, energía necesaria para producir el cambio de fase a una temperatura constante, y una región del espacio de parámetros donde coexisten las dos fases. La transición se produce por la formación y crecimiento de gotas de una de las fases dentro de la otra, dando lugar a los fenómenos de coexistencia y de histéresis. En cambio, las transiciones continuas se caracterizan por la divergencia de la longitud de correlación y con ella la divergencia de la susceptibilidad, y usualmente, el calor específico. En estas no se produce una discontinuidad en la energía ni en el parámetro de orden, sólo en sus derivadas.

Por otra parte, dentro de las transiciones continuas hay casos especiales que reciben nombres propios. Así, está el caso de las transiciones de tipo Kosterlitz-Thouless o de *orden infinito*, cuyo máximo exponente es la transición del modelo XY en dos dimensiones, que separan una fase desordenada de otra donde las correlaciones decaen de forma algebraica. Otros casos de estudio son las transiciones de fase que se producen en sistemas no ergódicos, como la transición vítrea, donde se da una divergencia del tiempo de relajación.

1.1.1. Caracterización de la transición

En general, estamos interesados en caracterizar las transiciones de fase mediante la simulación de sistemas que necesariamente son de tamaño finito. Dado que el tamaño finito provoca que las singularidades se vean suavizadas, es de trascendental importancia conocer los indicios que señalan el tipo de orden de la transición, en el caso macroscópico. Para ello, vamos a discutir cuales son los aspectos que distinguen el orden y el procedimiento para caracterizar la transición.

Como señalábamos, el aspecto más distintivo de las transiciones de primer orden es la coexistencia de fases y la histéresis. Para ser capaces de ver estas característi-

cas, es necesario alcanzar un tamaño suficientemente grande o bien recurrir al uso de técnicas más sofisticadas como el *colectivo de Gibbs* o el cálculo directo de la energía libre, véase por ejemplo Frenkel y Smit (2001). Si somos capaces de encontrar y caracterizar la coexistencia de fases en un rango determinado de parámetros, podremos asegurar que el carácter de la transición es de primer orden. En cambio, en las transiciones de segundo orden el aspecto más distintivo es la divergencia de la longitud de correlación y el comportamiento de los observables en forma de leyes de potencia de esta longitud. Si encontramos y caracterizamos estas leyes de potencia, podremos asegurar que la transición es de segundo orden. Este método puede presentar dificultades en los casos excepcionales de transiciones de primer orden con una longitud de correlación muy grande. Para tamaños menores que la longitud de correlación, el comportamiento que observaremos será similar al de una transición de segundo orden, pero cuando el tamaño del sistema supera la longitud de correlación, se debería empezar a observar la coexistencia de fases.

Funciones de correlación

Las funciones de correlación asociadas al parámetro de orden, que dan cuenta de las fluctuaciones espaciales del mismo, exhiben un comportamiento en la transición que, en general, es muy diferente en una transición de primer orden y en una de segundo. Usualmente, lejos de la singularidad la función de correlación es significativamente mayor que cero sólo en un rango de distancias determinado y su decaimiento se realiza de forma exponencial. Por ejemplo, en la fase desordenada de un sistema magnético, conforme disminuye la temperatura se forman islas de magnetización, dominios conexos donde los momentos magnéticos de cada sitio tienen direcciones correlacionadas, véase como ilustración la figura 1.1. El tamaño de estas islas de magnetización se corresponde con la longitud de correlación, ξ . De forma similar, en el caso general un sistema fuera del punto crítico está compuesto por pequeños dominios de tamaño ξ correlacionados. Cuando, mediante el cambio de temperatura u otra variable termodinámica x , se acerca el sistema a un punto

crítico, la función de correlación decae como

$$C(r) \sim r^{2-d-\eta} e^{-r/\xi}, \quad (1.1)$$

donde el parámetro η es conocido como dimensión anómala. El símbolo \sim en la ec. (1.1) indica que se trata de la forma asintótica de la correlación, válida sólo en el límite $r \rightarrow \infty$, no significa que la correlación sea proporcional a la expresión de la derecha.

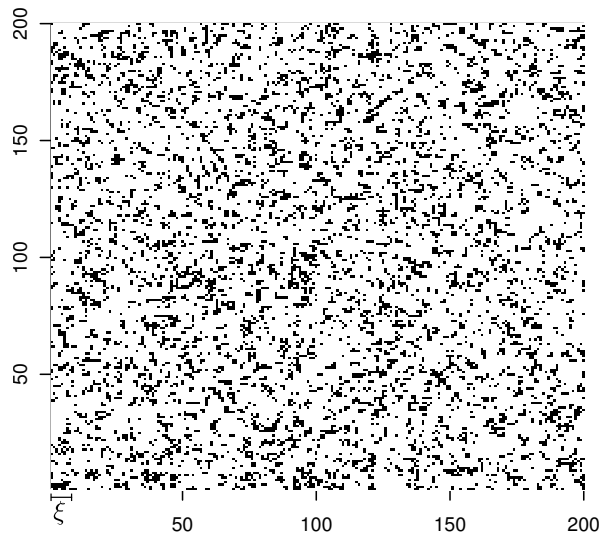


Figura 1.1: Representación de un sistema Ising 200×200 con orden ferromagnético, donde hay formadas islas con magnetización (negro) diferente a la del orden global (blanco), de tamaño ξ pequeño.

El comportamiento de esta longitud de correlación cerca de la singularidad caracteriza el orden de la transición. En el caso de atravesar un punto asociado a una transición de primer orden, la longitud de correlación puede tener un comportamiento discontinuo, en general, con valores finitos y diferentes a ambos lados de la transición. En cambio, en una transición de segundo orden, esta longitud de correlación diverge en ambos lados de la transición. Además, la divergencia de la longitud sigue una ley de potencias, donde el exponente viene definido como

$$\xi \sim |x - x_c|^{-\nu} \quad . \quad (1.2)$$

Tomamos x como la variable que induce la transición, típicamente la temperatura. Como en el caso anterior, esta expresión no implica que ξ sea proporcional a $|x - x_c|^{-\nu}$, sino que sigue esa ley en límite asintótico de $x \rightarrow x_c$. Un fenómeno conocido es que modelos diferentes cuyos hamiltonianos son invariantes bajo las mismas simetrías y tienen la misma dimensionalidad suelen compartir el valor del exponente ν . Se dice que comparten *clase de universalidad* y ν es uno de los *exponentes críticos universales*. La clasificación de las diferentes clases de universalidad viene dada por las simetrías y la dimensionalidad del sistema.

La divergencia de la longitud de correlación implica distintos fenómenos interesantes. El primero es que la función de correlación de (1.1) en el punto crítico decae de forma algebraica, siguiendo una ley $r^{2-d-\eta}$, donde η es también un exponente crítico universal dependiente de la clase de universalidad. Como consecuencia de esto, la correlación evidencia la existencia de una simetría de dilatación, es decir, la correlación verifica $C(\lambda r) = \lambda^{2-d-\eta}C(r)$. Al ampliar la escala, vemos la misma estructura para la función de correlación aunque con menor contraste, se dice que hay invariancia de escala y que tiene una estructura fractal.

Una segunda consecuencia es que la divergencia de la longitud de correlación es un indicio que sugiere describir el punto crítico mediante teorías efectivas que impliquen sólo las fluctuaciones de largo alcance del sistema, o de baja energía, manteniendo las simetrías originales del sistema. De esta forma se construyen teorías efectivas de forma fenomenológica mediante el uso de potencias de los invariantes de estas simetrías. Esta descripción de los sistemas es la conocida como teoría Ginzburg-Landau. La física estadística de campos usa el marco teórico que proporciona este tipo de descripciones para estudiar la clasificación de los puntos críticos.

De forma destacable, en algunos casos la invariancia de escala forma parte de una simetría mayor del sistema, la simetría conforme. En particular, el gran desarrollo de la teoría de campos conforme en dos dimensiones durante las últimas décadas ha permitido la casi completa clasificación de las clases de universalidad mediante el parámetro conocido como carga central. En este sentido hay notables excepciones relacionadas con los puntos de carga central 0, como los modelos de fermiones

desordenados o los modelos de loops bidimensionales que pueden cruzarse, véase por ejemplo (Gurarie y Ludwig, 2004). En el capítulo 5 describimos el estudio de uno de estos modelos de loops en detalle, arrojando luz a alguno de estos problemas que permanecen sin resolver.

En el caso especial de transiciones continuas que conforman las transiciones de tipo Kosterlitz-Thouless, la longitud de correlación diverge de forma exponencial $\xi \sim e^{-(T-T_c)^{-1/2}}$, al acercarse el sistema al punto crítico con $T > T_c$. En éstas, el punto crítico o punto KT separa una fase desordenada de otra donde no hay orden de largo alcance, pero las correlaciones decaen algebraicamente. En esta fase con correlaciones algebraicas hay invariancia de escala, la longitud de correlación es infinita, aunque la dimensión anómala varía continuamente con la temperatura.

Parámetro de orden

En la gran mayoría de las transiciones de fase, las fluctuaciones asociadas al parámetro de orden son las que inducen la transición. Así, tanto en el parámetro de orden como en su distribución se pueden observar indicios del carácter de una transición. El primer fenómeno diferenciador que se observa es que el parámetro de orden, como derivada primera de la energía libre, en transiciones de primer orden presenta un salto en la transición, del valor nulo al de la fase ordenada. Además, si el tamaño es suficientemente grande y el tiempo de simulación no, la histéresis también debe ser visible en este parámetro. En cambio, en transiciones de segundo orden, el parámetro de orden decrece conforme el sistema se acerca al punto crítico desde la fase ordenada siguiendo una ley de potencias,

$$O \sim (x_c - x)^\beta, \quad (1.3)$$

donde $x < x_c$ (por ejemplo la temperatura) y $\beta > 0$ es un exponente crítico universal, en el sentido comentado anteriormente. Nótese, que esto implica que el parámetro de orden es potencia de la inversa de la longitud de correlación, $\xi^{-\beta/\nu}$. Justo en el punto crítico x_c , si se añade un campo que rompe una de las simetrías del hamiltoniano, por ejemplo, el campo magnético en un modelo Ising, el parámetro de

orden también crece como una ley de potencias, aunque con un exponente diferente. En este caso, se suele definir el exponente crítico δ de forma que

$$O \sim h^{1/\delta}, \quad (1.4)$$

en el límite del campo $h \rightarrow 0$.

Por otra parte, también podemos fijar nuestra atención en la distribución del parámetro de orden y en particular en los momentos que la caracterizan. Por ejemplo, la varianza da una definición equivalente de la susceptibilidad y diverge en una transición de fase continua. En contraposición, en el caso de una transición de fase de primer orden la susceptibilidad permanece finita, y probablemente diferente en ambos lados de la transición. La divergencia de esta cantidad en el caso continuo se produce, una vez más, como una ley de potencias. El exponente crítico universal es diferente a los anteriores pero, en general, no es independiente

$$\chi_O \sim |x - x_c|^\gamma. \quad (1.5)$$

Energía

Otro de los observables que permiten apreciar el carácter de la transición es la energía y, más concretamente, su distribución y sus momentos asociados. La distribución de la energía fuera de un punto crítico, en general, tiene forma gaussiana. El argumento para esto es bastante simple y puede entenderse de varias formas, por ejemplo, la energía del sistema puede considerarse como la suma de la energía de los dominios correlacionados de tamaño ξ y por la ley de los grandes números esta distribución ha de ser normal. Esta característica es la que marca la diferencia entre una transición de primer orden y otra continua, dado que en la primera hay coexistencia de dos fases cuyas longitudes de correlación son finitas.

Así, en la zona de coexistencia de una transición de primer orden, la distribución de energía será la suma de las contribuciones de las dos fases. Estas dos distribuciones son las de cada fase y por tanto son distribuciones gaussianas, cuyas medias están separadas por el calor latente, la energía necesaria para cambiar de una fase a otra (a temperatura constante). La varianza de la energía o, equivalentemente, el

calor específico crecerá de forma extensiva fuera de la zona de coexistencia, mientras que dentro de ella ha de crecer como el calor latente (extensivo) al cuadrado. En cambio, en una transición de segundo orden el calor específico suele diverger en el punto crítico, y lo hace con un exponente crítico universal α de forma algebraica

$$C \sim |x - x_c|^{-\alpha}. \quad (1.6)$$

Otra forma de cuantificar la bimodalidad de la distribución de la energía, y de paso estimar el calor latente, es usando el cuarto momento de su distribución. Para ello podemos usar el parámetro

$$\mathcal{V} = \frac{1}{3} \left[\frac{\langle E^4 \rangle}{\langle E^2 \rangle^2} - 1 \right], \quad (1.7)$$

que sirve como redefinición del conocido como parámetro de Binder $V_L = 2/3 - \mathcal{V}$ (Challa *et al.*, 1986). Este parámetro se anula cuando la distribución de la energía es una distribución normal. Para sistemas de tamaño finito tiende a cero como el inverso del volumen. Además, tiene la particularidad de que en las transiciones de segundo orden también se anula, mientras que bajo la existencia de un calor latente tiende a un valor fijo mayor que cero relacionado con éste.

En un sistema de tamaño lateral L finito, para una transición de fase tenemos dos posibles casos. Si la transición de fase es de primer orden, el parámetro cerca de la transición se comporta como $\mathcal{V} \sim A + BL^{-3}$ donde A y B son dos parámetros mayores que cero. Si la transición es continua, cerca del punto crítico el parámetro tiende a cero con un exponente crítico universal, $\mathcal{V} \sim L^{\alpha/\nu-3}$.

Una forma alternativa de distinguir la existencia de un calor latente consiste en usar la proporción entre los momentos centrados de la distribución, de forma similar a la definición del *exceso de kurtosis*. Definimos el parámetro

$$\mathcal{B} = \frac{\langle [E - \langle E \rangle]^4 \rangle}{\langle [E - \langle E \rangle]^2 \rangle^2} - 1, \quad (1.8)$$

que está relacionado con el exceso de kurtosis de la distribución $\gamma_2(E) = \mathcal{B} - 2$. Este parámetro tiene dos límites bien conocidos. Por una parte, para una distribución normal $\mathcal{B} = 2$. Por otra, en el caso de una distribución bimodal compuesta por

dos distribuciones normales separadas una distancia mayor que sus anchuras, \mathcal{B} se anula. En el caso de una distribución como las transiciones de segundo orden, \mathcal{B} tiende a un valor no trivial.

1.1.2. Teoría de Escala

En general, en una transición continua, un observable que se comporta como potencia de la longitud de correlación tiene un comportamiento preciso en sistemas finitos. La divergencia de la longitud de correlación implica que ésta es la escala de longitud relevante, y tanto la parte singular de la energía libre como sus derivadas dependen de la proporción entre ésta y el tamaño del sistema. Así, si la parte singular de la energía libre de un sistema finito f_{sing} se puede expresar en función de $N + 1$ longitudes,

$$f_{\text{sing}}(\xi, \xi_1, \dots, \xi_N, L) = f_{\text{sing}}(1, \xi_1/\xi, \dots, \xi_N/\xi, L/\xi), \quad (1.9)$$

y la longitud de correlación ξ diverge más rápidamente que el resto de longitudes, f_{sing} queda en función sólo de la proporción entre el tamaño del sistema y la longitud ξ . Este argumento conforma la base de la teoría de escala.

Teniendo en cuenta esta expresión (1.9) de la energía libre, se pueden obtener todos los exponentes críticos universales definidos hasta ahora. Además, suficientemente cerca del punto crítico, podemos caracterizar el comportamiento de magnitudes en sistemas finitos. Si una magnitud $M \sim \xi^\theta$ se comporta como una ley de potencias de la longitud de correlación, la teoría de escala predice un comportamiento sencillo en función de la relación entre el tamaño L y la propia ξ :

$$M = L^\theta f(L/\xi) = L^\theta \tilde{f}\left(L^{1/\nu} [x - x_c]\right), \quad (1.10)$$

donde f y \tilde{f} son funciones de escala características de la magnitud M y de la clase de universalidad. Ésto, que se conoce como *colapso de escala*, permite representar las estimaciones de observables para distintos tamaños en una misma curva universal, véase alguna de las figuras 3.5 o 3.8 como ejemplos.

Relación entre exponentes críticos

La divergencia de la longitud de correlación permite el tratamiento de la transición mediante teorías efectivas y el uso de grupo de renormalización, que a su vez predice relaciones concretas entre los diversos exponentes críticos. Es decir, los seis exponentes críticos definidos no son independientes bajo ciertas condiciones bastante generales. En el caso de que la energía libre tenga un único autovalor relevante para la variable de la temperatura, en el sentido de grupo de renormalización, y un único campo que rompa una simetría del hamiltoniano, como es el caso del modelo Ising, se verifican las dos igualdades siguientes

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (\text{Identidad de Rushbrooke}), \quad (1.11)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2 \quad (\text{Identidad de Widom}). \quad (1.12)$$

Además, en modelos en los que no hay interacciones de largo alcance ni otras perturbaciones relevantes, podemos citar otras dos relaciones que se dan a menudo

$$\alpha = 2 - d\nu, \quad \nu < 2/d \quad (\text{Identidad de Josephson}), \quad (1.13)$$

$$\gamma = (2 - \eta)\nu, \quad (1.14)$$

véase Cardy (1996) para más detalles. Estas cuatro relaciones implican que de los exponentes críticos definidos sólo dos son independientes. Insistimos en que estas dos últimas relaciones no se verifican en todos los casos, de hecho, un ejemplo bastante conocido es el del modelo de Ising con campo aleatorio (RFIM del inglés *Random Field Ising Model*), en donde el desorden introducido por el campo aleatorio es una perturbación relevante.

1.1.3. Transición de fase cuántica

Otro tipo de transiciones de fase se producen cuando un sistema macroscópico de dimensión d está a temperatura 0. En estas condiciones, el sistema está en el estado fundamental del hamiltoniano. Consideremos por simplicidad que dicho hamiltoniano $H(g)$ depende de una variable de acoplo g de forma continua. Un

punto de no-analiticidad en el estado fundamental de la energía g_c de un sistema de tamaño infinito es una transición de fase cuántica. Este punto se puede dar de varias formas, por ejemplo, que en el hamiltoniano original haya un cruce de niveles energéticos al cambiar g (puede darse en sistemas finitos incluso) o que el gap de las primeras excitaciones de energía en g_c desaparezca conforme el sistema aumenta de tamaño.

Si consideramos sólo las transiciones de fase cuánticas que sean continuas, al igual que en las clásicas, indefectiblemente podremos definir una longitud de correlación que diverge conforme g se aproxima al punto crítico, lo cual da pie a la definición del exponente crítico en estas transiciones,

$$\xi \sim |g - g_c|^{-\nu}. \quad (1.15)$$

En este punto, como indicamos, el gap de las excitaciones desaparece y lo hace en forma de ley de potencias, con un exponente crítico universal. Para su definición se suele usar el denominado *exponente crítico dinámico* z , que permite relacionar las excitaciones con la longitud de correlación

$$\Delta \sim |g - g_c|^{z\nu} \sim \xi^{-z}. \quad (1.16)$$

De esta forma, estas excitaciones en energía son inversamente proporcionales a una potencia de la longitud de correlación.

Si este exponente crítico dinámico tiene valor 1, mediante la expresión de la función de partición del modelo cuántico

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H(g)} \quad (1.17)$$

en términos de la integral de caminos de Feynman, se puede obtener un “mapeo” a modelos de mecánica estadística clásica en $d + 1$ dimensiones. Para ello se identifica el tiempo imaginario de los factores $e^{-\tau H}$ con una dimensión espacial más, lo que lleva a la “igualdad” formal entre las funciones de partición del modelo clásico y del modelo cuántico. Este *mapeo* es en realidad sólo válido en el límite en el que el tiempo τ es pequeño, es decir, en el límite de fluctuaciones de baja energía. Pero

este es el límite de una transición de segundo orden y permite la clasificación de la clase de universalidad de muchas transiciones cuánticas. Remarcamos que en este caso no son las fluctuaciones en temperatura las que provocan la transición, sino las fluctuaciones cuánticas en energía de orden τ^{-1} .

Criticalidad de deconfinamiento

El comportamiento cualitativo de las transiciones de fase hasta ahora descritas, incluidas las transiciones de fase cuánticas, viene bien caracterizado bajo el conocido como paradigma Landau-Ginzburg-Wilson (LGW), mediante teorías efectivas Ginzburg-Landau y grupo de renormalización. En este paradigma, son las fluctuaciones de larga distancia y baja energía del parámetro de orden las que producen la transición y su comportamiento. Sin embargo, a principios de la década del 2000, empezaron a surgir indicios de la existencia de puntos críticos en los que se evidenciaba el fallo de este paradigma en transiciones de fase cuánticas. Entonces, unos primeros artículos por Assaad *et al.* (1996, 1997); Sandvik *et al.* (2002) aseguraban haber encontrado una transición continua directa entre dos fases ordenadas, donde las simetrías rotas eran diferentes. Esta situación en una descripción simple mediante la teoría Landau implica bien una transición de primer orden entre ambas fases, bien una región de coexistencia o bien un punto multicrítico. Sin embargo, parecía difícil de explicar que estas simulaciones hubiesen conseguido ajustar los parámetros a un punto multicrítico.

Senthil *et al.* (2004a,b) dieron un argumento de cómo este tipo de transiciones podían ser continuas. Mostraron a su vez cómo en varios ejemplos de transiciones de fase cuánticas se violaba el paradigma LGW. En estos casos la descripción natural en la teoría de campos no es en términos de los parámetros de orden, que describen ambas fases, sino en términos de grados de libertad emergentes que son específicos del punto crítico.

1.2. Modelos de loops

Una clase bastante general de problemas en física estadística concierne a sistemas donde las propiedades de estudio tienen carácter geométrico. En esta memoria estamos interesados en aquellos en los que se suelen diferenciar dos fases, una en la que los objetos geométricos son finitos y pequeños, y otra en la que hay al menos uno infinito. En determinadas ocasiones la singularidad que separa estas dos fases no tiene su correspondencia en las medidas locales o termodinámicas asociadas al sistema. Suelen ser modelos en los que la función de partición es trivial, de valor unidad, pero en el límite adecuado las funciones de correlación no son triviales.

Entre los primeros modelos en los que se estudió este tipo de problemas destacan los conocidos como modelos de *percolación*, desarrollados para el estudio del paso de fluidos a través de sistemas porosos. En estos modelos típicamente hay una transición de fase continua y se observa el fenómeno de universalidad. Además, estos modelos aparecen como aproximación de multitud de procesos, desde la propagación de fuegos hasta las transiciones de Anderson. En el caso bidimensional, por otra parte, existe una equivalencia directa entre percolación y ciertos modelos de loops que describiremos más adelante.

Los modelos de loops, por su parte, se enmarcan dentro de esta clase de modelos geométricos donde los grados de libertad del problema no son objetos puntuales o espines, sino los caminos cerrados de tamaño variable que definen los loops. Al igual que en otros problemas de física estadística, podremos definir su función de partición, el parámetro de orden, funciones de correlación o energía asociada.

En un punto crítico de esta clase de modelos geométricos, la invariancia de escala implica la existencia de objetos con carácter fractal. El estudio de fractales en física cobró importancia gracias a los trabajos de Mandelbrot que propiciaron avances en el estudio del comportamiento crítico de diferentes modelos. Por ejemplo, una cantidad importante que los caracteriza es la dimensión fractal, d_f , que para los loops podemos definirla como la constante de proporcionalidad entre los logaritmos de la longitud l que recorre el objeto entre dos puntos y la distancia euclídea entre

ellos $R(l)$,

$$R(l) \sim l^{1/d_f}. \quad (1.18)$$

1.2.1. Percolación

Comenzamos el repaso de diferentes modelos geométricos sencillos con los modelos de percolación, paradigma de los modelos geométricos. Una exposición más detallada viene dada por ejemplo por Stauffer y Aharony (1994). Concretamente, queremos repasar la asociación de loops a los *clusters de percolación* y cómo las propiedades geométricas de ambos modelos coinciden.

Dentro de los distintos modelos de percolación, el modelo en el que nos concentramos aquí es el conocido como *modelo de percolación de enlaces*. Consideremos una red bidimensional cuadrada $L \times L$ en la que puede haber enlaces entre nodos vecinos con probabilidad p . Si $p = 1$ todos los nodos están unidos por enlaces, en cambio, si $p = 0$ todos los nodos están aislados. Para valores intermedios de p habrá algunos sitios conectados por enlaces, mientras que otros quedarán aislados. En estas condiciones, podemos definir diversos objetos geométricos, entre los que destaca el concepto de *cluster*: conjunto de sitios conectados mediante enlaces. Se dice que un cluster percola cuando incluye enlaces que tocan extremos opuestos del sistema. La percolación o no de un cluster es uno de los objetos centrales de estudio de los modelos de percolación y una de las características principales de un cluster.

La caricatura que proporcionábamos de los dos valores extremos, $p = 0$ y $p = 1$, indica que hay dos fases diferentes, en una hay al menos un cluster que percola (la red entera en $p = 1$) y en la otra no. Además, se puede definir de forma estándar la función de partición como

$$Z_{\text{per}} = \sum_{\mathcal{C}} p^{N-N_i} (1-p)^{N_i}, \quad (1.19)$$

donde N es el número máximo de enlaces ($2L^2$ en la red cuadrada con condiciones de contorno periódicas) y N_i el número de enlaces de una configuración \mathcal{C} . A pesar de que esta función de partición se puede sumar y su valor es trivialmente igual a la unidad, se produce una transición de fase continua a un valor p_c , $1/2$ en la red

cuadrada, y los distintos objetos geométricos y correlaciones siguen leyes universales como en otras transiciones continuas. En el punto crítico, además, hay invariancia de escala y se pueden observar las características fractales. Por ejemplo, se puede ver en la representación del número de enlaces de un cluster frente al diámetro del mismo o mediante el estudio de la longitud del borde del cluster.

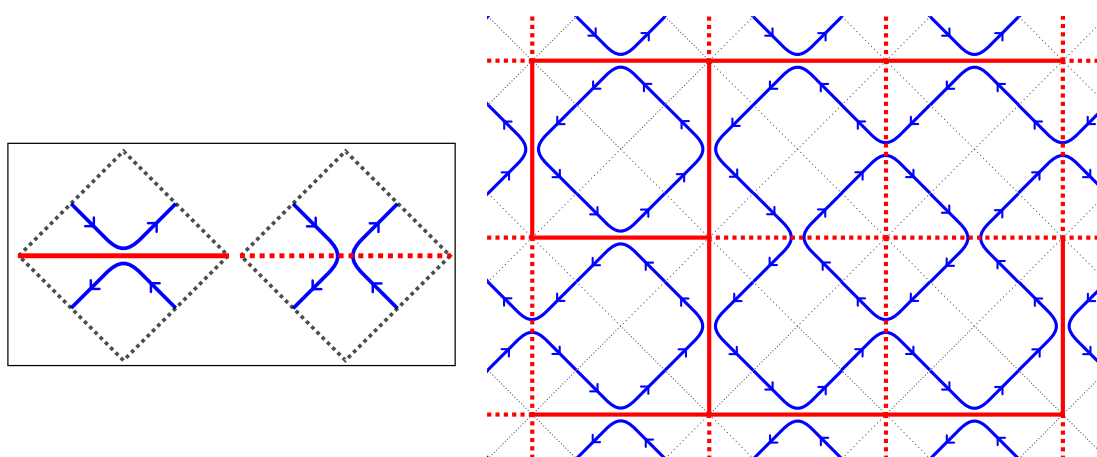


Figura 1.2: En el panel de la izquierda se muestran los dos posibles estados del enlace (color rojo), presente con línea continua o ausente con línea discontinua, y los dos posibles emparejamientos de loops (color azul) asociados a cada estado. En el panel de la derecha se muestra una configuración de percolación de enlaces, formado como un mosaico de las piezas del panel de la izquierda. Se puede observar la formación de loops y como estos siguen el contorno del cluster de enlaces.

Este modelo de percolación nos permite introducir por primera vez un modelo de loops y la función de partición asociada servirá de base para los diferentes modelos estudiados durante esta memoria. En el panel de la izquierda de la figura 1.2 se muestran los dos posibles estados de un enlace (color rojo) y cuatro ramas de loops emparejadas de distinta forma en cada uno de los casos. Como se puede observar, los loops construidos mediante la unión de estas configuraciones están definidos en una red cuadrada, orientada 45 grados respecto de la original y cuyos nodos residen en el punto medio de los enlaces de la red de percolación. Las cuatro ramas de loops tienen

asignadas orientaciones de forma que conservan continuidad, y su emparejamiento viene completamente determinado por la presencia o no del enlace. En la presencia del enlace las ramas de loop evitan cruzarlo, mientras que en su ausencia cruzan la zona en donde estaría. Usando estos dos posibles estados y configuraciones de loops, podemos generar un mosaico en el que cada configuración del modelo de percolación da lugar a una configuración única de loops, salvo un cambio de orientación global de todos los loops. Véase el panel de la derecha de la figura 1.2 como ejemplo.

Los estados $p = 0$ y $p = 1$ generan dos versiones diferentes de la red bidimensional orientada y con número de coordinación cuatro conocida como red L, véase la figura 1.3. Esta red L tiene una simetría adicional, las fases $p = 0$ y $p = 1$ sólo se diferencian mediante condiciones de contorno adecuadas. Esto confirma, por otra parte, el conocido resultado para percolación de que las propiedades de ambas fases son iguales, es decir, hay simetría $p \leftrightarrow 1 - p$, el papel de los clusters de enlaces se intercambia con el de los clusters de los huecos. Si ahora queremos escribir la función de partición para los loops, debemos considerar los nodos de la red L y asociarle una probabilidad p según el emparejamiento de los enlaces. Si N_p es el número de emparejamientos de un tipo y N_{1-p} es el del otro, teniendo en cuenta que las orientaciones de los cuatro enlaces cambian de forma alternada en la red, podemos escribir la función de partición como

$$Z_{\text{loops}} = \sum_{\alpha \in \mathcal{C}} p^{N_p} (1-p)^{N_{1-p}}, \quad (1.20)$$

donde N_p y $N_{1-p} = N - N_p$ son el número de emparejamientos en ausencia y presencia del enlace, respectivamente. Esta es exactamente la misma función de partición que la de percolación, ec. (1.19). Este modelo de loops se conoce como el *modelo de loops completamente empaquetados* (a veces lo denotaremos como CPL). El término completamente empaquetados hace referencia al hecho de que todos los enlaces de la red se usan para formar loops. Además, los distingue de los conocidos como *totalmente empaquetados (fully-packed)* cuyos enlaces no tienen orientación ???. Los loops aquí definidos siguen el contorno de los clusters de percolación.

También es ampliamente conocida otra versión de los modelos de percolación, la *percolación de sitios*, en donde la entidad que uno ocupa con probabilidad p o no

con probabilidad $1 - p$ son los sitios de la red y los clusters son los conjuntos de sitios ocupados vecinos. Pero en el punto crítico, se da el fenómeno de universalidad y aunque no comparten para la misma red el mismo valor crítico p_c , sí que comparten los valores críticos de los exponentes.

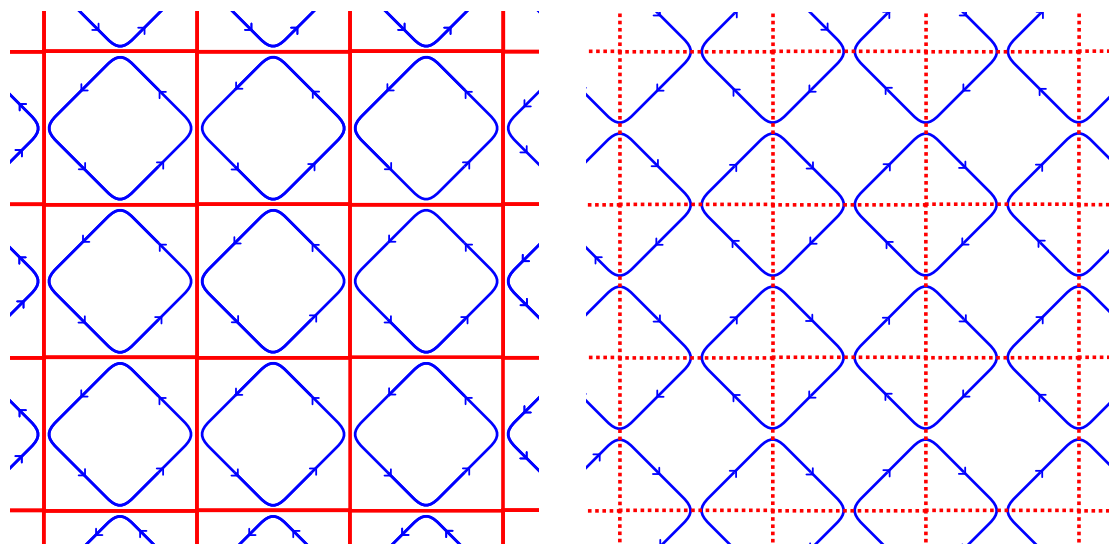


Figura 1.3: Configuraciones límites $p = 1$ (izquierda) y $p = 0$ (derecha) del modelo de percolación de enlaces y las configuraciones de loops asociadas. La red que forman los loops es una red cuadrada, cuyos enlaces tienen dirección, conocida como red L. Las condiciones de contorno adecuadas imponen la presencia de un loop que rodea el contorno en una de las dos fases.

1.2.2. Modelo de Ising

Antes de indicar la relación entre el CPL y una expansión de altas temperaturas, vamos a repasar la representación en forma de modelos de loops de las expansiones de altas temperaturas para el modelo de Ising y los modelos $O(n)$. Estas expansiones de altas temperaturas en dos dimensiones dan pie a representaciones gráficas, que en determinadas redes se pueden expresar un conjunto de loops.

Consideremos el modelo Ising bidimensional sobre la red cuadrada, donde el

hamiltoniano está definido como

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad (1.21)$$

con los s_i variables que toman valores ± 1 y donde indicamos con $\langle i, j \rangle$ que la suma se produce a todos los pares de primeros vecinos. El planteamiento del problema en física estadística pasa por el cálculo de la función de partición

$$Z = \text{Tr} \left(e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j} \right), \quad (1.22)$$

donde hemos usado la abreviatura Tr como la suma a todos los posibles valores del conjunto de los $\{s_i\}$, es decir, $\sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1}$. Una aproximación de esta suma se puede realizar mediante una expansión de altas temperaturas. Dado el carácter discreto y bi-evaluado de la exponencial para cada enlace, cada factor puede reescribirse de forma exacta como

$$e^{\beta J s_i s_j} = A (1 + x s_i s_j), \quad A = \cosh(\beta J), \quad x = \frac{1}{1 + e^{-2\beta J}}. \quad (1.23)$$

Se puede establecer entonces una relación exacta entre la exponencial y una expresión similar a la expansión de altas temperaturas. Es decir, podemos desarrollar el producto de exponenciales de la ecuación (1.22) como

$$Z = A^{N\gamma/2} \text{Tr} \left[1 + x \left(\sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \right) + x^2 \left(\sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\langle k,l \rangle} s_i s_j s_k s_l \right) + \cdots \right]. \quad (1.24)$$

La suma que queda al realizar dicho producto es una suma en términos de potencias del parámetro x , que podemos describir de forma gráfica tal y como explicamos a continuación. Un producto del tipo $(s_i s_j)(s_k s_l) \cdots (s_m s_n)$ se corresponde con una representación gráfica mediante enlaces entre los sitios vecinos $(i, j), (k, l), \dots, (m, n)$. En la figura 1.4 se pueden ver representados dos de estos términos.

Cada término que conforma la expansión es en realidad un producto de potencias de los espines de diferentes sitios $s_i^{n_i} \cdots s_k^{n_k}$, donde la potencia n_i depende del número de enlaces que tiene el sitio i en la representación gráfica y puede tener valores 0, 1, 2, 3 ó 4. Al hacer la traza y sumar a todos los posibles valores de cada sitio s_i , los términos en los que alguna potencia n_i es impar se anulan, mientras que aquellos

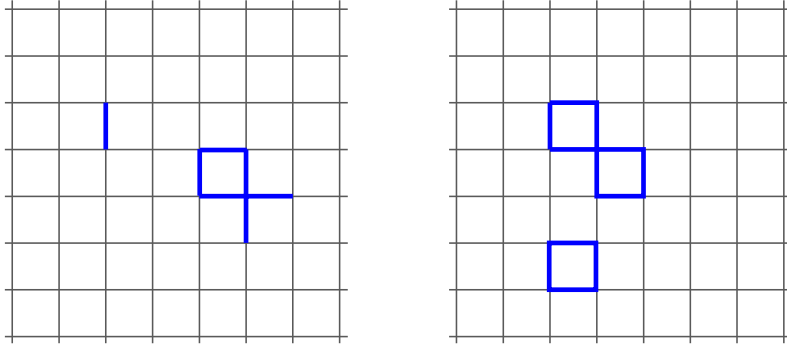


Figura 1.4: Se muestran posibles términos de la expansión gráfica del modelo de Ising. En el panel de la izquierda se muestra un término que se anula dado que hay varios sitios que sólo aparecen una vez. En el de la derecha, se muestra otro término que en este caso no se anula y está asociado a la duodécima potencia de x (número de enlaces).

con sólo potencias pares dan valor 1. Estos términos se corresponden con grafos cerrados en la red cuadrada y la suma de la función de partición se reduce a contar el número de estos caminos cerrados,

$$Z = A^{N\gamma/2} \left[1 + x^4 (\# \text{ cuadrados } 1 \times 1) + x^8 \dots \right] \propto \sum_{\mathcal{C}} x^{\text{longitud}}, \quad (1.25)$$

suma a las configuraciones \mathcal{C} en las que cada sitio tiene un número par de enlaces y donde “longitud” indica el número total de enlaces, es decir, la suma de las longitudes de todos los caminos en la configuración \mathcal{C} . Usamos el símbolo $\#$ como *numeral*.

Si en vez de la red cuadrada elegimos la red hexagonal, figura 1.5, podemos comprobar como estos grafos forman loops que no se cruzan, véase Cardy (2005b). En esta red, además, los loops que se forman de la expansión en altas temperaturas son a su vez las paredes de dominio de un modelo Ising definido en la red dual, la red triangular. Aquí, el régimen de bajas temperaturas del modelo original se corresponde con el de altas temperaturas del de la red dual, por lo que en el límite de temperatura cero, los espines de la red dual son aleatorios e independientes. Si asociamos al estado $s = 1$ el estado ocupado y el vacío al estado $s = -1$, podemos

observar el comportamiento de percolación en la red dual. Como el punto crítico de percolación de sitios en la red triangular es justo $1/2$, a temperatura cero y por tanto $x = 1$, las propiedades de las curvas son las de los clusters de percolación.

En definitiva, el modelo de Ising bajo una expansión en altas temperaturas da pie a una descripción gráfica y a un problema geométrico, que en la red adecuada es en forma de modelo de loops. Una de las soluciones del modelo, más sencilla que la original de Onsager (1944), viene dada al contar el número de caminos cerrados de todas las posibles configuraciones (Vdovichenko, 1965), para una exposición pedagógica pueden consultarse Landau y Lifshitz (1980) o Feynman (1998).

A pesar de que en este caso se trata de un mapeo exacto entre un modelo de física estadística y un problema geométrico, la forma aproximada de la expansión en altas temperaturas mantiene las mismas simetrías de la función de partición original. De esta forma, sitúa en la misma clase de universalidad la transición de fase del modelo original y el modelo asociado a la expansión gráfica. Es decir, aunque en principio la correspondencia entre la expansión gráfica y el modelo original no sea exacta, como las funciones de partición guardan las mismas simetrías, en caso de haber un punto crítico, en general, las propiedades universales serán las mismas.

1.2.3. Modelos de loops $O(n)$

Consideremos ahora una red hexagonal, por simplicidad, en donde en cada sitio hay una variable que, en vez de tomar dos valores discretos, es un vector real de dimensión n con valores dentro del conjunto de vectores $\{\vec{s} \in \mathbb{R}^n / \|\vec{s}\| = n\}$. Usamos la normalización $\|\vec{s}\| = n$ con el fin de simplificar las relaciones, usar la normalización unidad implicaría al final un factor global en la función de partición de la forma n^{-N} , con N el número de nodos. El hamiltoniano es similar al del modelo de Ising, con la diferencia de que ahora la interacción es un producto escalar entre vectores

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j. \quad (1.26)$$

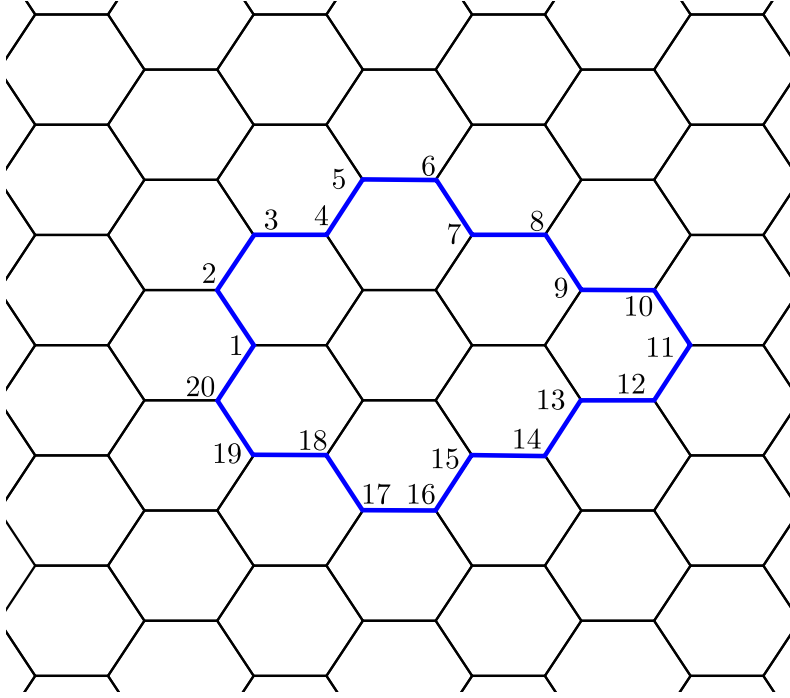


Figura 1.5: Loop originado en la red hexagonal proveniente del término $\text{Tr} (s_1^\alpha s_2^\alpha)(s_2^\beta s_3^\beta) \cdots (s_{20}^\eta s_1^\eta) = \delta^{\alpha,\eta} \delta^{\alpha,\beta} \cdots \delta^{\gamma,\eta} = \delta^{\alpha\alpha} = n$ (convenio de suma de índices repetidos).

Aunque en este caso no se puede establecer una relación equivalente entre los factores de la función de partición y una forma similar a la expansión en altas temperaturas, vamos a considerar directamente esta expansión

$$Z_{O(n)} = \text{Tr} \left[\prod_{\langle i,j \rangle} (1 + x \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j) \right], \quad (1.27)$$

correspondiente al hamiltoniano definido como

$$\beta \tilde{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \log (1 + x \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j) \quad . \quad (1.28)$$

Insistimos que aunque ambos hamiltonianos, (1.26) y (1.2.3), son similares sólo en el límite $\beta \rightarrow 0$ y $x \rightarrow \beta J$, ambos son invariantes bajos las mismas simetrías. Entonces, podemos esperar que en el punto crítico las propiedades universales sean iguales.

La expansión del producto de la función de partición (1.27) se puede expresar otra vez de forma gráfica, tal y como indicamos en el modelo de Ising, con la única

diferencia de que en esta ocasión la traza se realiza como integral a los vectores \vec{s}_i . La traza a este conjunto, definida de forma que $\text{Tr } 1 = 1$, cumple una propiedad similar a la del modelo de Ising,

$$\begin{aligned} \text{Tr } s_i^\alpha s_j^\beta &= \delta_{ij} \delta^{\alpha\beta}, \\ \text{Tr } s_i^\alpha s_i^\beta s_i^\gamma s_i^\eta &= \frac{n}{n+2} \left(\delta^{\alpha\beta} \delta^{\gamma\eta} + \delta^{\alpha\gamma} \delta^{\beta\eta} + \delta^{\alpha\eta} \delta^{\beta\gamma} \right). \end{aligned} \quad (1.29)$$

Estamos, por tanto, en condiciones similares a las anteriores, la función de partición queda expresada una vez más como suma de términos en potencias de cada \vec{s}_i y los únicos que no se anulan son los términos donde aparecen cero o dos veces, en la red hexagonal, véase la figura 1.5. Una vez hecha la traza quedan los mismos caminos cerrados que en el modelo de Ising, que en esta red son loops, aunque el valor de la contribución de cada uno es n en vez de uno, por la contribución del último vector. En la figura 1.5 se muestra como ejemplo un término que no se anula. Queda entonces que la forma de la función de partición es similar a (1.25), pero con un factor multiplicativo n por cada loop de la configuración,

$$Z_{O(n)} = \sum_{\mathcal{C}} x^{\text{longitud}} n^{\#\text{loops}}. \quad (1.30)$$

El factor $n^{\#\text{loops}}$ hace la función de *fugacidad*, para valores de n grandes las configuraciones con más loops son más probables.

Aunque la definición del modelo $O(n)$ en (1.27) sólo tiene sentido para n enteros positivos, esta nueva expresión (1.30) sí que permite una extensión al resto de la recta real. Cabe destacar que diversos valores de n son modelos bastante conocidos, aparte del caso $n = 1$. Por ejemplo, el caso $n = 0$ se corresponde a un único camino sin cruces, modelo relacionado con el caminante que se auto-evita (*self-avoiding random walk*) y que describe el comportamiento de cadenas largas y flexibles de polímeros. O por último, el caso $n = -2$ se corresponde con el caminante aleatorio con loops-borrados (*loop-erased random walk*). Para un análisis más detallado véase Cardy (2005b).

1.2.4. Representación de Fortuin-Kasteleyn y el modelo de Potts

Por último, antes de volver al modelo de loops completamente empaquetados, podemos introducir un tratamiento del modelo de Potts mediante la construcción de los conocidos como clusters de Fortuin-Kasteleyn (FK). Esta es la llamada representación de cluster aleatorio o de FK (Fortuin y Kasteleyn, 1972). Para ello volvamos a considerar la expresión de altas temperaturas del modelo, donde s_i puede tomar valores discretos de 1 hasta q y con la diferencia de que ahora en vez de la variable x escribimos $p/(1-p)$,

$$Z_{\text{FK}} = \text{Tr} \prod_{\langle i,j \rangle} \left[(1-p) + p \delta_{s_i, s_j} \right]. \quad (1.31)$$

En este caso, al expandir el producto quedan factores de la forma

$$p^{N_p} (1-p)^{N-N_p} \text{Tr} \delta(s_{i_1}, s_{i_2}) \cdots \delta(s_{i_{2N_p-1}}, s_{i_{2N_p}}), \quad (1.32)$$

que sobreviven sólo cuando todos los s_{i_k} vecinos son iguales, configuración que podemos representar mediante enlaces entre vecinos iguales. Los clusters de estos enlaces son los clusters de FK. Además, cada configuración que sobrevive lo hace para q valores, por lo que queda una contribución de la forma $q^{\#\text{clusters}}$. Así, hacer la traza da como resultado una función de partición del tipo

$$Z_{\text{FK}} = \sum_{\mathcal{G}} p^{N_p} (1-p)^{N-N_p} q^{\#\text{clusters}}, \quad (1.33)$$

siendo \mathcal{G} el conjunto de posibles configuraciones de los clusters de FK. El límite $q \rightarrow 1$ es exactamente la función de partición de percolación de enlaces, ec. (1.19). Siguiendo esta analogía, esta representación como modelo de clusters aleatorios puede sustituirse por otra de un gas de loops, como el que definimos en la sección 1.2.1. Se demostró, que en la llamada *fase densa* el factor de los clusters es equivalente a contar cada loop con una *fugacidad* \sqrt{q} , véase por ejemplo Cardy (2005b).

1.2.5. Modelos de loops completamente empaquetados

Volvemos al modelo de loops completamente empaquetados que comentamos al final de la sección 1.2.1, y cuya versión tridimensional estudiaremos en detalle en el

capítulo 3. Las simetrías asociadas a este modelo y la teoría de campos que describe sus propiedades a largas distancias las detallamos en la sección 1.3.2.

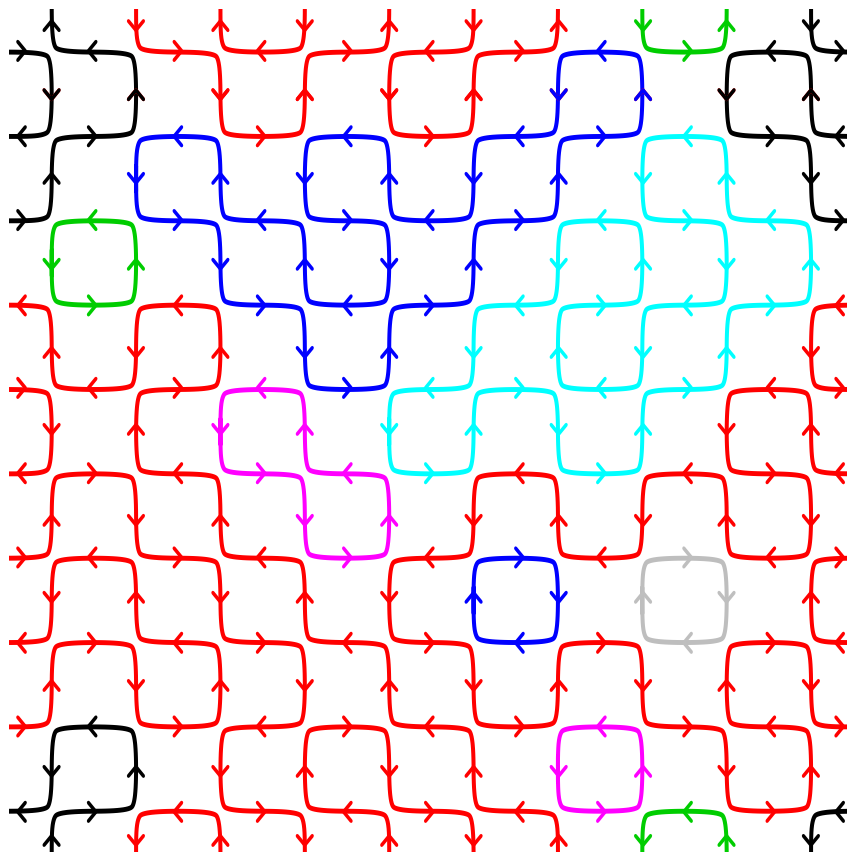


Figura 1.6: Una configuración del modelo loops completamente empaquetados (CPL) en una red 10×10 con condiciones periódicas. Se le ha asignado un color diferente a cada loop, con el único propósito de ayuda visual para diferenciar los loops, no como parte de la configuración.

Damos a continuación una definición precisa del CPL describiendo una configuración, como el ejemplo de la figura 1.6. En una configuración dada, los loops están definidos en una red de coordinación cuatro cuyos enlaces están orientados, de forma que en cada nodo entran dos y salen dos. Definimos en este caso los loops en la red L . Los cuatro enlaces de cada nodo se pueden emparejar de dos formas manteniendo la orientación de los enlaces. La probabilidad de cada emparejamiento viene asociada a una variable $0 \leq p \leq 1$, véase la figura 1.7, y alterna entre las dos subredes de la red cuadrada. Es decir, el estado asociado a la probabilidad p en una

subred es el mismo estado que el asociado a $1 - p$ en la otra subred. En la figura 1.6 está representada una configuración de un sistema 10×10 con condiciones de contorno periódicas.

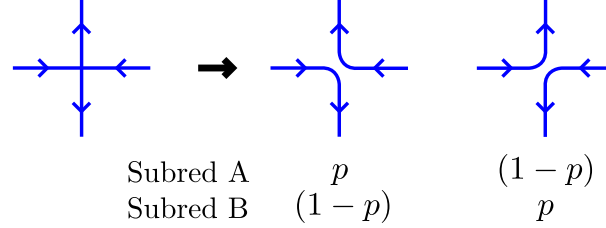


Figura 1.7: Emparejamientos de los términos de la función de partición para el modelo de loops completamente empaquetados en la red L , ec. (1.34). También se indican los pesos asociados a cada emparejamiento, que alternan según la subred. Otros emparejamientos son posibles como los asociados a la red de Manhattan.

Tal y como hemos definido la red L , la configuración en $p = 0$ se corresponde con un conjunto de loops cerrados formados por cuatro enlaces que giran en sentido horario, mientras que en $p = 1$ lo hacen en sentido anti-horario. En la definición de este modelo añadimos una fugacidad asociada al número de loops n , de forma que valores de n grandes favorecen configuraciones con más loops. La función de partición es entonces

$$Z_{\text{CPL}} = \sum_{\mathcal{C}} p^{N_p} (1 - p)^{N - N_p} n^{\#\text{loops}}, \quad (1.34)$$

donde la suma es a las configuraciones de loops \mathcal{C} y N_p el número de estados asociados a p . Cuando n es entero podemos reescribir la función de partición si asociamos a cada loop un color de 1 a n , por lo que por cada loop hay n factores de Boltzmann y queda $Z_{\text{CPL}} = \sum_{\mathcal{C}} \sum_{\text{colores}} p^{N_p} (1 - p)^{N - N_p}$.

En este modelo de loops en dos dimensiones, las dos fases para valores extremos de p difieren en la presencia de un loop que rodea el contorno del sistema, con las condiciones de contorno adecuadas. Hay un punto crítico en $p = 1/2$ y se corresponde con la llamada *fase densa* del modelo de loops $O(n)$, o con SLE_{κ} con $\kappa > 4$ (Cardy, 2005b). Como indicamos en la sección 1.2.1, en $n = 1$ los loops siguen los

contornos de los clusters de percolación, por lo que los valores de los exponentes críticos se conocen de forma exacta: la dimensión fractal de los loops es $d_f^{\text{perc}} = 7/4$ y el exponente crítico de la longitud de correlación es $\nu^{\text{perc}} = 4/3$. Estos exponentes críticos también dan estimaciones para los exponentes en la clase de simetría C de las transiciones de Anderson (la transición de efecto Hall cuántico de spin), vía un mapeo exacto (Gruzberg *et al.*, 1999; Beamond *et al.*, 2002; Mirlin *et al.*, 2003; Chalker *et al.*, 2011).

La función de partición del modelo de loops completamente empaquetados se puede definir de forma equivalente en cualquier red de coordinación 4, independientemente de la dimensionalidad. Por ejemplo, en la red del diamante (Ortuño *et al.*, 2009) o en las redes L y K tridimensionales (Cardy, 2010), definidas en el capítulo 3. En tres dimensiones hay una fase con loops extendidos y estudiaremos el comportamiento de la transición de fase para distintos valores de n . En $n = 1$, los exponentes críticos son también los de la clase de simetría C de la transición de Anderson tridimensional (Ortuño *et al.*, 2009): $d_f = 2.539(9)$ y $\nu = 0.9985(15)$.

Por último, cabe destacar que a estos loops se le pueden añadir modificaciones que cambien el comportamiento del sistema. Así, por ejemplo, se pueden añadir otro tipo de fugacidades como una asociada a la longitud de los loops o al área que abarcan. Otra posibilidad es permitir la posibilidad de cruces en los nodos, en esta red L. Esto provoca que los loops no puedan orientarse de manera consistente, de forma que las simetrías del modelo son claramente diferente a las del CPL.

1.2.6. Modelos de loops con cruces

Otro modelo de loops que estudiaremos será el modelo de loops completamente empaquetados con cruces (CPLC). Su estudio lo realizamos en detalle en el capítulo 5 y su comportamiento a largas distancias se puede describir mediante las teorías de campos mencionadas en la sección 1.3.1.

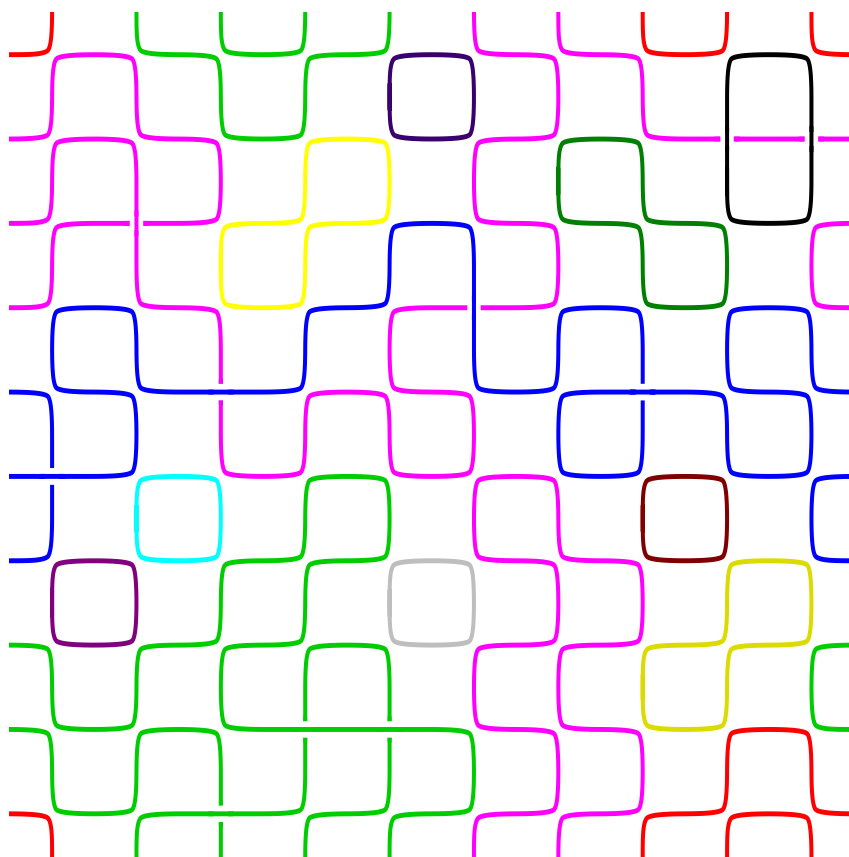


Figura 1.8: Una configuración del modelo loops completamente empaquetados con cruces (CPLC) en una red 10×10 con condiciones periódicas. Se le ha asignado un color diferente a cada loop, con el único propósito de ayuda visual para diferenciar los loops, no como parte de la configuración.

Loops completamente empaquetados con cruces

Definimos ahora en detalle el CPLC describiendo una configuración como la del ejemplo de la figura 1.8. En una configuración dada, se definen los loops en una red cuadrada donde los enlaces no están orientados, a diferencia del caso anterior. En cada nodo se emparejan los enlaces de tres posibles formas con los pesos asociados que se indican en la figura 1.9. Al emparejamiento donde se produce el cruce se asocia un peso p y los pesos $(1-p)q$ y $(1-p)(1-q)$ se asocian a los dos emparejamientos equivalentes a los del CPL, de forma alternada aquí también.

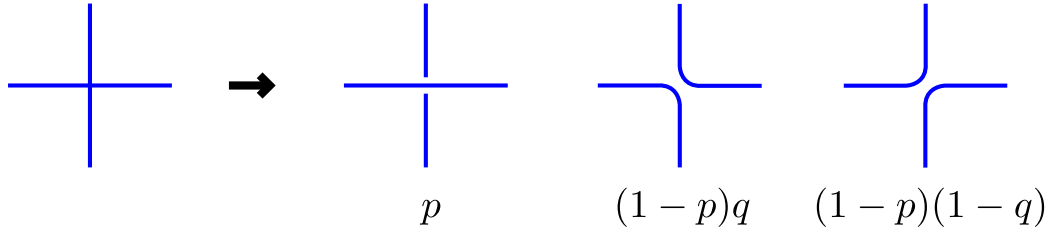


Figura 1.9: Emparejamientos del modelo CPLC en una de la subredes de la red cuadrada. En la otra subred, los pesos $(1-p)q$ y $(1-p)(1-q)$ se intercambian.

La función de partición para este modelo es

$$Z_{\text{CPLC}} = \sum_{\mathcal{C}} p^{N_p} [(1-p)q]^{N_q} [(1-p)(1-q)]^{N_{1-q}} n^{\#\text{loops}}, \quad (1.35)$$

donde N_p , N_q y N_{1-q} son el número de estados asociados a los pesos p , $(1-p)q$ y $(1-p)(1-q)$ respectivamente. En el contorno del diagrama de fases ($p=0$, $q=0$ o $q=1$), los loops pueden orientarse de forma consistente eligiendo la orientación de uno de ellos. Ahí, el CPLC se corresponde con el CPL definido en distintas redes. Así, en $p=0$, las orientaciones se corresponden con las de la red L, mientras que en $q=0$ o $q=1$ se corresponden con las de la red de Manhattan Beamond *et al.* (2002, 2003).

Este modelo de loop permite la existencia de una fase con loops extendidos, pero donde las correlaciones decaen de forma logarítmica. Esta fase es la conocida como *fase de Goldstone*. Su estudio y el de las líneas críticas que la separan de las fases de loops cortos lo realizamos en el capítulo 5.

Loops incompletamente empaquetados con cruces

Con el fin de introducir las teorías de campos, seguimos Nahum *et al.* (2013b) para definir otro modelo más de loops con cruces. Los loops en este modelo no estarán completamente empaquetados, pero las propiedades universales serán las mismas que las del CPLC. Nos referimos a este modelo como el modelo de loops incompletamente empaquetados o IPLC.

Para generar una configuración en el IPLC, primero coloreamos las plaquetas de la red cuadrada de blanco o negro, generando una configuración de percolación de sitios formada por las caras de la red cuadrada. Los loops en el IPLC son entonces contornos de los clusters, como se muestra en la figura 1.10. Sin embargo, la configuración de loops no está unívocamente determinada por la configuración de clusters: para cada nodo que un loop visita dos veces, es decir, donde el contorno de dos clusters coinciden, debemos elegir cómo se conectan. Si permitimos los cruces, los tres posibles emparejamientos son los mismos de la figura 1.9.

El factor de Boltzmann es el de la configuración de percolación, $q^{N_B}(1-q)^{N_W}$, donde N_B y N_W son el número de caras negras y blancas, respectivamente, y usamos q como probabilidad en vez p . Entonces, una configuración de percolación dada corresponde a 3^N configuraciones de loops \mathcal{C} , donde N es el número de nodos visitados dos veces. Asignándoles la misma probabilidad, la función de partición para el IPLC es

$$Z = \sum_{\mathcal{C}} \alpha^N q^{N_B} (1-q)^{N_W}, \quad (1.36)$$

con $\alpha = 1/3$. Podemos generalizar del modelo de loops añadiendo fugacidades para

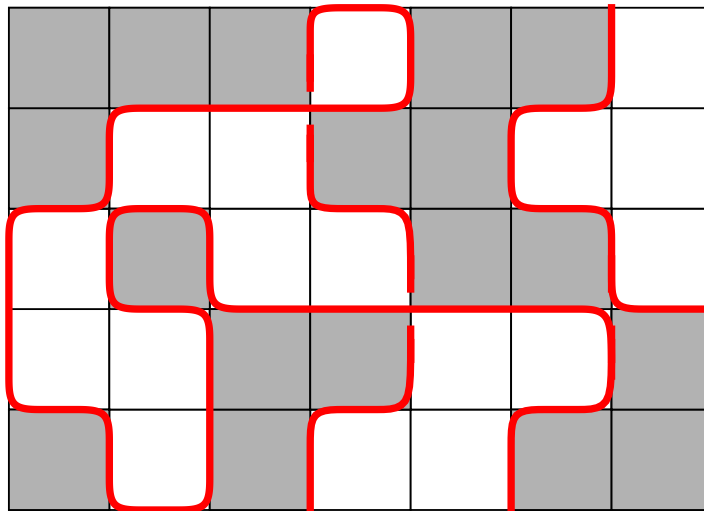


Figura 1.10: Parte de una configuración del IPLC. En este modelo, los loops (líneas en rojo) son contornos de clusters. El comportamiento universal del IPLC es razonable pensar que coincide con el del CPLC.

el número de loops y para la suma de longitudes de todos los loops,

$$Z_{\text{IPLC}} = \sum_{\mathcal{C}} \alpha^N q^{N_B} (1 - q)^{N_W} x^{\text{longitud}_n \# \text{ loops}}. \quad (1.37)$$

Los efectos de estas fugacidades se pueden observar cuando $n = 1$. Una fugacidad x para la longitud distinta de 1 se corresponde a una interacción Ising entre los estados de cuadrados adyacentes. Por otra parte, al variar α se introduce una interacción a cuatro sitios.

De forma similar al CPLC, el parámetro q provoca que el modelo cambie entre dos fases donde no hay loops extendidos, pero con las condiciones de contorno adecuadas ambas fases se diferencian por la presencia de un loop que rodea el contorno. Estas dos fases están separadas entre sí por una región del diagrama de fases correspondiente a la fase de Goldstone. Entre la fase de Goldstone y cada fase anterior hay un punto crítico cuya clase de universalidad presumimos que es la misma que la del CPLC (comparten la misma descripción a largas distancias).

1.3. Teorías de campos

En esta sección vamos a introducir la descripción de largas distancias, de forma resumida, para los modelos de loops que estudiamos en esta memoria. Para ello, introduciremos primero teorías de campos discretas equivalentes a los modelos de loops completamente empaquetados. Identificaremos las simetrías relevantes de estas discretizaciones y escribiremos la expresión más simple que permita su descripción en el continuo, mediante teorías sigma. De esta forma, si hemos identificado correctamente las simetrías, la clase de universalidad de los modelos de loops corresponderán con las de los modelos sigma en el continuo.

1.3.1. Modelo sigma sobre \mathbb{RP}^{n-1}

IPLC

Comenzamos con el IPLC, donde podemos encontrar una conexión con la expansión en altas temperaturas de un modelo con vectores $\vec{s} \in \mathbb{R}^n$ de norma $\vec{s}^2 = n$,

que residen en los nodos de la red cuadrada, además de un término asociado a los campos gauge $\sigma_{ij} = \pm 1$ que residen en los enlaces. La función de partición que describe la discretización de la teoría de campos a la que nos referimos es

$$Z_{\text{IPLC}} = \text{Tr} \prod_F \left((1 - q) + q \prod_{\langle ij \rangle \in F} \sigma_{ij} \right) \prod_{\langle ij \rangle} (1 + x \sigma_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j), \quad (1.38)$$

donde Tr denota tanto las integrales de \vec{s} como las sumas del campo σ , y está normalizada de forma que $\text{Tr} 1 = 1$. Con $\langle ij \rangle \in F$ indicamos el enlace entre los sitios i y j , vértices del cuadrado F de la red. La simetría gauge \mathbb{Z}_2 de este modelo es tal que

$$\vec{s}_i \rightarrow \chi_i \vec{s}_i, \quad \sigma_{ij} \rightarrow \chi_i \chi_j \sigma_{ij} \quad (\text{para } \chi_i = \pm 1). \quad (1.39)$$

La representación gráfica se realiza expandiendo primero el producto sobre las caras F . Esto produce el conjunto de configuraciones de percolación de sitios en la red cuadrada \mathcal{P} (otra vez, una cara se colorea de negro si el término q es el escogido y blanca si lo es el término $1 - q$) y la función de partición queda como

$$Z_{\text{IPLC}} = \sum_{\mathcal{P}} q^{N_B} (1 - q)^{N_W} \text{Tr} \left(\prod_{l \in \partial \mathcal{P}} \sigma_l \right) \prod_{\langle ij \rangle} (1 + x \sigma_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j), \quad (1.40)$$

donde llamamos $\partial \mathcal{P}$ al conjunto de enlaces que pertenecen al contorno de los clusters de percolación. A continuación, expandimos el producto sobre los enlaces y realizamos la traza. De este segundo término sólo sobrevive un elemento al hacer la traza sobre las variables σ . Éste se corresponde a las configuraciones en las que para cada link $l \in \partial \mathcal{P}$, la variable σ_l está elevado al cuadrado, es decir, el término en el que los factores de $\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$ caen en los contornos de los clusters. El vector \vec{s}_i asociado al nodo en el que coinciden los contornos de dos clusters de percolación, aparece en la traza cuatro veces. La segunda propiedad de estos vectores (1.29) implica la aparición de tres términos correspondientes a los tres emparejamientos posibles. Es decir, en una configuración con N de estos nodos la traza restante da lugar a 3^N términos, cada uno asociado con una configuración de loops, \mathcal{C} . Como en los anteriores modelos de loops, los términos que sobreviven son los loops y dan una contribución n a la función de partición, de forma que

$$Z_{\text{IPLC}} = \sum_{\mathcal{C}} \alpha^N q^{N_B} (1 - q)^{N_W} x^{\text{longitud}} n^{\# \text{ loops}}, \quad (1.41)$$

donde el parámetro α es $n/(n+2)$ como consecuencia de la segunda propiedad en (1.29). Esta función de partición concuerda con la definida en (1.37).

La particularidad de la expresión (1.38) es que las simetrías vienen dadas de forma explícita. Por una parte, la simetría $O(n)$ de los vectores \vec{s} , por otra, la simetría asociada al campo gauge σ , que identifica $\vec{s} \leftrightarrow -\vec{s}$. Así, el parámetro de orden relevante para este modelo es un vector nemático obtenido mediante la identificación anterior. Cambiamos a la normalización $\vec{s}^2 = 1$, más estándar en teorías de campos, y definimos el parámetro de orden como una matriz real simétrica de traza nula,

$$\tilde{Q}^{ab} = s^a s^b - \delta^{ab}/n, \quad \text{tr } \tilde{Q} = 0. \quad (1.42)$$

Esta matriz \tilde{Q} del espacio real proyectivo \mathbb{RP}^{n-1} será el grado de libertad relevante a las escalas de largas distancias. Puesto que el primer grupo de homotopía de esta variedad no es el trivial (Mermin, 1979), la configuración espacial de \tilde{Q} puede tener defectos de vórtices.

La variedad \mathbb{RP}^1 es especial al ser equivalente al círculo, de forma que en el valor especial de $n = 2$ los defectos son vórtices estándar XY y están caracterizados por una carga topológica entera. Sin embargo, cuando $n > 2$, el grupo fundamental es $\pi_1(\mathbb{RP}^{n-1}) = \mathbb{Z}_2$ (Hatcher, 2002), por lo que en general la carga del defecto está definida sólo módulo dos. En el límite de réplica, el cual requiere la continuación analítica de las fórmulas definidas para n arbitrariamente grande a $n < 2$, los defectos deberían ser vistos también como vórtices \mathbb{Z}_2 . Esto puede verse por ejemplo mediante la formulación supersimétrica del modelo de loops en $n = 1$ (Jacobsen *et al.*, 2003; Nahum y Chalker, 2012).

La descripción continua más simple de la función de partición (1.38) es un modelo sigma para el parámetro de orden \tilde{Q} ,

$$\mathcal{L} = \frac{K}{4} \text{Tr} (\nabla \tilde{Q})^2, \quad (1.43)$$

junto a las ligaduras en \tilde{Q} que se siguen de su definición en términos de \vec{s} . El desarrollo que hemos seguido implica que este modelo sigma 1.43 describe las propiedades

de larga distancia del IPLC, y como veremos también las del CPLC. Es decir, la transición orden-desorden en el modelo sigma está en la misma clase de universalidad que los puntos críticos del IPLC y del CPLC (en el interior del diagrama de fases).

Como la energía libre clásica de una pareja de defectos de vórtices es proporcional a la rigidez K , los vórtices se suprimen a K grandes (como en el modelo XY a rigideces altas). En la llamada *fase de Goldstone*, que definimos ahora, K fluye a valores grandes al aumentar el tamaño, y los vórtices son consecuencia de una perturbación irrelevante. En las variedades espaciales en las que estamos interesados, las configuraciones no singulares (sin vórtices) de \tilde{Q} son equivalentes a configuraciones no singulares de \vec{s} . Entonces, en un tratamiento perturbativo a K grande, el modelo sigma sobre \mathbb{RP}^{n-1} puede reemplazarse por el modelo sigma sobre $O(n)$,

$$\mathcal{L} = \frac{K}{2}(\nabla\vec{s})^2, \quad \vec{s}^2 = 1. \quad (1.44)$$

De hecho, Jacobsen *et al.* (2003) dieron argumentos para la aplicación de este modelo sigma en el caso del modelo CPLC en $q = 1/2$.

En dos dimensiones, la función beta perturbativa para K cambia de signo en $n = 2$ (Jacobsen *et al.*, 2003; Polyakov, 1977):

$$\frac{dK}{d \ln L} = \frac{2-n}{2\pi} \left(1 + \frac{1}{2\pi K} + \dots \right). \quad (1.45)$$

Cuando $n > 2$, la rigidez fluye a cero bajo RG y el modelo sigma sólo tiene fase desordenada, no esperamos entonces que el modelo de loop sea crítico. En $n = 2$ el modelo sigma es el modelo XY, y tenemos por tanto la fase de cuasi-orden de largo alcance en la que K no fluye con el tamaño. El teorema de Mermin-Wagner (Mermin y Wagner, 1966; Coleman, 1973) implica que estas son las únicas posibilidades cuando $n \geq 2$. Sin embargo, en el límite de réplica el teorema de Mermin-Wagner no se aplica (Jacobsen *et al.*, 2003), y la ecuación (1.45) muestra que para $n < 2$ la rigidez K fluye a infinito (de forma logarítmica). Ésta es la llamada fase de Goldstone, fase ordenada con correlaciones logarítmicas.

CPLC

La función de partición del CPLC, ec. (1.35), también es invariante bajo la mismas simetrías que el IPLC. Para observarlo, consideremos vectores $\vec{s} \in \mathbb{R}^n$ de norma $\vec{s}^2 = n$ en cada enlace de la red cuadrada. La discretización que consideramos será entonces

$$Z_{\text{CPLC}} = \text{Tr} \prod_i [p (\vec{s}_{i_1} \cdot \vec{s}_{i_4}) (\vec{s}_{i_2} \cdot \vec{s}_{i_3}) + (1-p)q (\vec{s}_{i_1} \cdot \vec{s}_{i_3}) (\vec{s}_{i_2} \cdot \vec{s}_{i_4}) + (1-p)(1-q) (\vec{s}_{i_1} \cdot \vec{s}_{i_2}) (\vec{s}_{i_3} \cdot \vec{s}_{i_4})], \quad (1.46)$$

donde los índices vienen definidos en la figura 1.11. Como en los otros modelos, usando las propiedades (1.29) se puede expandir el producto y realizar la traza. Una vez más, los únicos términos resultantes son las 3^N configuraciones de loops, donde N es el número de nodos, y la función de partición resultante es (1.35).

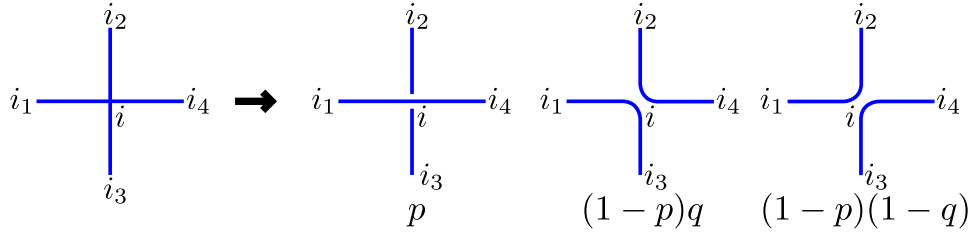


Figura 1.11: Emparejamientos del modelo CPLC

La función de partición (1.46), al igual que el IPLC, mantiene tanto la simetría de rotaciones $O(n)$ como la simetría gauge \mathbb{Z}_2 , aunque ésta última no está en la discretización de forma explícita. Al cambiar el signo del espín del enlace que une los sitios i y j , los factores de Boltzmann de ambos sitios cambian de signo, es decir, el producto de ambos hace que la función de partición no cambie. Así, con la excepción del contorno del diagrama de fases ($p = 0$, $q = 0$ ó $q = 1$), el límite continuo simple del CPLC es otra vez el modelo sigma \mathbb{RP}^{n-1} descrito por la ecuación (1.43). Esperamos por tanto que las propiedades universales sean las mismas que el IPLC y este modelo sigma.

Por otra parte, aunque el argumento dado para describir la fase de Goldstone indica que ahí los vórtices son una perturbación irrelevante, en las transiciones de fase juegan un papel importante (Nahum *et al.*, 2013b). Previamente, Fu y Kane (2012) encontraron que la transición de fase metal-aislante en la clase de simetría simpléctica viene inducida también por la proliferación de vórtices \mathbb{Z}_2 .

1.3.2. Modelo sigma \mathbb{CP}^{n-1} en 2D

Como mencionamos al introducirlo, el CPLC tiene una simetría adicional (Read y Saleur, 2001; Candu *et al.*, 2010) en el contorno del diagrama de fases (cuando $p = 0$, $q = 0$ ó $q = 1$). En cada uno de estos tres trozos del contorno, el CPLC se reduce al modelo CPL en la red L, para $p = 0$, o en la red de Manhattan, los dos casos restantes.

La teoría de campos discreta en vez de usar espines reales \vec{s} , usa espines complejos $\mathbf{z} \in \mathbb{C}^n$ de norma $\mathbf{z}^\dagger \mathbf{z} = n$. Los espines \mathbf{z} , como en el CPLC, residen en el centro de los enlaces de la red. Así podemos expresar su función de partición de la forma

$$Z_{\text{CPL}} = \text{Tr} \prod_i \left[(1-p) (\mathbf{z}_{i_2}^\dagger \cdot \mathbf{z}_{i_1}) (\mathbf{z}_{i_3}^\dagger \cdot \mathbf{z}_{i_4}) + p (\mathbf{z}_{i_3}^\dagger \cdot \mathbf{z}_{i_1}) (\mathbf{z}_{i_2}^\dagger \cdot \mathbf{z}_{i_4}) \right] \quad (1.47)$$

y expandir el producto, véase la figura 1.12 para la definición de los índices i_k . Tomamos como convenio que si el enlace está orientado hacia fuera de un nodo, en el factor de Boltzmann el espín aparece de forma conjugada. En este caso, para poder hacer la traza usamos la propiedad para los vectores \mathbb{CP}^{n-1} , $\text{Tr} z_i^{*\alpha} z_j^\beta = \delta_{ij} \delta^{\alpha\beta}$. En este caso, los únicos términos que sobreviven son aquellos en los que cada \mathbf{z}_i o no aparece o lo hace dos veces. Estos términos dan como resultado las configuraciones de loops en la red L, figura 1.3, y el valor de la traza de cada loop da un factor n , proveniente de la traza del último espín.

La simetría global $SO(n)$ y simetría gauge \mathbb{Z}_2 en el interior del diagrama de fases del CPLC han sido promocionadas, en el contorno, a una simetría global $SU(n)$ y simetría gauge $U(1)$ que es las que rigen al CPL. La teoría de campos apropiada es un modelo sigma para un campo sobre el espacio complejo proyectivo, \mathbb{CP}^{n-1} ,

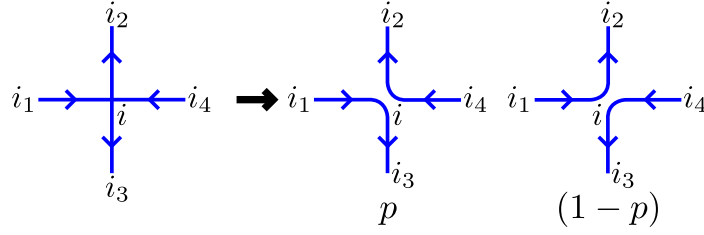


Figura 1.12: Emparejamientos de los términos de la función de partición para el modelo de loops completamente empaquetados en la red L , ec. (1.47). Otros emparejamientos son posibles como los asociados a la red de Manhattan.

con un término θ en dos dimensiones (Read y Saleur, 2001; Candu *et al.*, 2010). El espacio complejo proyectivo es una variedad de vectores unitarios \vec{z} modulo la equivalencia gauge $\vec{z} \sim e^{i\phi}\vec{z}$. Otra vez, una parametrización no redundante viene provista por la matriz de traza nula Q , que es ahora una matriz hermítica en vez de simétrica real,

$$Q^{ab} = z^a z^{*b} - \delta^{ab}/n, \quad (1.48)$$

donde recuperamos la normalización $\mathbf{z}^\dagger \mathbf{z} = 1$, para pasar a la teoría continua. En dos dimensiones, el lagrangiano para el modelo sigma $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$ es

$$\mathcal{L}_{\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}} = \frac{K}{4} \text{tr} (\nabla Q)^2 + \frac{\theta}{2\pi} \epsilon_{\mu\nu} \text{tr} Q \nabla_\mu Q \nabla_\nu Q, \quad (1.49)$$

más las ligaduras que se siguen de la definición de Q : hermítica y traza nula. Para una discusión pedagógica para el término θ en este caso véase Fradkin (2013). En el caso particular de $n = 2$, la teoría de campos anterior es equivalente al modelo sigma $O(3)$ (el espín $O(3)$ es igual a $\text{tr} \vec{\sigma} Q$, donde $\vec{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli). Además, el campo Q permite configuraciones con la presencia de *skyrmions*, puesto que el segundo grupo de homotopía es $\pi_2(\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}) = \mathbb{Z}$.

Las propiedades de volumen del modelo sigma $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$ dependen de θ sólo modulo 2π . Para $n \leq 2$, hay un punto crítico en $\theta = \pi \text{ mod}(2\pi)$, los demás valores de θ son masivos, es decir, que fluyen bajo RG a $\theta = 0 \text{ mod}(2\pi)$ y $K = 0$. El punto crítico en $\theta = \pi$ es el punto crítico del CPLC en $p = 0, q = 1/2$, o en el CPL definido en

la red L en $p = 1/2$ (Read y Saleur, 2001; Candu *et al.*, 2010). Usando la variable del CPLC, el valor (real) de θ varía cerca de este punto como

$$(\theta - \pi) \propto (q - 1/2). \quad (1.50)$$

La descripción \mathbb{CP}^{n-1} nos sirve para dos propósitos. El primero, implica que los dos contornos del CPLC que se corresponden con el modelo de loops en la red de Manhattan ($q = 0$ y $q = 1$) están localizados para todo p , como cabe esperar por trabajos de Beamond *et al.* (2002, 2003). Aquí, se puede demostrar que $\theta = 0 \pmod{2\pi}$, por lo que el modelo sigma está en la fase desordenada. Sin embargo, la longitud de correlación ξ , y el tamaño típico del loop, diverge exponencialmente conforme $p \rightarrow 1$,

$$\xi \sim (1 - p)^{-2} e^{\text{const.}/(1-p)},$$

cuando $q = 0$ ó $q = 1$. Esto se sigue de la función beta para el modelo \mathbb{CP}^{n-1} (Hikami, 1981) y el hecho que la rigidez sea del orden de $(1 - p)^{-1}$. Éste es el comportamiento conocido de la longitud de correlación en el modelo de loops en la red de Manhattan (Beamond *et al.*, 2002), problema que está relacionado con la clase C de localización de Anderson no crítica (Senthil *et al.*, 1998; Bundschuh *et al.*, 1999). El segundo propósito es que la descripción \mathbb{CP}^{n-1} del modelo sin cruces da una forma de ver que la fugacidad de los vórtices cambia de signo en $q = 1/2$, incluso en la descripción \mathbb{RP}^{n-1} del CPLC, al igual que hace el IPLC en el punto $q = 1/2$ (Nahum *et al.*, 2013b). El motivo proviene de que la fugacidad efectiva de un vórtice V se obtiene sumando sobre las dos posibilidades del núcleo del vórtice (Affleck, 1986; Senthil y Fisher, 2006), medio-skyrmion y anti-medio-skyrmion, por lo que $V \propto e^{i\theta/2} + e^{-i\theta/2}$ (Nahum *et al.*, 2013b).

1.3.3. Modelo sigma en \mathbb{CP}^{n-1} tridimensional

Para el modelo de loops completamente empaquetados tridimensional, recuperamos la normalización $\mathbf{z}^\dagger \mathbf{z} = n$ y usamos como parámetro de orden la matriz $Q^{ab} = z^a z^{*b} - \delta^{ab}$. La teoría de campos asociada al modelo es un modelo sigma

como escribimos en la ecuación (1.49), sin el término θ por ser un modelo tridimensional. Podemos escribir el lagrangiano incorporando la ligadura $(Q + \mathbb{I})^2 = n(Q + \mathbb{I})$ mediante un potencial que la suaviza,

$$\mathcal{L}_{\text{soft}} = \text{Tr} (\nabla Q)^2 + t \text{Tr} Q^2 + g \text{Tr} Q^3 + \lambda Q^4 + \lambda' (\text{Tr} Q^2)^2, \quad (1.51)$$

donde g es proporcional a $2 - n$. En 3 dimensiones, Q permite configuraciones con defectos de *erizo*, debido a que el segundo grupo de homotopía es $\pi_2(\mathbb{CP}^{n-1}) = \mathbb{Z}$. Se sabe que estos defectos, como los vórtices en dos dimensiones, juegan un papel importante cerca del punto crítico, proliferan en la fase desordenada y son irrelevantes en la ordenada (Haldane, 1988; Read y Sachdev, 1989a; Senthil *et al.*, 2004a,b; Kamal y Murthy, 1993; Motrunich y Vishwanath, 2004).

Como en el caso bidimensional, en el caso de $n = 2$ la teoría de campos anterior es equivalente al modelo sigma $O(3)$. Los espines \vec{s} en $O(3)$ están relacionados con la matriz Q mediante las matrices de Pauli $\bar{\sigma}^i$, de la forma $Q = \bar{\sigma}^i s^i / \sqrt{2}$. El lagrangiano es el del modelo sigma en $O(3)$ con un potencial donde el término cúbico desaparece,

$$\mathcal{L}_{\text{soft}} = (\nabla s)^2 + t s^2 + u (s^2)^2, \quad (1.52)$$

con $u = \lambda' + \lambda/2$. Así, en $n = 2$ esperamos que se produzca una transición de fase continua en la clase de universalidad del modelo $O(3)$. También podemos esperar que sea continua para $n < 2$, en particular el límite de réplica $n \rightarrow 1$ se corresponde con las transiciones de Anderson en la clase C (Nahum y Chalker, 2012). Para $n > 2$ una predicción ingenua es que dado que el término cúbico no desaparece debe haber una transición de primer orden. Sin embargo, las fluctuaciones pueden invalidar esta predicción de campo medio si la dimensión espacial es menor que cuatro (Nahum *et al.*, 2013c), tal y como mostramos en el capítulo 3.

Por otra parte, debemos distinguir las teorías descritas hasta ahora con las relacionadas con los modelos \mathbb{CP}^{n-1} “no compactos”, en los que los vectores \mathbf{z} están acoplados a un campo gauge $U(1)$ no-compacto A ,

$$\mathcal{L}_{\text{NCCP}^{n-1}} = \frac{1}{2} |(\nabla - iA)\mathbf{z}|^2 + \kappa (\nabla \times A)^2 + \mu |\mathbf{z}|^2 + \lambda |\mathbf{z}|^4. \quad (1.53)$$

El comportamiento universal de los modelos “compactos” \mathbb{CP}^{n-1} , se puede describir también mediante teorías gauge similares a la anterior, pero con una simetría gauge $U(1)$ compacta (Senthil *et al.*, 2004a,b; Motrunich y Vishwanath, 2004). En el caso compacto, las configuraciones del campo gauge A pueden contener monopolos de Dirac, o equivalentemente configuraciones de erizo. Esto lleva al confinamiento de los grados de libertad de \mathbf{z} y sólo los grados de libertad de Q juegan un papel a largas distancias, a diferencia del caso no-compacto.

Métodos Numéricos

En la actualidad, el uso de simulaciones mediante ordenador para resolver problemas de física y de otras disciplinas es habitual. A diferencia de las técnicas analíticas, que a menudo usan aproximaciones para tener capacidad predictiva, los métodos numéricos proporcionan en la mayoría de ocasiones resultados en principio exactos y su precisión suele depender sobre todo del tiempo de cálculo. Por otra parte, el aumento del número de núcleos de los ordenadores y la disponibilidad de procesadores gráficos programables (tarjetas gráficas) hacen que los métodos de Monte Carlo paralelizables sean muy rentables computacionalmente hablando. Por ello y con el objetivo de estudiar los modelos de loops, y en general problemas de física estadística, vamos a introducir el método Monte Carlo que es el que utilizaremos fundamentalmente en esta memoria.

Los objetos de estudio en problemas de física estadística son la estimación de valores esperados $\langle O \rangle$ de observables O . Para ello, la vía a seguir teóricamente es calcular la *función de partición*, de forma que si Ω es el conjunto de posibles microestados,

$$Z = \sum_{\alpha \in \Omega} e^{-\beta E_{\alpha}} \quad , \quad (2.1)$$

donde β es la inversa de la temperatura y E_{α} es la energía del estado α . Los sumandos de la función de partición se conocen como *factores de Boltzmann*. Una vez calculada ésta, el valor esperado del observable O se obtiene mediante la relación

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{\alpha \in \Omega} O_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}}}{Z} \quad . \quad (2.2)$$

Sin embargo, esta suma actualmente sólo es posible realizarla para sistemas muy pequeños o con suficientes simetrías como para reducirla a problemas más simples.

Por ejemplo, en un modelo de Ising de tamaño $4 \times 4 \times 4$, el número de microestados es $2^{64} \approx 1.8 \times 10^{19}$. Un ordenador típico actual tardaría en realizar la suma al menos un tiempo del orden de 10^{10} segundos, alrededor de unos 300 años. Queda claro por tanto que para estos tamaños o mayores lo único a lo que podemos aspirar es a hacer la suma a un cierto subconjunto de estados. Elegirlos de tal forma que sean los más representativos de la temperatura dada nos permitirá obtener buenas estimaciones de los valores esperados en los que estamos interesados.

Con este objetivo en mente, a través de este capítulo vamos a introducir las técnicas Monte Carlo, con el *algoritmo de Metropolis* (Metropolis *et al.*, 1953) como paradigma. Veremos casos particulares en los que no es necesario este algoritmo y en los que se pueden usar técnicas para acceder a tamaños mucho mayores (Nahum *et al.*, 2013b). Se estudiarán también técnicas que permitan extraer toda la información posible de las simulaciones, como es el caso del *método de los múltiples histogramas* introducido por Ferrenberg y Swendsen (1988, 1989). Y por último se discutirán diversos métodos para la estimación de errores [Newman y Barkema (2001), Frenkel y Smit (2001), Allen y Tildesley (1989)].

2.1. Monte Carlo.

Como decíamos, a lo único que podemos aspirar es a elegir n estados $I_n = \{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$ con una cierta distribución de probabilidades p_α . Usando los estados de este conjunto podemos obtener una estimación del valor esperado de O , de la forma

$$O_{I_n} = \frac{\sum_{i=1}^n p_{\alpha_i}^{-1} O(E_{\alpha_i}) e^{-\beta E_{\alpha_i}}}{\sum_{i=1}^n p_{\alpha_i}^{-1} e^{-\beta E_{\alpha_i}}} \quad . \quad (2.3)$$

Denotamos como $\langle \cdot \rangle_p$ como el valor esperado con un conjunto infinito de estados elegidos de acuerdo a la distribución p . Al aumentar el número de estados medidos, el valor O_{I_n} tenderá al valor esperado $\langle O e^{-\beta E} / p \rangle_p = \langle O \rangle$. La elección adecuada de p_α permitirá que el cálculo en el subconjunto finito sea útil o no. Por ejemplo, el uso de la distribución uniforme, es decir, $p_\alpha = 1/|\Omega|$ para todo estado α , implicaría el uso de estados que en principio no tienen porqué ser relevantes para el cálculo de

magnitudes termodinámicas.

Si tuviésemos alguna forma de saber cuáles estados son los que más contribuyen a la suma de la ecuación 2.2 podríamos obtener una buena estimación de $\langle O \rangle$ usando un conjunto limitado de estados. La técnica para seleccionar estos estados relevantes se conoce en la literatura como *muestreo por importancia*.

2.1.1. Muestreo por importancia

La distribución más simple que podemos imaginar para simplificar el cálculo de los valores esperados es el propio factor de Boltzmann, $p_\alpha = e^{-\beta E_\alpha}/Z$. Usando esta distribución la ecuación 2.3 queda en una simple media a las medidas en cada estado,

$$O_{I_n} = \frac{1}{n} \sum_{i \in I_n} O(E_{\alpha_i}) \quad . \quad (2.4)$$

Que sea una versión simple no significa que sea precisamente la peor, de hecho, podemos demostrar que esta es la de menor varianza para el cálculo de una constante. Como la varianza de este estimador sería

$$\langle O^2 e^{-2\beta E}/p^2 \rangle_p - \langle O e^{-\beta E}/p \rangle_p^2 \quad (2.5)$$

y el segundo término es el propio $\langle O \rangle^2$, el mínimo de la misma sólo depende del primer término. La desigualdad de Jensen implica lo siguiente,

$$\langle O^2 e^{-2\beta E}/p^2 \rangle_p \geq \langle |O| e^{-\beta E}/p \rangle_p = \langle O \rangle \quad , \quad (2.6)$$

véase para más detalle por ejemplo Robert y Casella (1999), Es fácil comprobar que la igualdad sólo se da cuando

$$p_\alpha = \frac{|O_\alpha| e^{-\beta E_\alpha}}{\sum_\delta |O_\delta| e^{-\beta E_\delta}} \quad . \quad (2.7)$$

Para el caso de O constante, p_α es el factor de Boltzmann dividido entre la función de partición.

La cuestión a abordar ahora es cómo generar estados con esta distribución p_α . Es evidente que producir estados aleatoriamente y rechazarlos con probabilidad p_α es un método bastante ineficiente, puesto que acabaríamos rechazando la mayoría

de intentos y tendríamos que generar el mismo número de estados que en el caso de sumar la ecuación original 2.2. En cambio, una forma bastante eficiente de generarlos es mediante los conocidos como *procesos de Markov*.

2.1.2. Proceso de Markov

Un *proceso de Markov* es un tipo de proceso estocástico discreto en el que la probabilidad de que ocurra un evento depende exclusivamente del evento anterior o de un número finito de eventos inmediatamente anteriores. Así, un proceso de Markov generara un conjunto de estados $\{\alpha_n \in \Omega\}_{n=0,\dots,N}$ mediante el uso de una matriz de probabilidad de transición, $\Gamma_{\alpha_i\alpha_{i+1}}$, partiendo de un estado inicial α_1 . El conjunto de estados que se generan en los procesos de Markov, se conoce como *cadena de Markov*. Debido a la naturaleza de proceso estocástico de estos procesos, se suele llamar como tiempo al índice que recorre la cadena.

Para poder reproducir la distribución de probabilidades en la que estamos interesados, vamos a exigir que el proceso cumpla ciertas propiedades:

1. La probabilidad de transición de un estado α a otro γ , depende exclusivamente de los estados α y γ no de la historia anterior de la cadena. Como desde un estado α hemos de poder pasar a cualquier otro, se ha de verificar

$$\sum_{\gamma \in \Omega} \Gamma_{\alpha\gamma} = 1, \quad \forall \alpha \in \Omega. \quad (2.8)$$

Esta propiedad indica que la matriz $\mathbf{\Gamma}$ es una matriz estocástica, puesto que la suma de sus columnas es 1.

2. **Homogeneidad.** Las probabilidades de transición no varían con el tiempo. Si el estado n -ésimo y el estado m -ésimo de la cadena son el mismo, $\alpha_n = \alpha_m$, la probabilidad de transición de éste a cualquier otro estado es la misma, $\Gamma_{\alpha_n\gamma} = \Gamma_{\alpha_m\gamma}$ para todo estado $\gamma \in \Omega$.
3. **Ergodicidad.** Desde un estado cualquiera se debe poder llegar a cualquier otro estado del sistema mediante un número finito de pasos, aunque no nece-

sariamente pequeño. Esto asegura además que exista una única distribución estacionaria (Grimmett y Stirzaker, 1982).

4. **Balance detallado.** Esta propiedad, que describimos en el siguiente apartado, es una expresión de la simetría de inversión temporal. Además, cuando el sistema llega al *equilibrio*, provoca que los estados generados sigan la distribución de probabilidad escogida.

2.1.3. Balance detallado

La simetría de inversión temporal es una característica básica de los procesos microscópicos, imponer esta exigencia en la cadena de Markov proporciona al proceso cierta esencia de realidad. Por otra parte, esta condición impide que el sistema entre en ciclos con una dirección determinada, que sumado a la ergodicidad, hará que el sistema pueda llegar a un estado límite de equilibrio. En términos del proceso de Markov, la simetría de inversión temporal implica que la probabilidad de cambiar de un estado α a otro γ ha de ser la misma que el proceso inverso, en el equilibrio,

$$p_\alpha \Gamma_{\alpha\gamma} = p_\gamma \Gamma_{\gamma\alpha} \quad . \quad (2.9)$$

Esta relación entre las probabilidades de los estados y las matrices de transición es conocida como *balance detallado*.

Por otra parte, veamos que implicaciones tiene el balance detallado para el equilibrio. Una característica principal del equilibrio es ser un proceso estacionario, es decir, la probabilidad de que el sistema salga o entre en un estado es la misma,

$$\sum_{\gamma \in \Omega} p_\gamma \Gamma_{\gamma\alpha} = \sum_{\gamma \in \Omega} p_\alpha \Gamma_{\alpha\gamma} = p_\alpha \quad . \quad (2.10)$$

Esta ecuación escrita en forma matricial, $\mathbf{\Gamma p} = \mathbf{p}$, es una expresión de \mathbf{p} como autovector de $\mathbf{\Gamma}$ con autovalor igual a 1. Nótese que el balance detallado implica la verificación directa de esta relación.

Si queremos describir apropiadamente el equilibrio, consideremos el vector $\mathbf{\Pi}(t)$, cuyos elemento i es la probabilidad de que el estado t -ésimo de la cadena sea α_i .

Si $\mathbf{\Pi}(0)$ es el estado inicial, la evolución temporal de este vector la determina la matriz $\mathbf{\Gamma}$ de la forma $\mathbf{\Pi}(t) = \mathbf{\Gamma}^t \mathbf{\Pi}(0)$. El sistema alcanza el equilibrio si este vector no varía con el tiempo, es decir, si $\mathbf{\Pi}(t) \rightarrow \mathbf{\Pi}_\infty$, de forma que

$$\mathbf{\Pi}_\infty = \mathbf{\Gamma} \mathbf{\Pi}_\infty \quad . \quad (2.11)$$

Como $\mathbf{\Gamma}$ es una matriz estocástica, los autovalores son siempre menores o iguales que 1 y hay al menos un autovalor 1. En el caso donde el autovalor 1 no esté degenerado, queda claro que $\mathbf{\Pi}_\infty$ será la propia distribución de probabilidad escogida \mathbf{p} al imponer balance detallado. Podríamos imaginar que imponiendo la condición más relajada (2.10) obtendríamos el mismo resultado, sin embargo, esta condición no evita que haya varios ciclos con distribución límite \mathbf{p} . Es decir, se alcanzaría lo que se conoce como equilibrio dinámico, véase Newman y Barkema (2001) para más detalle.

Para un posterior análisis conviene descomponer la probabilidad de transición como producto de la probabilidad de dos procesos independientes: elegir una transición entre dos estados y la aceptación de la misma, $\Gamma_{\alpha\beta} = C_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta}$. De esta forma podemos reescribir la condición de balance detallado como

$$\frac{\Gamma_{\alpha\gamma}}{\Gamma_{\gamma\alpha}} = \frac{C_{\alpha\gamma} A_{\alpha\gamma}}{C_{\gamma\alpha} A_{\gamma\alpha}} = \frac{p_\gamma}{p_\alpha} = e^{-\beta(E_\gamma - E_\alpha)} \quad . \quad (2.12)$$

En general, cuanto más cercano a uno sean las probabilidades de aceptación más eficiente suele ser el algoritmo, puesto que el sistema está constantemente actualizándose y apenas se rechazan intentos.

Debemos destacar que si la matriz de transición $\mathbf{\Gamma}$ verifica balance detallado, relación (2.9), la distribución final $\mathbf{\Pi}_\infty$ será la distribución de probabilidades que deseábamos obtener \mathbf{p} , es decir, el factor de Boltzmann

$$(\mathbf{\Pi}_\infty)_\alpha = e^{-\beta E_\alpha} \quad . \quad (2.13)$$

Por lo tanto, en el equilibrio los valores estimados de los observables vendrán dados por la media de los mismos, ecuación (2.4).

2.1.4. Algoritmo de Metropolis

Una vez sabemos cómo generar estados mediante cadenas de Markov, con la distribución de probabilidades requerida, consideremos una forma eficiente de hacerlo. Una primera elección sencilla sería, dado un estado inicial, escoger el otro estado al azar, $C_{\alpha\gamma} = 1/|\Omega|^2$, y las probabilidades de aceptar la transición iguales (formalmente) en ambas direcciones $A_{\alpha\gamma} = e^{-\beta(E_\beta - E_\alpha)/2} = A_{\gamma\alpha}^{-1}$. El problema de esta elección es que la diferencia de energías suele ser tan grande que se rechazarían la mayoría de intentos. Para evitarlo, consideraremos cambios pequeños o controlados del estado inicial y haremos uso del *algoritmo de Metropolis*. Este algoritmo, que fue propuesto por Metropolis *et al.* (1953), consiste en:

1. Elegir un estado inicial, α_0 .
2. Proponer un cambio adecuado en este estado a α_1 . Por ejemplo, en un modelo Ising elegir un único espín y cambiarlo de estado. Este cambio se ha de hacer de forma que se preserve la ergodicidad, por ejemplo eligiendo de forma aleatoria el espín.
3. Aceptar el cambio si la energía decrece, en caso contrario aceptarlo con la probabilidad correspondiente según la relación (2.12),

$$A_{\alpha_0\alpha_1} = \begin{cases} 1 & , \text{ si } E_{\alpha_0} \geq E_{\alpha_1}. \\ e^{-\beta(E_{\alpha_0} - E_{\alpha_1})} & , \text{ en caso contrario.} \end{cases} \quad (2.14)$$

4. Tomar como estado inicial de referencia α_1 y volver al paso 2.

En general, el hecho de aceptar todos los cambios que disminuyen la energía se conoce como algoritmo de Metropolis. La elección del cambio en el estado, bien sea local o no, debe depender del modelo que se esté simulando. Cabe destacar que si el cambio no es suficientemente grande los dos estados pueden estar bastante correlacionados. En este sentido, si el cambio es el del estado de un sitio, llamaremos un paso de Montecarlo cuando el número de intentos sea el tamaño del sistema,

de forma que todos los sitios hayan tenido la oportunidad de cambiar. Para poder continuar con esta discusión es necesario introducir el concepto de *tiempo de correlación*.

2.1.5. Equilibrio y tiempo de correlación

Como decíamos anteriormente, la cadena de Markov se puede considerar análoga a la evolución temporal de un sistema físico, nos referiremos a ella en ocasiones como muestra. Si la elección del estado inicial es al azar, usualmente empezaremos en un estado fuera del equilibrio, límite que alcanzará la muestra al cabo de unos pasos Montecarlo. Podemos hacernos una idea de por qué ocurre esto si consideramos los m autovectores de $\mathbf{\Gamma}$, \mathbf{v}_i , con autovalores λ_i , de forma que el vector de pesos se expresa como combinación lineal de ellos, $\mathbf{\Pi}(t) = \mathbf{\Gamma}^t \mathbf{\Pi}(0) = \sum_i a_i \lambda_i^t \mathbf{v}_i$. Si el valor del observable O en el estado α_j es o_j , el valor esperado de O en el tiempo t será

$$\langle O \rangle (t) = \sum_j o_j \Pi_j(t) = \sum_{j,i} o_j a_i \lambda_i^t \mathbf{v}_{i,j} \quad . \quad (2.15)$$

Supongamos ordenados los autovalores, de forma que \mathbf{v}_0 es el autovector asociado a $\lambda_0 = 1$, entonces el valor esperado se puede reescribir como

$$\langle O \rangle (t) = O(\infty) + \sum_{i>0} e^{t/\log \lambda_i} \sum_j o_j \mathbf{v}_{i,j} \quad . \quad (2.16)$$

Como los autovalores λ_i son menores que 1, si definimos $\tau_i = -\log \lambda_i > 0$, la exponencial se puede reexpresar como e^{-t/τ_i} . Así, podemos ver que los observables se acercarán al equilibrio de manera exponencial, con un tiempo propio que será el mayor de los τ_i al que llamamos *tiempo de correlación*. En efecto, este tiempo nos indica la correlación existente entre dos medidas observadas en diferentes tiempos. Por ejemplo, tomemos el caso simple en el que $\tau_1 \gg \tau_n$ para todo n mayor que 1, si calculamos la autocorrelación del observable O ,

$$C_O(t) = \int_0^\infty O(s)(O(s+t) - O(s))ds = \tilde{o}_1 \int_0^\infty e^{-s/\tau_1} (e^{-(s+t)/\tau_1} - e^{-s/\tau_1}) ds \\ \sim e^{-t/\tau_1} \quad . \quad (2.17)$$

En diversas situaciones, el tiempo de correlación es del orden de unos pocos pasos Montecarlo, es decir, la correlación entre un estado inicial y otro obtenido tras unos pocos pasos es lo suficientemente pequeña como para despreciarla. En cambio, en otras, como por ejemplo cerca de un punto crítico, el número de pasos Montecarlo para asegurar que dos estados estén descorrelacionados aumenta con el tamaño del sistema. En estos casos conviene considerar transiciones no locales, como cambios de clusters de espines a la vez o cambios grandes que preserven simetrías del sistema, dado que el tiempo invertido en construir el conjunto a cambiar se compensa con la disminución del tiempo de correlación en la cadena. Al final, se debe llegar a un equilibrio entre el tiempo usado para actualizar el sistema y el tiempo de correlación, de forma que el tiempo real de cálculo sea el mínimo para una precisión dada.

2.1.6. Paralelización

Por último, dado que actualmente es bastante común usar de forma paralela diferentes procesadores para la computación, es conveniente introducir algoritmos paralelizables con el fin de acelerar la simulación de Monte Carlo. Esto implicará utilizar algoritmos ligeramente menos eficientes, pero que son fáciles de paralelizar y que además son escalables con el número de procesadores, lo cual es bastante conveniente debido al aumento de unidades de computación, tanto en ordenadores como en procesadores gráficos.

Una primera forma obvia de paralelizar un cálculo de Monte Carlo, es generar una muestra en cada procesador y utilizar las diferentes muestras como estimaciones independientes. Sin embargo, si lo que queremos es acelerar un único proceso, debemos centrarnos en la parte que consume más tiempo del cálculo. Mientras que no se rechacen la mayoría de cambios, el mayor tiempo de cpu se suele ir en el proceso de elección del cambio, y a veces en el propio cambio si este no es local. En este apartado vamos a considerar sólo el caso general en el que se eligen cambios locales a realizar, más tarde en el capítulo 4 introduciremos la paralelización de cambios no-locales, que en los modelos de loops será seguir los loops.

Consideremos el algoritmo conocido como *spin-flip*, que consiste en elegir un espín, bien al azar o bien de manera ordenada, y cambiarlo con la probabilidad correspondiente. Una de las formas de paralelizar este algoritmo es descomponer el dominio en trozos que queden separados, de forma que al actualizar un sitio, el factor de Boltzmann del resto de sitios que se actualizan no cambie. Si es necesario para garantizar la ergodicidad, habrá que hacer determinados cambios al final del proceso, ya sea moviendo las fronteras entre los dominios o cambiando los propios dominios en cada actualización. En particular, cuando la energía de un sitio sólo depende de los primeros vecinos, en redes bipartitas o multipartitas este último paso no es necesario. En estas redes, al poderse descomponer en dos (red bipartita) o varias subredes (red multipartita) separadas, se puede actualizar en cada paso una subred, y hacerlo de forma paralela. Véase como ejemplo la figura 2.1.6, en el primer paso los nodos en rojo se actualizan, usando cada procesador para un conjunto de esos nodos, en el segundo paso se actualizaría la otra subred. Por ejemplo, en esta figura 2.1.6, en el primer paso de la actualización, el procesador i -ésimo podría actualizar los sitios con coordenada $y = i$ y coordenada $x = 1, 3, 5, \dots$ si i es impar o $x = 2, 4, 6, \dots$ si i es par; en el segundo paso entonces, se actualizarían los sitios con x par si i es impar y x impares si i es par. Así, aunque el cambio depende del estado de los nodos vecinos, como estos no cambian en cada paso, el factor de Boltzmann está bien definido y no es necesario tener en cuenta posibles interferencias entre procesos.

2.2. Técnicas especiales

En diversos modelos en física, como los modelos de loops que tratamos en esta tesis, nos enfrentamos a casos en los que por la forma de la función de partición, cada sitio es independiente del resto y está totalmente descorrelacionado. Como ejemplo usamos el modelo CPL definido en la sección 1.2.5. Recordamos que es un sistema con N_p estados α , $N - N_p$ estados β y la función de partición es

$$Z = \sum_{\mathcal{C}} p^{N_p} (1 - p)^{N - N_p} \quad , \quad (2.18)$$

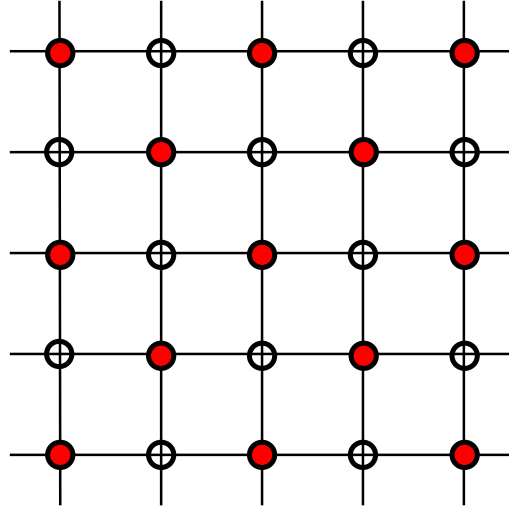


Figura 2.1: Ejemplo de una red bipartita bidimensional: la red cuadrada.

Se muestra en color rojo una de las subredes.

con $p \in [0, 1]$ una probabilidad y la suma es a todas las configuraciones \mathcal{C} . La probabilidad de cada estado es $p^{N_p}(1-p)^{N-N_p}/Z$. Consideremos el cambio de un único sitio, del estado α al β . La condición de balance detallado implica que las matrices de transición verifican

$$\frac{\Gamma_{\alpha\beta}}{\Gamma_{\beta\alpha}} = \frac{p^{N_p-1}(1-p)^{N-N_p+1}}{p^{N_p}(1-p)^{N-N_p}} = \frac{1-p}{p} . \quad (2.19)$$

Así, podemos asignar a $\Gamma_{\alpha\beta} = 1-p$ y a $\Gamma_{\beta\alpha} = p$ o bien podemos seguir la idea del algoritmo de Metropolis y asignar cuando $p < 1/2$, $\Gamma_{\alpha\beta} = 1$ y $\Gamma_{\beta\alpha} = p/(1-p)$, y en caso contrario, $p > 1/2$, $\Gamma_{\alpha\beta} = (1-p)/p$ y $\Gamma_{\beta\alpha} = 1$. Generar una configuración asignando a cada sitio el estado α con probabilidad p y el estado β con probabilidad $1-p$ se corresponde con la primera elección. De hecho, podemos hacerlo corresponder con una configuración del sistema con todos los sitios en β y que cambian a α con probabilidad $1-p$. Así, queda de forma explícita que cada sitio está descorrelacionado del resto y son independientes, lo que implica a su vez que dos configuraciones generadas por este procedimiento también están descorrelacionadas. Además, cabe destacar que cada estado reproduce la distribución dada por el factor de Boltzmann, como no puede ser de otra forma.

En estos casos, el tiempo de simulación suele ser bastante corto, y al no haber

correlación entre configuraciones cada una de ellas da un valor independiente de los observables. El límite para el cálculo en estos sistemas suele residir más en la cantidad de memoria usada que en el tiempo requerido para el propio cálculo. Para superar este límite introducimos en Nahum *et al.* (2013b) técnicas de matriz de transferencia, a las que llamamos en inglés: *knitting*.

2.2.1. Matriz de transferencia

El modelo que vamos a usar para introducir estas técnicas es el CPLC, definido en la sección 1.2.6. Recordamos que en este modelo cada sitio tiene tres estados que definen los posibles emparejamientos de los enlaces en los nodos, con los que se forman los loops. En este modelo estaremos interesados en diversas magnitudes no locales, como por ejemplo la longitud total de cada loop, el diámetro del loop en las diferentes direcciones, el número de ramas del loop que cruzan la muestra o la probabilidad de que dos sitios alejados una cierta distancia estén en un mismo loop o en dos. El principal inconveniente de este modelo es que, en la fase de Goldstone (Sec. 1.3.1) las correlaciones y los observables nombrados anteriormente siguen formas universales de los logaritmos de las distancias. Es por ello, que es necesario desarrollar nuevas técnicas para alcanzar tamaños suficientemente grandes.

Para poder obtener estimaciones de observables en sistemas cuyos tamaños son tan grandes que guardarlos en memoria supera el límite físico, tenemos que considerar técnicas para construir dichos sistemas que no impliquen almacenar toda la información. En el caso expuesto arriba, donde los sitios están descorrelacionados, es decir, sus estados no dependen de sus vecinos, podemos construir la muestra capa a capa y borrar de la memoria el estado de los sitios intermedios una vez usados para el cálculo. Es decir, si el objetivo es construir una configuración de tamaño $L_1 \times L_2$, lo haremos *tejiendo* trozos de $L_1 \times L'$ donde L' es del orden de 1 y guardando sólo en memoria las medidas que sean necesarias y su estadística.

Consideremos primero el caso $L' = 1$, como en la figura 2.2.1. Comenzamos sorteando con la probabilidad dada los distintos estados de cada sitio, se muestra un ejemplo del CPLC en dicha figura. Una vez sorteados, construimos los loops

definidos por los sitios. Las conexiones que hacen los loops definen la matriz de transferencia T_i , con índice $i = -L, \dots, L$. Si el índice $0 > i \geq -L$, el elemento T_i se corresponde a la conexión de la posición inferior de la línea de tricotado. Si el índice es positivo se corresponde con la posición superior. El valor del elemento es el índice de la posición con la cual conecta el loop, por ejemplo, en la figura 2.2.1: $T = (\bar{2}, \bar{1}, 3, 4, 6, 7, 8, \bar{9}, 9, 0, \cdot, 5, \bar{3}, \bar{4}, 2, \bar{5}, \bar{6}, \bar{7}, \bar{10}, \cdot)$ Una vez formada la primera línea, podemos definir una segunda matriz de transferencia que guarde la información de la parte ya construida S , usando los mismo índices y convención. Conforme se

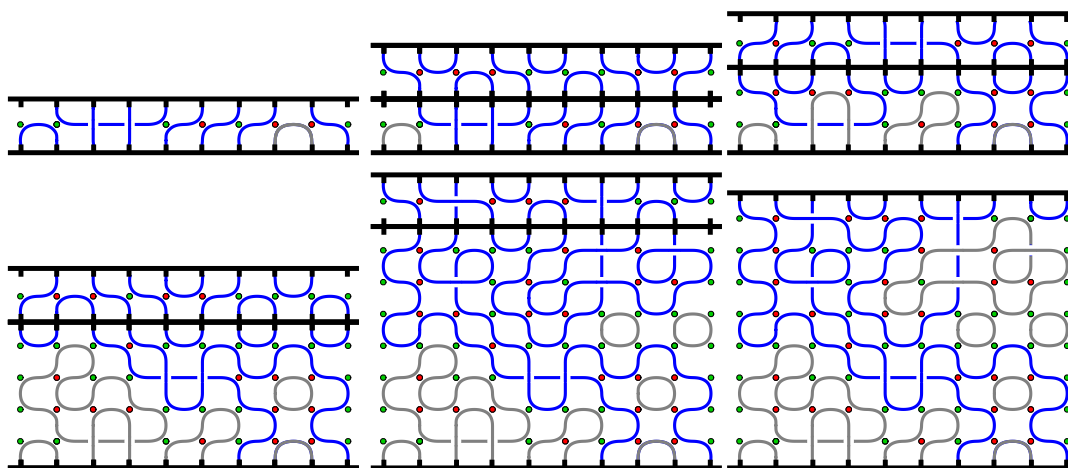


Figura 2.2: Ejemplo del proceso de construcción de una muestra mediante el método de la matriz de transferencia. Se han dibujado en gris los loops que ya se han cerrado y, o bien han pasado a formar parte de la estadística, o bien quedan como índices de la matriz S .

cierran los loops, se almacena en memoria su estadística (longitud, radio, etc.) y se sigue construyendo la muestra paso a paso. Para poder medir las estadística de loops, es necesario usar otra matriz que asigne a cada posición de la línea de construcción, la longitud del trozo de loop al que está conectados.

Tras L_2/L' pasos, habremos *construido* la muestra $L_1 \times L_2$ que sigue los pesos de la función de partición, y que habrá proporcionado suficiente estadística de los observables en los que estamos interesados. Faltaría, por ultimo, aplicar las condiciones de contorno para terminar la construcción de la muestra y realizar las últimas

medidas de los distintos observables. En el caso de la figura 2.2.1 y la figura 2.3, hemos impuesto condiciones de contorno en las que los sitios de los bordes están todos en un mismo estado.

2.2.2. Barajado

La matriz de transferencia descrita en el apartado anterior proporciona un escenario nuevo en el que se puede desarrollar nuevas técnicas para mejorar el análisis de las medidas obtenidas. En particular, permite mejorar la precisión de observables que no son locales, sin aumentar sensiblemente el tiempo de cálculo. Imaginemos que, como en la figura 2.3, una muestra la dividimos en N partes iguales, y con ello definimos N matrices $S^{(i)}$, $i = 1, \dots, N$. La información que hay localmente dentro de los N trozos sólo está almacenada en forma de medidas 'macroscópicas' o histogramas, no así las conexiones. Primero medimos los observables en los que estamos interesados de la muestra completa, para después barajar los N trozos. Se genera así una muestra nueva, que aunque debe estar correlacionada con la anterior proporciona estimaciones diferentes para las medidas no locales, por ejemplo la longitud de los loops más largos. Si repetimos la operación un número grande veces podremos obtener un conjunto de estimaciones de estos observables en los que estamos interesados.

En principio este conjunto de estimaciones tienen más información que las medidas iniciales, pero el cálculo de las barras de error no es sencillo. Para poder estimarlas, podemos realizar este proceso para n muestras independientes, obteniendo así n conjuntos de observables. Como los n conjuntos son independientes, sus medias también lo son y el error asociado será el error estadístico del conjunto de n medias. Al igual ocurre con otros estimadores en estos conjuntos, como la varianza o la kurtosis.

En adición a este método de barajado, otro cambio que usamos y que preserva las simetrías del sistema, además de añadir más descorrelación y posibles configuraciones, es una rotación de cada trozo del sistema. Usando ambos, el barajado y las rotaciones de los trozos del sistema obtenemos menos medidas independientes que

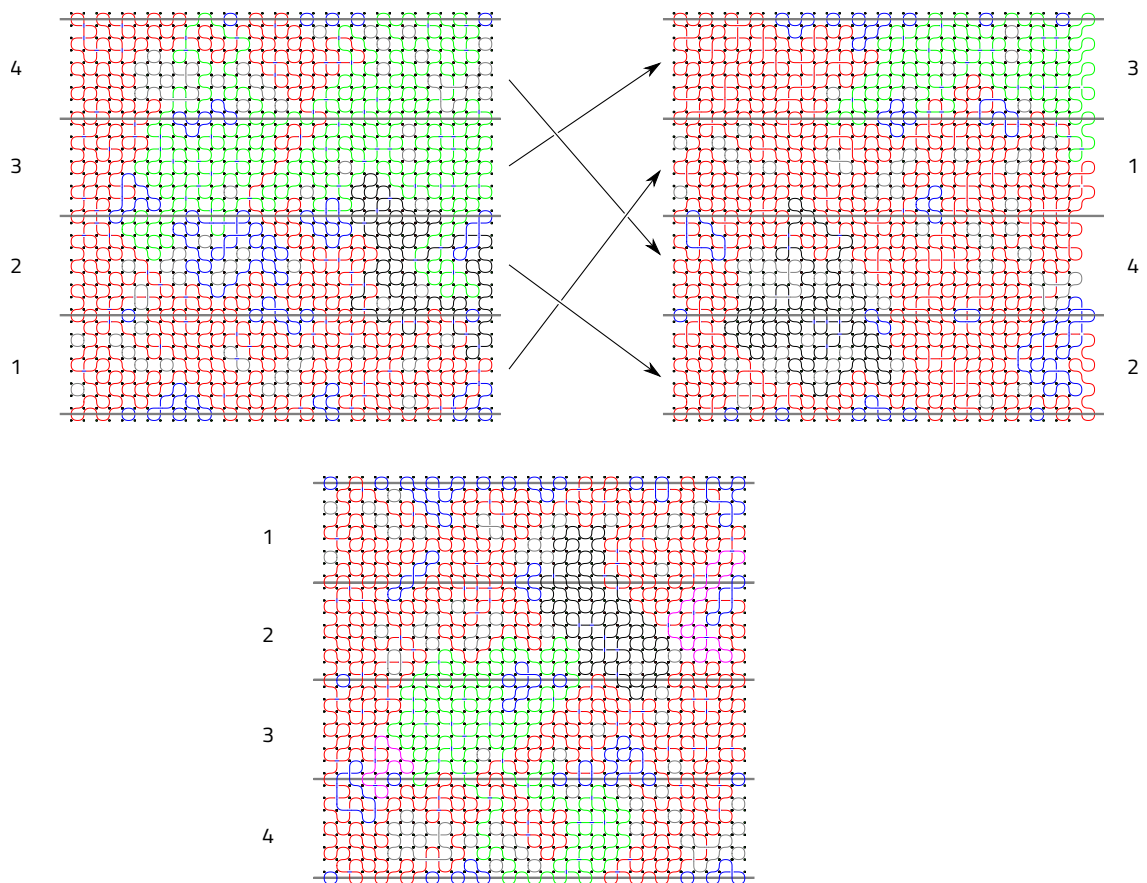


Figura 2.3: Representación de la idea de los barajados. Tres barajados de una misma muestra dividida en $N = 4$ trozos. Se puede observar que los loops grandes formados en cada barajado tienen tamaños diferentes.

si construyéramos todas las muestras por separado, pero la varianza de las medias de cada conjunto es menor. Además, generar estos conjuntos de muestras requiere mucho menos tiempo, computacionalmente hablando.

En el capítulo 5 usamos este procedimiento para calcular diversos observables en los tamaños más grandes. En concreto dividimos cada muestra en 20 trozos. Con estos trozos, generamos para cada muestra un conjunto de 1000 barajados. Las barras de error las estimamos entonces con una serie de entre 80 y 200 muestras diferentes cada una con 1000 barajados, según el tamaño. De esta forma conseguimos en el CPLC reducir el tiempo de cálculo de CPU en un factor 200.

2.3. Método de los múltiples histogramas

Los métodos basados en histogramas de la energía, introducidos por Ferrenberg y Swendsen (1988, 1989), son técnicas de análisis de datos cuyo principal objetivo es mejorar la precisión de las estimaciones de los observables medidos y ampliar el rango de temperaturas donde están estas estimaciones, usando para ello todas las medidas que se obtienen en el proceso de Monte Carlo. Esto es posible debido a que al muestrear el factor de Boltzmann a una temperatura dada, se visitan estados que forman parte de los estados que se visitarían al realizar el mismo proceso a una temperatura cercana. Entonces, usando sólo las medidas a una temperatura podremos obtener estimaciones de estas medidas para temperaturas suficientemente próximas. Para poder usar el método que describimos a continuación, resulta conveniente guardar todos los datos de las medidas, aunque en principio sólo sean necesarios los histogramas de las mismas.

2.3.1. Método del histograma

Siguiendo Ferrenberg y Swendsen (1988) y Newman y Barkema (2001), consideremos primero por simplicidad el caso de la simulación de una única temperatura, y por tanto de un único histograma. Una vez realizado una simulación de Monte Carlo a una temperatura dada, β_0 , tenemos una estimación del histograma de ener-

gías, $N_{\beta_0}(E)$, bien sea calculado a posteriori o durante el proceso. El muestreo por importancia adecuado determina que este histograma sea el factor de Boltzmann por la densidad de estados,

$$N_{\beta_0}(E) = p(E; \beta_0)N = N\rho(E)e^{-\beta_0 E}/Z(\beta_0) \quad , \quad (2.20)$$

donde $N = \sum_E N_{\beta_0}(E)$ es el número de pasos Montecarlo y $\rho(E)$ la densidad de estados. Ahora, consideremos una temperatura β arbitraria cercana a β_0 , por una parte podemos obtener la distribución a esta temperatura, basta con reescribir la distribución como

$$p(E; \beta) = \rho(E) \frac{e^{-\beta E}}{Z(\beta)} = \frac{N_{\beta_0}(E)}{N} \frac{Z(\beta_0)}{Z(\beta)} e^{-(\beta-\beta_0)E} \quad . \quad (2.21)$$

Aunque la relación depende de la proporción entre las funciones de partición, este factor se puede obtener al normalizar la distribución. En cualquier caso, calculando el histograma del observable en función de la energía, $O(E)$, podemos volver a la ecuación (2.2) y reescribir el valor esperado a la temperatura β ,

$$\langle O \rangle (\beta) = \frac{\sum_E O(E)N_{\beta}(E)}{\sum_E N_{\beta}(E)} = \frac{\sum_E O(E)N_{\beta_0}(E)e^{-(\beta-\beta_0)E}}{\sum_E N_{\beta_0}(E)e^{-(\beta-\beta_0)E}} \quad . \quad (2.22)$$

Queda claro ahora el motivo por el que Ferrenberg y Swendsen bautizaron este procedimiento con el nombre de *método del histograma*. Aun así, no es necesario recurrir a la construcción de los histogramas, se puede usar directamente las medidas del Monte Carlo si consideramos la estimación del observable en β con la simulación en β_0 , recordando la ecuación (2.3),

$$\left\langle Oe^{-\beta E}/p_{\beta_0} \right\rangle_{p_{\beta_0}} (\beta) = \frac{\sum_{n=1}^{\text{pasos MC}} O_n e^{-\beta E_n}/p_{\beta_0}(E_n)}{\sum_{n=1}^{\text{pasos MC}} e^{-\beta E_n}/p_{\beta_0}(E_n)} = \frac{\sum_{n=1}^{\text{pasos MC}} O_n e^{-(\beta-\beta_0)E_n}}{\sum_{n=1}^{\text{pasos MC}} e^{-(\beta-\beta_0)E_n}} \quad (2.23)$$

Ambas ecuaciones proporcionan estimaciones correctas de los valores esperados. La ventaja de la primera, aparte de usar menos memoria, es que permite ver intuitivamente hasta qué temperatura se puede extrapolar, lo cual viene determinado por el valor en las cajas del histograma (sin normalizar) que debe ser mucho mayor que 1, véase la figura 2.4.

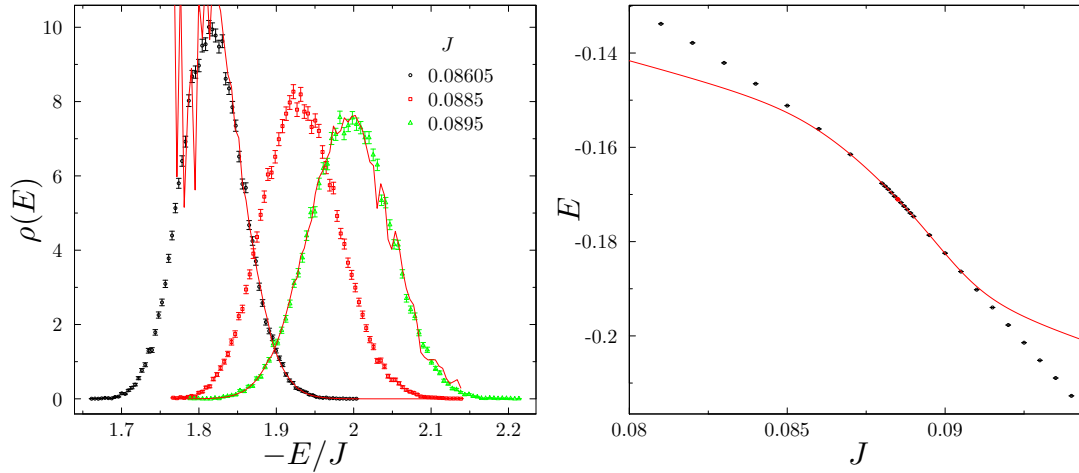


Figura 2.4: En el panel de la izquierda se muestra los histogramas de la energía calculado para tres valores de la interacción $J = 0.0885$, 0.08605 y 0.0895 , para un sistema de tamaño $L = 40$ del modelo de loops en 4. Las líneas rojas son las distribuciones extrapoladas en los valores $J = 0.08605$ y $J = 0.0895$ mediante el método del histograma desde la distribución $J = 0.0885$. Se puede observar como en la zona donde hay menor estadística para el histograma original se produce más error en la extrapolación. En el panel de la derecha se muestra la extrapolación de la media de la energía para estos histogramas.

Aunque este método es bastante útil, en general, se suele simular más de una temperatura, por lo que resulta interesante ser capaces de aprovechar este hecho. Así, además de ampliar el rango de temperaturas donde hay estimaciones de observables, podremos mejorar la precisión en los puntos simulados.

2.3.2. Metodo de los múltiples histogramas

La idea principal para el *método de los múltiples histogramas* fue introducida también por Ferrenberg y Swendsen (1989) y, al igual que antes, parte del hecho de que la densidad de estados no depende de la temperatura. Por lo tanto, se puede asumir que la estimación de la densidad de estados se puede obtener como una media ponderada entre las diferentes estimaciones dadas por cada temperatura simulada,

β_i .

Consideremos el conjunto de histogramas obtenidos y sus temperaturas como $\{(N_{\beta_i}(E), \beta_i)\}$. Como indicamos anteriormente, cada histograma viene definido por la densidad de estados $\rho(E)$ y el factor de Boltzmann, por lo que podemos llamar $\rho_i(E)$ a la estimación de la densidad dada por cada uno de ellos,

$$\rho_i(E) = \frac{N_{\beta_i}(E)}{N_i} \frac{Z(\beta_i)}{e^{-\beta_i E}} \quad (2.24)$$

En caso de ser un modelo con un rango de energías continuo habría que realizar un argumento más sofisticado, pero aún así es fácilmente generalizable. Si tomamos este conjunto de estimaciones de la densidad de energía y somos capaces de estimar su error, podríamos tomar la densidad de estados como media ponderada del conjunto. Ahora bien, en la ecuación (2.24) la mayor fuente de error es el histograma, que como tal ha de seguir una distribución de Poisson, es decir, $\Delta N_{\beta_i}(E) = \sqrt{\langle N_{\beta_i}(E) \rangle}$, donde el promedio es a la situación ideal de infinitas simulaciones con la misma longitud a temperatura β_i . Teniendo en cuenta esto último, la varianza de ρ_i se puede relacionar con la densidad de estados,

$$\sigma_{\rho_i}^2(E) = \left[\frac{\sqrt{\langle N_{\beta_i}(E) \rangle} Z(\beta_i)}{N e^{-\beta_i E}} \right]^2 = \rho^2(E) / \langle N_{\beta_i}(E) \rangle \quad (2.25)$$

Para finalizar el cálculo, consideremos la media ponderada¹ de las densidades de estado y obtenemos que

$$\rho(E) = \frac{\sum_i \frac{Z(\beta_i) N_{\beta_i}(E)}{N_i e^{-\beta_i E}} \frac{\langle N_{\beta_i}(E) \rangle}{\rho(E)^2}}{\sum_j \langle N_{\beta_j}(E) \rangle / \rho(E)^2} = \frac{\sum_i N_{\beta_i}(E)}{\sum_j N_j e^{-\beta_j E} / Z(\beta_j)} \quad (2.26)$$

Lo único que queda por determinar, para poder obtener en la práctica la densidad de estados, es la función de partición $Z(\beta_i)$. Para ello podemos usar la relación de recurrencia que se obtiene de la definición de la función de partición, $Z(\beta) = \sum_E \rho(E) e^{-\beta E}$. En definitiva, las dos ecuaciones relevantes para obtener la interpolación de observables serán las siguientes:

¹ $\rho(E) = [\sum_i \rho_i(E) / \sigma_i(E)^2] / [\sum_i 1 / \sigma_i(E)^2]$

$$Z(\beta) = \sum_E \frac{\sum_i N_{\beta_i}(E)}{\sum_j N_j e^{-(\beta_j - \beta)E} / Z(\beta_j)} \quad (2.27)$$

$$\langle O \rangle(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_E \frac{\sum_i O_i(E) N_{\beta_i}(E)}{\sum_j N_j e^{-(\beta_j - \beta)E} / Z(\beta_j)} \quad (2.28)$$

La primera de ellas se ha de usar como un conjunto de m ecuaciones con m incógnitas ($Z(\beta_i)$) que se han de resolver antes de calcular los observables. Para resolver estas ecuaciones no-lineales usualmente deberemos de recurrir a métodos numéricos. Una forma de hacerlo es resolverlas de forma auto-consistente, introduciendo valores iniciales y dejando que converjan a la solución. En general, como en todas ecuaciones no-lineales empezar con valores iniciales adecuados puede acelerar el proceso de encontrar la solución, más adelante indicamos cuales pueden ser un conjunto de ellos. Una vez obtenidas el valor de las funciones de partición en las temperaturas simuladas, podemos obtener los valores esperados del observable que sea necesario.

Por último, al igual que en el método anterior, se pueden obtener estas ecuaciones sin hacer uso de los histogramas, utilizando las medidas del MC directamente:

$$Z(\beta) = \sum_n \frac{1}{\sum_j N_j e^{-(\beta_j - \beta)E_n} / Z(\beta_j)} \quad (2.29)$$

$$\langle O \rangle(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_n \frac{O_n}{\sum_j N_j e^{-(\beta_j - \beta)E_n} / Z(\beta_j)} \quad (2.30)$$

Un inconveniente de esta forma de las ecuaciones es que si el volumen de datos es muy grande, el tiempo empleado puede ser considerablemente mayor que en el caso de los histogramas.

Este método aunque un tanto complejo de implementar ofrece resultados excelentes, y permite el acceso a mucha información que de cualquier otra forma sería mucho más difícil o se haría con menor precisión. Sin embargo, dada la complejidad desde el punto de vista de la implementación cabe hacer un inciso para indicar cuestiones técnicas para realizarla.

Rango y Valores iniciales

- La energía es extensiva, por lo que muchos de los cálculos son exponenciales de números enormes. Para evitar en parte este problema, podemos fijar el 0 al mínimo de las energías en el rango considerado.
- Por el mismo motivo, en vez de guardar el valor de las funciones de partición, conviene guardar su logaritmo, de forma que el rango que abarque sea mayor.
- Resolver las ecuaciones de la función de partición de forma auto-consistente puede llegar a ser un proceso bastante lento si no se empieza desde valores adecuados. Una estimación rápida a mano permite saber cuales pueden ser los valores que podríamos esperar. Para ello, consideramos el caso simple de dos distribuciones delta, de la forma $N_i(E) = N_i \delta_{E,E_i}$, con $i = 1$ ó 2 . Siempre podemos fijar uno de los valores de la función de partición, por lo que tomamos $Z(\beta_1) = 1$. Por lo tanto, si definimos $Z_i \equiv Z(\beta_i)$ y $\Delta\beta \equiv \beta_2 - \beta_1$,

$$Z_2 = \frac{N_1}{N_1 e^{\Delta\beta E_1}/Z_1 + N_2/Z_2} + \frac{N_2}{N_1 e^{\Delta\beta E_2}/Z_1 + N_2/Z_2} \quad (2.31)$$

y tomamos el caso $N_2 = N_1$, las soluciones de la ecuación son

$$Z_2 = \pm \exp \left[-\frac{1}{2} \Delta\beta (E_1 + E_2) \right] \quad (2.32)$$

Por la forma de la función de partición, tomamos como solución la raíz positiva. A la vista de este resultado, podemos usar como valores iniciales en todas las $Z(\beta_i)$, el obtenido fijando $Z(\beta_1) = 1$ y usándolo como referencia en dicha ecuación. Tomaremos como E_i la media de la energía a la temperatura β_i .

2.4. Cálculo de errores.

Por último, dentro de los métodos numéricos vamos a discutir varios métodos para la estimación de errores. Debido a la forma del proceso de Markov del MC, dos o más pasos MC consecutivos pueden estar correlacionados, Sec. 2.1.5. Sin embargo, el cálculo estándar de errores presupone independencia estadística de los datos. Para

tener en cuenta esta correlación, vamos a usar la analogía de los pasos MC como una variable temporal. Así, podemos definir la función de autocorrelación de las medidas de un observable X como

$$A_X(t) = \sum_{i=0}^n x_i x_{i+t} \cong \int_0^\infty x(\tau) x(t + \tau) d\tau \quad . \quad (2.33)$$

Véase como ejemplo la figura 2.5, en la que se representa la autocorrelación de la energía en uno de los modelos de loops. Esta correlación sigue, en general, una ley de decaimiento exponencial que permite definir un *tiempo de autocorrelación*, τ_x . De esta forma, datos que estén separados más de 2 veces ese tiempo se puedan considerar completamente independientes. Esto hace que se pueda determinar la barra de error de la media de X mediante el uso de datos separados un tiempo $2\tau_x$, dado que esta viene determinada por el cálculo estándar de errores de un conjunto de datos independientes. Sin embargo, esto implica no usar lo que puede ser una gran parte importante de la información. Así, si consideramos la media de todo el conjunto de observaciones, una primera estimación de las barras de error *reales* es incluir el tiempo de autocorrelación como factor en el cálculo de la barra de error (Müller-Krumbhaar y Binder, 1973), de la forma

$$\Delta \hat{X} = \text{sd}(\{x_i\}) / \sqrt{n/(2\tau_x + 1)} \quad . \quad (2.34)$$

Sin embargo, podemos estudiar otros métodos que proporcionan barras de error más precisas y no dependen específicamente de la forma de la función de autocorrelación.

2.4.1. Método de bloques.

Consideremos el caso anterior un conjunto ordenado de medidas $\mathcal{X} = (x_i)_{i=1}^n$ y un tiempo de correlación τ_x . El método de bloques consiste en coger un número de pasos m y dividir el conjunto \mathcal{X} en n/m subconjuntos de m medidas consecutivas. Si n no fuera divisible podríamos simplemente no usar los últimos puntos restantes. Calculamos la media de cada uno de los subconjuntos y el error del conjunto de estas medias, supuestas independientes. Si m es mayor que $2\tau_x$ el último supuesto será correcto y en principio debería proporcionar el valor correcto del error estadístico, puesto que las correlaciones han quedado enmascaradas en las medias.

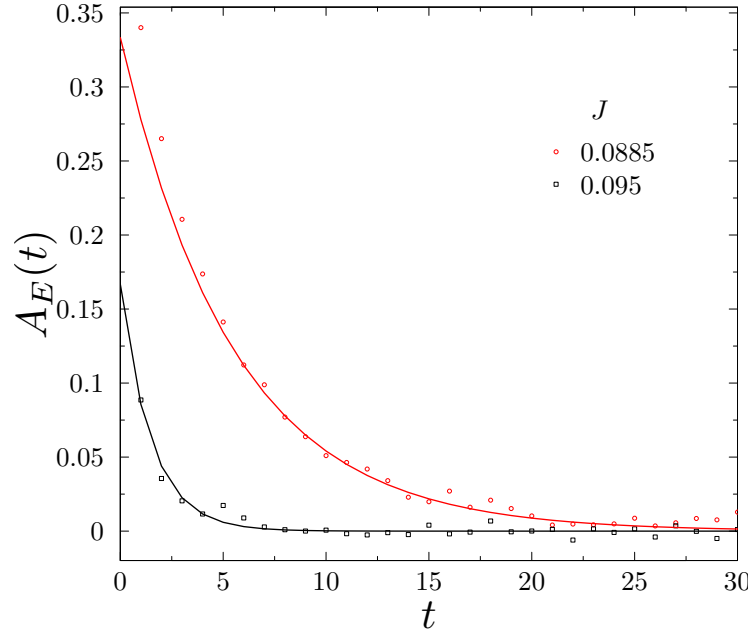


Figura 2.5: Autocorrelación de la energía en función del número de pasos Monte Carlo t para dos sistemas en puntos diferentes. Se puede observar el decaimiento de esta función de forma exponencial, con tiempos de correlación $\tau \sim 5$ (rojo) y $\tau \sim 1.5$ (negro).

Por la forma de la función de autocorrelación, si tomamos el conjunto de las medias de m elementos, el procedimiento de los bloques implica sólo un re-escalado del tiempo de autocorrelación, puesto que

$$\sum_{i=1}^{n/m} \hat{x}_i \hat{x}_{i+t} = \sum_{i=1}^{n/m} \left(\sum_{j=1+m(i-1)}^{im} \frac{x_j}{m} \right) \left(\sum_{j=1+m(i-1)}^{im} \frac{x_{j+mt}}{m} \right) \sim \frac{1}{m^2} \sum_{k=1}^n x_k x_{k+mt}. \quad (2.35)$$

Esta transformación implica un re-escalado de la ley de decaimiento exponencial de la forma $\tau \rightarrow \tau/m$. Por lo tanto, cuando m es del orden del tiempo de autocorrelación, las n/m medias son independientes y la barra de error es una estimación de la barra de error del conjunto de medidas. Éste método no sólo proporciona el error estadístico de la muestra correlacionada, sino que al no haber una dependencia explícita de la estimación del tiempo de correlación se puede usar para su obtención mediante la ecuación (2.34).

A pesar de ser bastante útil y proporcionar valores correctos para los errores

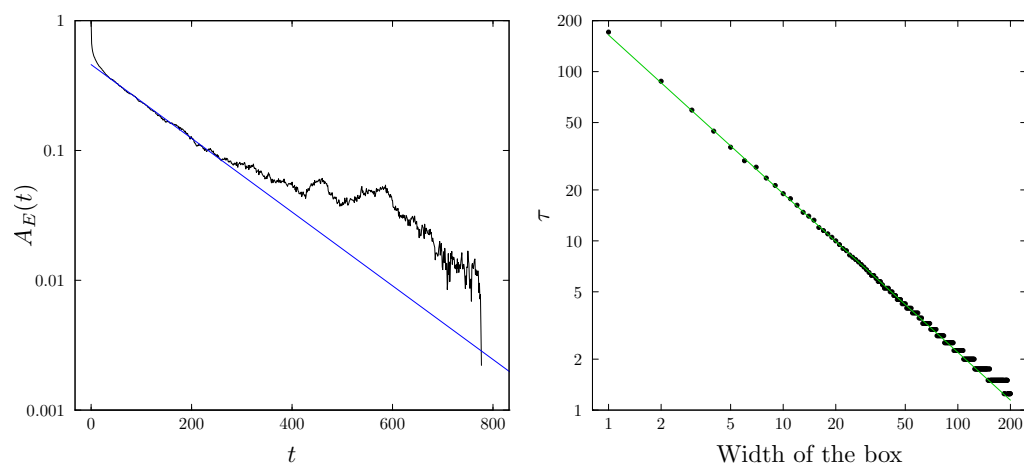


Figura 2.6: El panel izquierdo muestra la auto-correlación para $N = 50000$ medidas de la energía en una escala semi-logarítmica. La línea azul es un ajuste a una ley exponencial con un tiempo $\tau \approx 153$. El panel derecho muestra una estimación del tiempo τ en función del tamaño de la caja en escala logarítmica. La línea de color verde es un ajuste a una ley de potencias de la forma $\tau = Am^{-0.94}$.

hay que llevar cuidado con su uso. Por ejemplo, si la muestra no está ordenada temporalmente, con este método no se apreciará la saturación del valor y puede llevar a estimaciones incorrectas.

2.4.2. Método bootstrap

Otra forma de estimar errores es el método bootstrap o de remuestreo. Para este método sin embargo necesitaremos estimar previamente el tiempo de autocorrelación, salvo que este sea bastante pequeño.

Consideremos primero un conjunto de n medidas totalmente descorrelacionadas, este método propone hacer conjuntos nuevos con n datos, escogidos de forma aleatoria de entre las medidas originales, permitiendo la posibilidad de repetición. Las medias de estos nuevos conjuntos *sintéticos* es una variable aleatoria cuya media es la media del conjunto inicial. La desviación estándar da cuenta de las fluctuaciones de la media del conjunto, por lo que su valor da una estimación del error estadístico

de la media.

Si el tiempo de autocorrelación es suficientemente pequeño, como el remuestreo del conjunto original contiene un gran número de datos repetidos, podemos esperar que el método pueda enmascarar ese tiempo de autocorrelación. Sin embargo, cuando es muy grande queda claro que el método falla al no ser capaz de reproducir la estructura de la muestra original. Para poder mantener dicha estructura, para cada medida escogida podemos además seleccionar las τ medidas siguientes. La repetición de este proceso n/τ veces genera una muestra sintética, que en principio imita mejor las fluctuaciones de las medidas de la original. En efecto, el bootstrap realizado de esta forma, permite obtener valores para el error estadístico de la muestra que concuerdan con las otras predicciones.

Método de los histogramas

El método bootstrap es también útil para calcular el error de los resultados que proporciona el método de los histogramas. Otra vez, debemos construir muestras sintéticas con datos aleatorios de la muestra original. Para cada muestra sintética se calcula el histograma de la energía y los observables relevantes. Las fluctuaciones en los resultados proporcionan una estimación fiable de las barras de error para este método. Aunque hay que tener precaución con posibles correlaciones debido a diferentes longitudes en cada muestra.

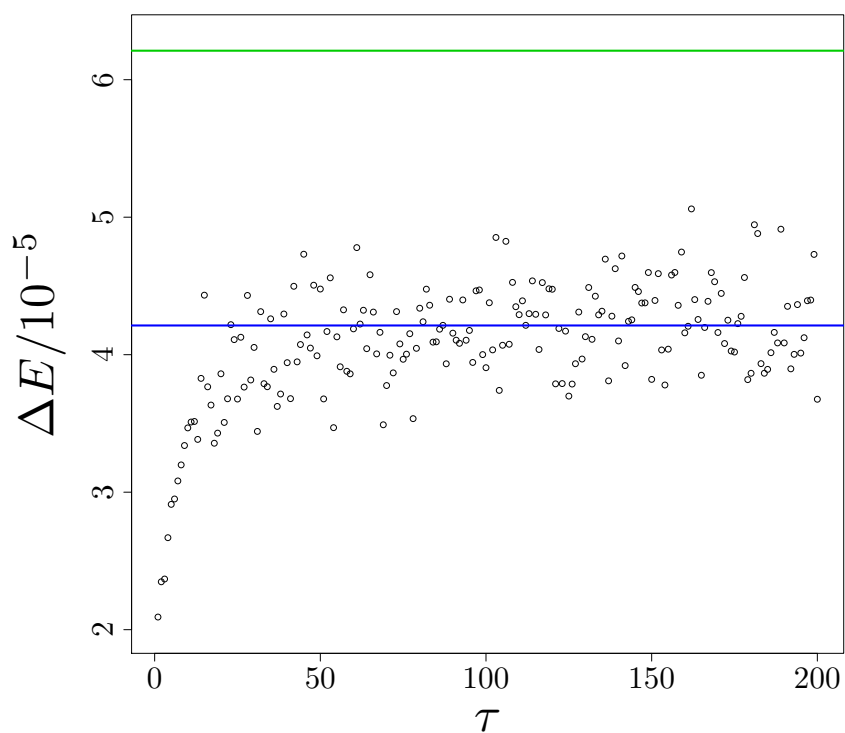


Figura 2.7: Se representa el error estimado ΔE mediante el método bootstrap en función del tiempo de correlación usado para generar muestras sintéticas, para una muestra con tiempo de correlación $\tau \approx 5$. La línea azul es la estimación correspondiente al método de los bloques. La línea verde es la estimación correspondiente a la ecuación (2.34).

Modelos de loops en 3D con orientación y color

En este capítulo estudiamos la física estadística de los modelos de loops completamente empaquetados (CPL) tridimensionales, cuya función de partición introdujimos en la sección 1.2.5. Esta familia de modelos presentan transiciones de fase entre dos tipos de fase, una donde todos los loops son finitos o cortos y otra en la que hay al menos un loop extendido. Se trata de modelos y transiciones de fase interesantes por distintos motivos, los loops juegan un papel importante en una variedad de problemas de la mecánica estadística clásica, y además, son también centrales para simulaciones de sistemas cuánticos.

Como mostramos en la sección 1.3.3, la función de partición puede ser reescritas en términos de grados de libertad locales que viven en el espacio complejo proyectivo \mathbb{CP}^{n-1} , identificando así los modelos de loops con discretizaciones de los modelos sigma sobre \mathbb{CP}^{n-1} . Además, se puede establecer un diccionario, expresando las funciones de correlación del modelo sigma en términos de las de los modelos de loops. En concreto, las funciones de correlación de dos puntos están relacionados con la probabilidad de que dos enlaces de la red pertenezcan al mismo loop (Nahum *et al.*, 2013c). La fase de loops cortos representa por tanto la fase desordenada del modelo sigma, mientras que el comportamiento de los loops infinitos viene dado por el de su fase ordenada. La relación entre las funciones de correlación lleva implicaciones sobre la geometría de los loops, en particular, la física de las *fluctuaciones de Goldstone* implica que los loops en la fase ordenada son brownianos a grandes distancias, mientras que en el punto crítico los loops tienen una dimensión fractal relacionada

con el exponente de la correlación η del modelo sigma.

3.1. Contexto

Dependiendo del valor de la fugacidad de los loops, estos modelos de loops pueden ser mapeados a varios problemas en la fenomenología crítica. Fijando $n = 1$, representan una clase importante de transiciones de fase clásicas, del tipo de percolación, cuya naturaleza es visible sólo en observables geométricos. En esta correspondencia, los loops representan líneas de defectos en un ambiente con desorden congelado (*quenched disorder*). Entre los ejemplos podemos citar las líneas de nivel cero de un campo complejo aleatorio Bradley *et al.* (1992a,b), cuerdas cósmicas (Vachaspati y Vilenkin, 1984) o vórtices ópticos (O'Holleran *et al.*, 2008). Los modelos de loops en $n = 1$ también surgen a través de un mapeo exacto de modelos de red para ciertas transiciones de Anderson metal-aislante (Gruzberg *et al.*, 1999; Beaudouin *et al.*, 2002). Las propiedades de los modelos sigma y su conexión con los modelos de loops fueron analizadas recientemente para sistemas bidimensionales por Read y Saleur (2001); Candu *et al.* (2010). Mientras que los modelos tridimensionales fueron estudiados en $n = 1$ por Ortuño *et al.* (2009) y su relación general con transiciones de fase geométricas por Nahum y Chalker (2012).

Cuando n es mayor que uno, cabe destacar que los mismos modelos de loops tridimensionales pueden ser mapeado a modelos cuánticos antiferromagnéticos $SU(n)$ en $2 + 1$ dimensiones si se considera una matriz de transferencia apropiada (Nahum *et al.*, 2013c). La fase con loops largos es la fase con un estado de Néel, y la fase con sólo loops cortos es un líquido de enlaces de valencia (*valence bond liquid* o VBL) en la que los espines están en forma de dímeros sin romper las simetrías de la red. De hecho, el CPL está estrechamente relacionados con los algoritmos de loops que fueron desarrollados para la simulación Monte Carlo de sistemas cuánticos de espines (Evertz, 2003; Kaul *et al.*, 2012; Harada *et al.*, 2003; Beach *et al.*, 2009). Una característica específica de la discretización de la teoría de campos (1.47) y los modelos de loops es que, dado que el eje tipo *temporal* es microscópicamente

equivalente a los dos tipo *espaciales*, en una transición de fase continua el valor del exponente dinámico $z = 1$ está garantizado, y no es necesario calcularlo. Podremos construir modelos de loops, a partir de los estudiados aquí, con transiciones de *deconfinamiento* a fases VBS (*valence bond solid*) permitiendo interacciones extras. Un caso particular lo analizaremos en el siguiente capítulo.

Aparte de sus apariciones en algoritmos computacionales para modelos cuánticos antiferromagnéticos, los modelos de loops con $n > 1$ han aparecido en una gran variedad de contextos. Una representación de loops (Wolff, 2010) diferente a la descrita en este capítulo, da también una conexión con los modelos sigma bidimensionales \mathbb{CP}^{n-1} , que a su vez fueron simulados también usando la conexión entre los sistemas magnéticos $SU(n)$ en $(1 + 1)$ dimensiones y los modelos sigma clásicos bidimensionales. Separadamente, estudios detallados de las propiedades de los loops que surgen en la descripción de algunos sistemas antiferromagnéticos clásicos con frustración se pueden encontrar en Jaubert *et al.* (2011, 2012); Khemani *et al.* (2012), así como los ciclos que aparecen en problemas estadísticos que involucran permutaciones aleatorias (Schramm, 2005; Grosskinsky *et al.*, 2012).

En este sentido, los modelos de loops y otros relacionados han atraído una considerable atención en la literatura de física matemática y estadística, como representaciones probabilísticas de sistemas cuánticos de espines (Aizenman y Nachtergaele, 1994) y problemas estadísticos *per se*. En particular, para problemas de tipo campo medio para *ciclos en grafos completos*, se probó que la distribución de longitudes de los ciclos es Poisson-Dirichlet (PD) (Schramm, 2005). Recientemente Goldschmidt *et al.* (2011) hicieron una sorprendente conjetura, con el soporte de simulaciones (Grosskinsky *et al.*, 2012): la misma forma de la distribución también se aplica a loops largos en sistemas tridimensionales. En la sección 3.6 damos evidencias que apoyan estas conjeturas al estudiar la fase extendida de los modelos.

3.2. Modelos

Definimos el modelo de loops en las redes tridimensionales de forma análoga a como lo hicimos en el capítulo 1. Empezamos con una red con enlaces orientados y número de coordinación cuatro, en la que en cada nodo hay dos enlaces que entran y dos que salen. Una configuración de loops completamente-empaquetados se construye seleccionando para cada nodo uno de los dos posibles emparejamientos entre enlaces de entrada y de salida. El peso estadístico de esa configuración tiene dos contribuciones. La primera, para cada nodo una probabilidad p se asocia con uno de los emparejamientos, y $1 - p$ con la otra. La segunda es que cada loop lleva una fugacidad n . Cuando n es entero, para generar esta fugacidad permitimos que cada loop de forma independiente tenga uno de n colores. Consideremos configuraciones \mathcal{C} en las que el número de nodos de cada tipo de emparejamiento es N_p y N_{1-p} , recordamos entonces que la función de partición es

$$Z_{\text{CPL}} = \sum_{\mathcal{C}} p^{N_p} (1-p)^{N_{1-p}} n^{|\mathcal{C}|}, \quad (3.1)$$

donde llamamos $|\mathcal{C}|$ al número de loops de la configuración \mathcal{C} . La analogía con el factor de Boltzmann sugiere definir la energía de la configuración como

$$E \equiv -N_p \ln p - N_{1-p} \ln(1-p). \quad (3.2)$$

Entonces, un modelo viene totalmente especificado por la elección de la red, las direcciones de los enlaces y el peso asociado a los emparejamientos en cada nodo. Estudiamos dos modelos en redes tridimensionales orientadas propuestas por Cardy (2010). Estas redes son análogas a las redes bidimensionales “L” y Manhattan, y nos referiremos a ellas como las redes L y K tridimensionales, respectivamente. El modelo de loops en la red L tridimensional es simétrica bajo $p \rightarrow 1-p$. En $p = 0$ y $p = 1$ sólo tiene loops de tamaño mínimo (seis pasos), aunque hay una fase extendida cerca de $p = 1/2$ mientras n no sea demasiado grande ($n \leq n^*$, con $4 < n^* < 5$). El modelo de loop en la red K no es simétrico bajo $p \rightarrow 1-p$, en cambio, está diseñado para asegurar que ambas fases, localizada y extendida, aparezcan conforme se varíe p . En $p = 0$ sólo tiene loops de tamaño mínimo (seis pasos también) y en $p = 1$ todas

las trayectorias son líneas rectas. Tiene una transición desde una fase localizada para p pequeños a otra extendida para p cercano a 1, para todo valor de n . Los diagramas de fases de los modelos de loops en ambas redes pueden observarse en la figura 3.1.

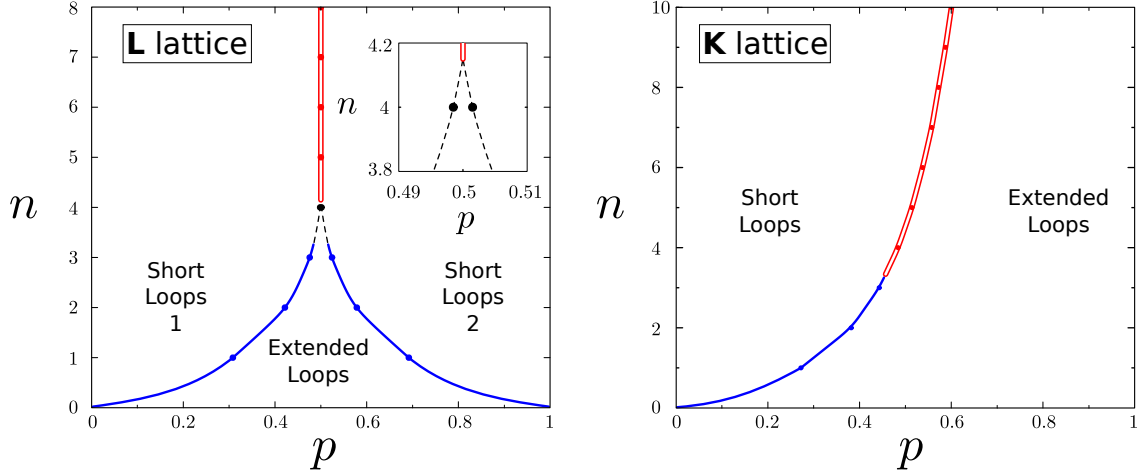


Figura 3.1: Diagramas de fases para las redes L y K. Las transiciones de fase continuas se indican con puntos azules y una única línea, mientras que las de primer orden se indican con puntos rojos y doble línea. Para la red L, el punto $p = 1/2$, $n = 4$ está en la fase extendida, tal y como muestra el panel interior.

Ambas redes se definen en un *grafo* \mathcal{G} con simetría cúbica, aunque difieren en las orientaciones de los enlaces. Para construir \mathcal{G} tomemos dos redes cúbicas interpenetradas, $C_1 \equiv (2\mathbf{Z})^3$ y $C_2 \equiv (2\mathbf{Z} + 1)^3$, ilustrado en la figura 3.2. Los bordes o enlaces de \mathcal{G} están formados por las intersecciones de las caras de C_1 con las caras de C_2 . Los nodos de \mathcal{G} se sitúan en los puntos medios de los enlaces de C_1 o de C_2 (aunque estos enlaces no pertenecen a \mathcal{G}), y los cuatro enlaces que se cruzan en el nodo están en los dos ejes ortogonales. Una propiedad de \mathcal{G} que usaremos más tarde es el hecho de que es una red bipartita, con dos subredes octaédricas separadas. Una subred está formada por los nodos de \mathcal{G} que están en una de las dos redes C_i .

La red L, representada en la figura 3.3, tiene la propiedad de que los enlaces de entrada de un nodo están en el mismo eje, mientras que los de salida están en el otro (Fig. 3.4). Esto es suficiente para fijar la orientación de todos los enlaces con

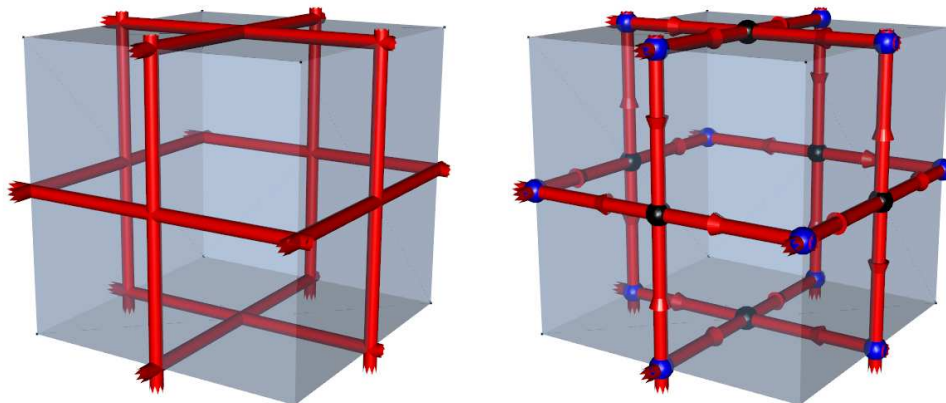


Figura 3.2: Izquierda: un cubo de C_1 , con las líneas formadas por la intersección con C_2 , marcada en rojo. Estas líneas forman los enlaces de las redes L y K. Derecha: igual, con las orientaciones correspondientes a la red L. Los nodos están en dos subredes, diferenciadas por colores amarillo y negro.

excepción de una elección global con dos posibilidades, la cual es arbitraria. La red K tiene la propiedad alternativa de que todos los enlaces que pertenecen al mismo eje están orientados en el mismo sentido (Fig. 3.4). Además, los enlaces en los ejes paralelos de los vecinos más cercanos están dirigidos de forma opuesta.

Para especificar la asignación de los pesos p y $1 - p$ en cada caso, describimos la única configuración de loops que contribuye en Z_{CPL} para $p = 0$. Para ambas redes esta configuración está formada por loops formados por seis enlaces no coplanares. Cada uno de estos loops puede ser definido dando las coordenadas de un sitio inicial y las indicaciones para los tres primeros pasos desde ese sitio, los tres pasos restantes son con orientaciones opuestas y siguen el mismo orden. La celda unidad de la red tridimensional L contiene cuatro de estos loops, mientras que la de la red K sólo contiene dos, tal y como indicamos en la tabla 3.1.

Tomamos longitud unidad como la longitud del enlace. Los sistemas estudiados

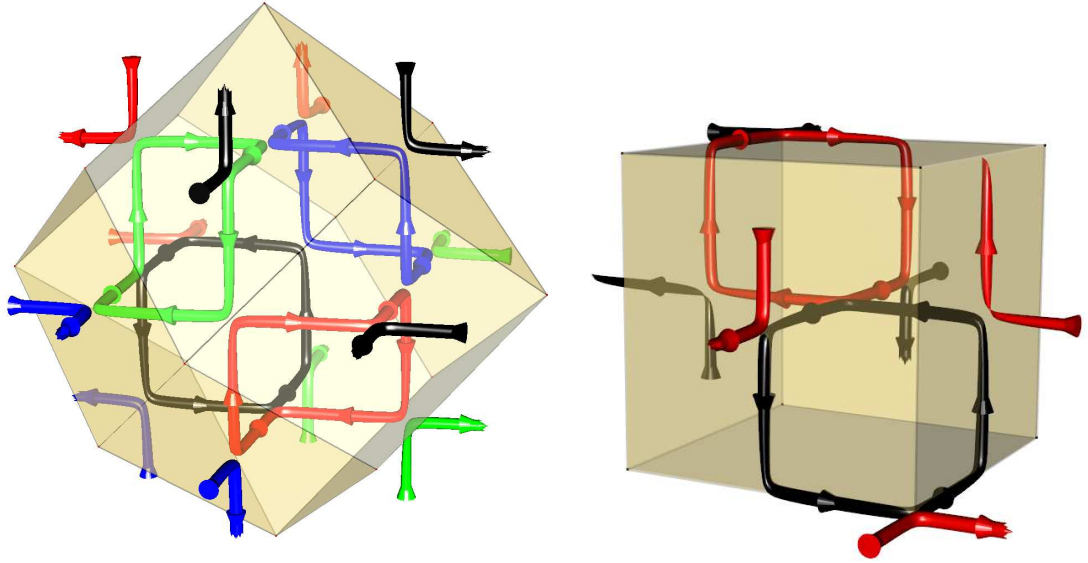


Figura 3.3: Panel izquierdo: Loops en la red L tridimensional en $p = 0$. Los planos de la celda Wigner-Seitz están sombreados y los cuatro loops de la tabla 3.1 tienen colores diferentes. Panel derecho: Loops en la red K tridimensional en $p = 0$ y los planos de la celda Wigner-Seitz. Los dos loops de la tabla 3.1 están coloreados de forma diferente.

aquí se han restringido a muestras cúbicas de tamaño lineal L con condiciones de contorno periódicas. El número de nodos es entonces $N = 3L^3/4$ para ambas redes y el de enlaces el doble.

Red L				Red K			
$(0, 1, 0)$	\hat{x}	\hat{y}	\hat{z}	$(1, 0, 0)$	\hat{x}	\hat{y}	\hat{z}
$(1, 0, 1)$	\hat{x}	\hat{y}	$-\hat{z}$	$(1, 1, 1)$	$-\hat{x}$	\hat{z}	\hat{y}
$(0, 1, 2)$	\hat{x}	$-\hat{y}$	$-\hat{z}$				
$(1, 2, 1)$	\hat{x}	$-\hat{y}$	\hat{z}				

Tabla 3.1: Posición inicial y los tres primeros pasos de los hexágonos constituyentes de la red L y K en $p = 0$.

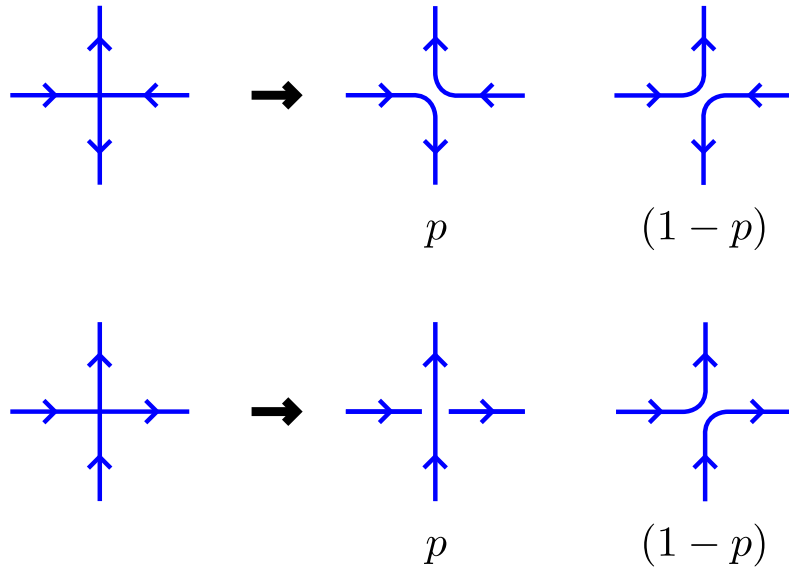


Figura 3.4: Emparejamientos en un nodo en la red L (arriba) y K (abajo), y sus pesos asociados. En la red L se alternan en las dos subredes.

3.3. Procedimiento de Monte Carlo

Primero describimos el proceso de Monte Carlo, para lo cual explicaremos como llamamos a las configuraciones, como se construye un estado inicial y cuales son los sorteos que se usan para cada paso de Monte Carlo. Este proceso es similar a los usados en los algoritmos de loops para simulaciones en sistemas cuánticos magnéticos (Evertz, 2003; Sandvik, 2010a; Kaul *et al.*, 2012).

De aquí en adelante asumimos que la fugacidad n es entera, por lo que la generamos a partir de la asignación de colores a los loops. Una configuración del modelo es especificada por el emparejamiento entre los enlaces de entrada y de salida y el color de cada enlace, más la restricción de que todos los enlaces que pertenecen a un mismo loop deben tener el mismo color. También desarrollamos un algoritmo alternativo que permitía considerar n real y positivo, pero es menos eficiente.

Construimos un estado inicial eligiendo de forma aleatoria la configuración de cada nodo con la probabilidad especificada. Se asocia un color a cada loop, elegido con igual probabilidad de entre las n posibilidades.

Los estados siguientes se generan usando tres tipos de movimientos de Monte

Carlo que mantienen el balance detallado. En el primero, un nodo se elige aleatoriamente. Si las dos ramas de loops que pasan por el nodo elegido tienen colores diferentes, la configuración del nodo no se cambia. En el caso en el que ambas coinciden con el mismo color, se cambia de acuerdo a las reglas siguientes. Llamemos a la configuración del nodo que tiene probabilidad $1 - p$ como α y a la que tiene probabilidad p como β . Para $p < 1/2$, un nodo cuya configuración es α siempre se cambia a β , mientras que uno cuya configuración es β se cambia a α con probabilidad $(1 - p)/p$. En el segundo tipo de movimiento, se elige un enlace aleatoriamente y se cambia el color del loop al que pertenece a otro color diferente, elegido con probabilidad uniforme entre las $n - 1$ posibilidades restantes. El tercer tipo de movimiento es recolorar todos los loops del sistema, con nuevos colores elegidos independientemente y de forma aleatoria para cada loop. De esta forma, aseguramos que los colores de los loops cortos se equilibran de forma eficiente. queda claro que estos tres tipos de actualizaciones cumplen el balance detallado para la función de partición (3.1).

Intercalamos los dos primeros movimientos, realizando un cambio de color cada diez actualizaciones de los nodos. Para una muestra de N nodos llamamos a $N/10$ secuencias de este tipo un paso Monte Carlo. Realizamos las medidas cada dos pasos Monte Carlo y aplicamos el tercer movimiento después de estas medidas. Usamos la función de autocorrelación de la energía para estimar el tiempo de correlación.

Consideramos modelos de loops con un número entero de n entre 1 y 10, y el tamaño del sistema hasta 7.5×10^5 enlaces para $n \geq 2$ (exceptuando la $n = 3$ en la red L donde llegamos a 1.25×10^7), y 10^{10} para $n = 1$. El número mínimo de pasos Monte Carlo usados es 10^5 para cualquier $n \geq 2$, p y L , y aumenta conforme disminuye L , para $n = 1$ consideramos 1000 configuraciones para los tamaños más grandes. Con los tiempos de correlación obtenidos, usamos más de 1000 configuraciones independientes para todos los sistemas.

3.4. Observables

Definimos ahora los observables que medimos para los modelos de loops, de forma que estén relacionados con los de los modelos sigma sobre \mathbb{CP}^{n-1} . En particular, calculamos los observables equivalentes a la rigidez, susceptibilidad, parámetro de orden y capacidad calorífica del modelo sigma. También calculamos el parámetro de Binder de la energía y la dimensión fractal de los loops. Las definiciones detalladas y su comportamiento según la teoría de escala las presentamos a continuación.

Número de curvas extendidas

El primer observable en el que estamos interesados es el número promedio de curvas extendidas de la muestra $n_w(p, L)$ (*winding number* o WN) en una dirección dada, el cual es proporcional a la rigidez del modelo sigma. De forma precisa, seleccionamos un plano de la red y, para cada configuración, contamos el número de secciones de trayectoria que salen del plano por un lado dado y rodean la muestra hasta llegar al mismo plano por el lado opuesto. Cabe destacar que pueden considerarse otras definiciones para el WN, como la suma de los *índices topológicos* de los loops, o lo que es lo mismo, el número de veces que los loops rodean una muestra. Pero en general el comportamiento de estas otras definiciones son muy similares entre sí, por lo que nos concentramos sólo en el primero.

Una propiedad de estos modelos es que por cada una de estas curvas extendidas en una dirección, hay otra en sentido contrario. Para tamaños grandes del sistema $n_w(p, L)$ tiende a cero en las fases con sólo loops cortos y es proporcional a L en la fase con trayectorias extendidas, donde los loops son brownianos. Si hay una transición continua entre estas fases en un punto crítico p_c , con un exponente de la longitud de correlación ν , esperamos que el comportamiento de escalado de tamaño finito sea

$$n_w(p, L) = f_w(L^{1/\nu}[p - p_c]) . \quad (3.3)$$

Aunque es posible que la función f_w dependa también de exponentes irrelevantes, de la forma $f_w(L^{1/\nu}[p - p_c], L^{y_1}[p - p_c], \dots)$.

Susceptibilidad

La susceptibilidad se puede definir como una integral espacial de la parte conectada de la función de correlación del modelo loops. Para poder escribirlo, introducimos para cada configuración el número $n(l)$ de loops de longitud l , el cual se puede separar en dos contribuciones $n_{\text{ext}}(l)$ y $n_{\text{loc}}(l)$ según sean loops extendidos o localizados, y con $n(l) = n_{\text{loc}}(l) + n_{\text{ext}}(l)$. Aquí definimos loops extendidos aquellos que contribuyen a n_w . Usando $\langle \dots \rangle$ para denotar promedio sobre las configuraciones, la susceptibilidad χ viene dada por

$$\begin{aligned} N\chi &= \left\langle \sum_{l=0}^{2N} l^2 n(l) \right\rangle - \left\langle \sum_{l=0}^{2N} l^2 n_{\text{ext}}(l) \right\rangle \\ &= \left\langle \sum_{l=0}^{2N} l^2 n_{\text{loc}}(l) \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Al acercarse a una transición continua, χ en un sistema infinito diverge con un exponente crítico γ , mientras que la forma de escala esperada en un sistema de tamaño finito es

$$\chi = L^{\gamma/\nu} f_\chi(L^{1/\nu}[p - p_c]). \quad (3.5)$$

Parámetro de orden

El valor del parámetro de orden \mathcal{M} se puede extraer de la función de correlación usada para calcular la susceptibilidad, dado que la parte desconectada, el segundo término de la parte derecha de la ecuación (3.4), es proporcional a \mathcal{M}^2 . Por tanto, tomamos como parámetro

$$N\mathcal{M} = \sqrt{\left\langle \sum_{l=0}^{2N} l^2 n_{\text{ext}}(l) \right\rangle}. \quad (3.6)$$

En una transición continua \mathcal{M} varía con el exponente crítico β y tiene el comportamiento

$$\mathcal{M} = L^{-\beta/\nu} f_{\mathcal{M}}(L^{1/\nu}[p - p_c]). \quad (3.7)$$

Se pueden usar otros observables que se comportan de forma similar al parámetro de orden, como por ejemplo $N\mathcal{M}_0 = \left\langle \sum_{l=0}^{2N} l n_{\text{ext}}(l) \right\rangle$, la longitud de las ramas extendidas de un loop \mathcal{O}_w (no del loop entero) o la longitud del loop más grande.

Capacidad calorífica

La capacidad calorífica C se puede expresar como es usual en términos de las fluctuaciones de la energía. Podemos usar la expresión (3.2) absorbiendo una constante en la energía,

$$NC = \langle N_p^2 \rangle - \langle N_p \rangle^2. \quad (3.8)$$

El comportamiento crítico de la capacidad calorífica es

$$C = L^{-\alpha/\nu} f_C(L^{1/\nu}(p - p_c)). \quad (3.9)$$

Dimensión fractal

Para evaluar la dimensión fractal de los loops d_f medimos el cuadrado de la distancia euclídea $R^2(l)$ entre dos puntos del loop en función de la longitud del mismo l . Evidentemente, en promedio $R^2(l)$ aumenta con la longitud l para l pequeños y debe decrecer a cero para cada loop conforme l se acerque a la longitud total del loop. Para eliminar estos efectos de loops finitos, sólo consideramos las contribuciones de $R^2(l)$ para los longitudes menores que un tercio de la longitud del loop. Esperamos entonces que

$$\langle R^2(l) \rangle \propto l^{2/d_f}. \quad (3.10)$$

Parámetro de Binder

Como herramienta para distinguir entre transiciones de primer y segundo orden, calculamos el parámetro de Binder V_L para la energía (Challa *et al.*, 1986)

$$V_L \equiv 1 - \frac{1}{3} \frac{\langle n_p^4 \rangle}{\langle n_p^2 \rangle^2}. \quad (3.11)$$

y la redefinición que dimos en el capítulo 1, $\mathcal{V} = 2/3 - V_L$.

3.5. Criticalidad

3.5.1. Comportamiento crítico para $n = 1$

En $n = 1$ el modelo de loops permite un mapeo exacto a las transiciones de Anderson en la clase de simetría C (Gruzberg *et al.*, 1999; Beamond *et al.*, 2002), para todas las redes con número de coordinación cuatro y orientadas. El comportamiento crítico del modelo es entonces el de esta clase de universalidad y los valores de los exponentes críticos serán compatibles con los obtenidos en cálculos previos (Ortuño *et al.*, 2009). Esta transición tiene la particularidad de que sólo es observable en las medidas geométricas del modelo.

Para la red K, el comportamiento del WN se puede observar en la figura 3.5. En la fase de sólo loops finitos, el WN decrece de forma exponencial con el tamaño, mientras que en la de loops extendidos, aumenta linealmente con el tamaño, signo del carácter browniano de los loops. En el panel interior de la derecha, se muestran los datos de $n_w(p, L)$ en función de p de forma que se observe esta fenomenología. Como confirmación del hecho de ser una transición de fase continua, las curvas de $n_w(p, L)$ en función de p se cruzan un punto común para diferentes tamaños de L , como se puede observar en el panel interior izquierdo.

Para el caso $n = 1$, el Monte Carlo permite acceder a tamaños suficientemente grandes como para no necesitar correcciones asociadas a exponentes irrelevantes. Así, podemos estimar los parámetros críticos mediante el colapso de escala de este observable, panel principal de la Fig. 3.5. Para ello, construimos la función de escala (3.3) numéricamente, usando como variable de escala

$$x = L^{1/\nu}(p - p_c) \quad . \quad (3.12)$$

Para ello usamos la función de ajuste $f_{\text{splines}}(x)$ construida mediante *B-splines cúbicos* con 14 puntos de control, véase por ejemplo (Knott, 2000). Juzgamos la bondad del ajuste comparando el valor de χ^2 con el número de grados de libertad. Aunque este ajuste no se justifica para todos los tamaños representados, se puede conseguir un buen colapso con sólo estos parámetros ajustables usando los tamaños $L \geq 600$.

Este ajuste proporciona los valores $\nu = 0.987(10)$ y $p_c = 0.27174(2)$, con $\chi^2 = 83$ para 81 grados de libertad. El panel principal de la Fig. 3.5 muestra todos los tamaños usando estos parámetros.

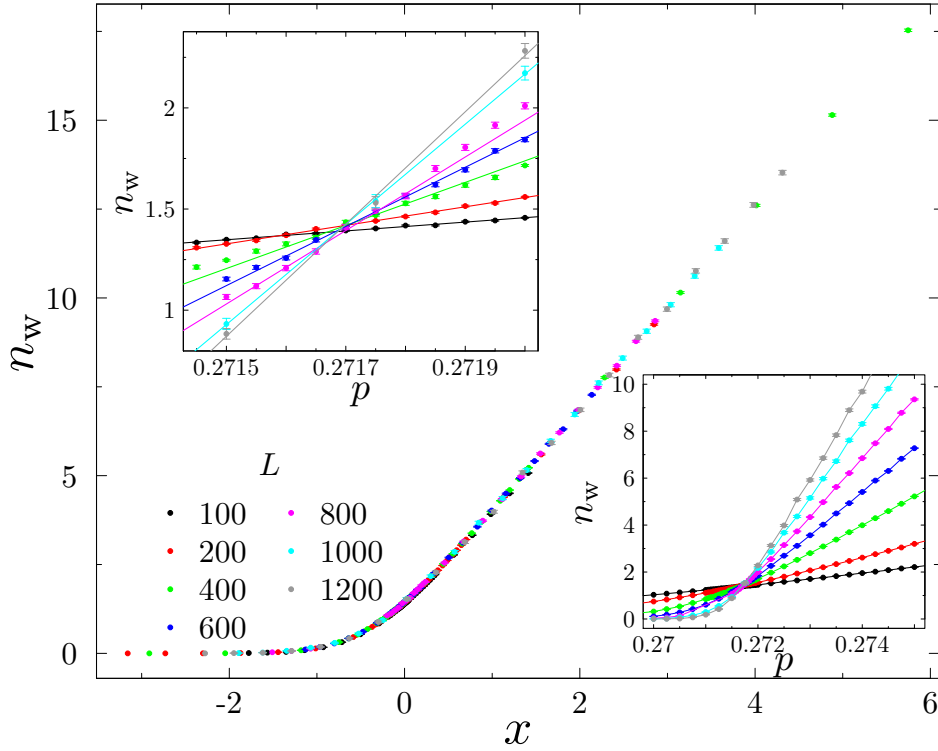


Figura 3.5: WN para la red K en $n = 1$. Panel principal: colapso de escala para el n_w , con la mejor estimación de los parámetros críticos. Panel interior derecho: datos de $n_w(p, L)$ frente a p . Panel interior izquierdo: los mismos datos en un rango de p menor, cerca del punto crítico. Las líneas son guías visuales y se puede observar que el cruce está bien definido.

Por otra parte, para caracterizar el otro exponente independiente de la transición podemos usar el parámetro de orden, la susceptibilidad, las correlaciones o la dimensión fractal. En la figura 3.6 se representa el parámetro de orden \mathcal{M} frente a n_w . Como n_w es una función monótona de la variable de escala x , podemos usarlo directamente como variable de escala para el parámetro de orden, de forma que sólo queda un parámetro ajustable, $\mathcal{M} = L^{-\beta/\nu} \tilde{f}_{\mathcal{M}}(n_w)$. Un ajuste similar proporciona un exponente crítico $\beta/\nu = 0.465(15)$, que mediante las relaciones de *hyperscaling*

implica una dimensión anómala $\eta = -0.07(3)$.

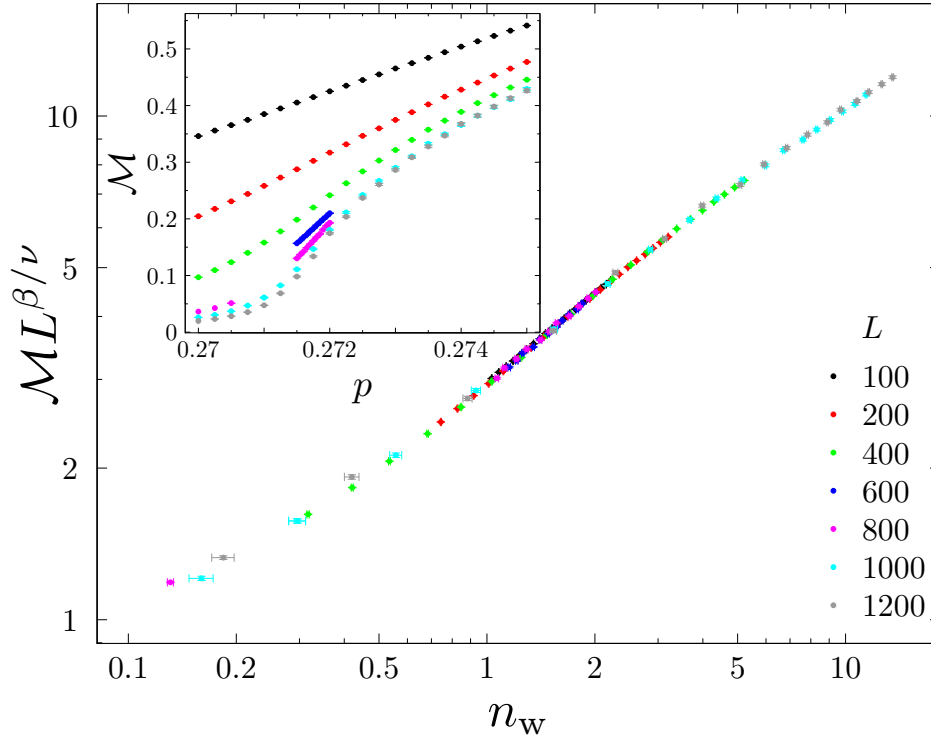


Figura 3.6: Parametro de orden en la red K. Panel principal: colapso de las curvas del parámetro de orden \mathcal{M} , frente a la variable de escala n_w . Panel interior: Datos de \mathcal{M} frente a la probabilidad p .

El caso de la red L tiene otra particularidad. Recordando la definición, podemos considerar el problema de percolación en las dos subredes interpenetradas C_1 y C_2 , donde los sitios de percolación viven en las caras de cada red (Cardy, 2010). Cuando las probabilidades asociadas a cada subred son iguales (p_1 y p_2), estamos en el caso particular del modelo de loops CPL. Cuando ambas son diferentes los loops siguen teniendo una fase extendida y otra localizada, sin embargo, la clase de universalidad de la transición no es necesariamente la misma. De hecho, cálculos preliminares parecen indicar que pertenecen a la clase de universalidad de percolación en tres dimensiones. El modelo de loops CPL en la red L fue caracterizado por Serna (2010) y los valores críticos obtenidos ahí son $\nu = 0.997(2)$, $\eta = -0.06(2)$ y $p_c = 0.308070(2)$.

3.5.2. Comportamiento crítico para $n = 2$

El modelo de loops en $n = 2$ sirve como comprobación de la validez de la discretización (1.47). Aquí, esperamos que haya una transición de fase cuyo comportamiento crítico esté en la misma clase de universalidad que los modelos $O(3)$ en tres dimensiones. Cálculos previos caracterizaron de forma precisa esta clase, como por ejemplo el realizado por Campostrini *et al.* (2002). Para ambas redes L y K encontramos resultados similares, donde los sistemas estudiados tienen tamaños $32 \leq L \leq 100$.

La existencia de una transición de fase es evidente dado el comportamiento de $n_w(p, L)$, que se muestra en la figura 3.7. Al igual que en los modelos $n = 1$, las curvas de $n_w(p, L)$ en función de p se cruzan un punto común para diferentes tamaños L . Para ilustrar esto en detalle, mostramos en el panel interior de la derecha de la figura 3.7 el punto de cruce p^* para curvas de sistemas con tamaños consecutivos L_1 y L_2 en función de la inversa de la media geométrica $L = \sqrt{L_1 L_2}$. Ajustamos estos valores a la relación $p_c + a/L^b$ (línea), obteniendo los valores $p_c = 0.38138(4)$ y $b = 3.0(5)$.

Nótese que como para estos modelos usamos tamaños mucho menores que el caso $n = 1$, resulta conveniente caracterizar los parámetros críticos de varias formas. Como una primera aproximación a determinar el exponente ν , representamos en el panel interior de la izquierda de la figura 3.7 la pendiente $dn_w(p^*)/dp$ en función de L en doble escala logarítmica. Como podemos esperar por la ecuación (3.3), los datos se ajustan bien a una línea recta. La inversa de la pendiente de esta recta da esa primera estimación de $\nu = 0.68(3)$.

Para determinar ν podemos intentar el colapso de escala usando todos los datos, como se introdujo en el modelo $n = 1$. En este caso, construimos la función de escala numéricamente permitiendo, por una parte, una dependencia no lineal de la variable de escala con la distancia al punto crítico, y por otra, incluyendo correcciones al escalado gobernadas por el primer exponente irrelevante $y_{\text{irr}} < 0$. Usamos como variable de escala

$$x = L^{1/\nu} \left[(p - p_c) + A(p - p_c)^2 \right], \quad (3.13)$$

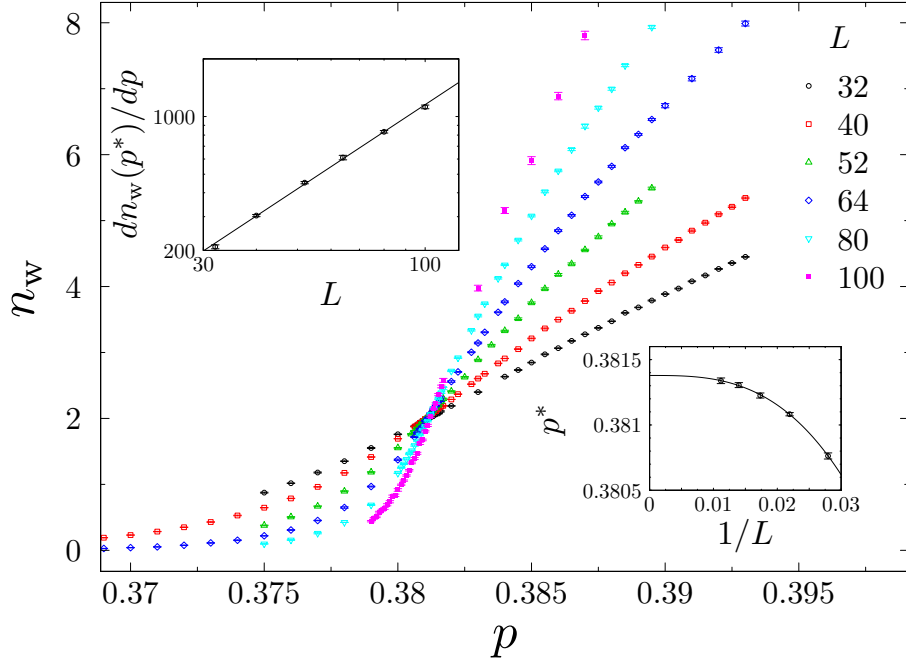


Figura 3.7: WN para $n = 2$ en la red K. Panel principal: $n_w(p, L)$ en función de p para sistemas de diferentes tamaños L . Panel izquierdo: $dn_w(p)/dp$ en los puntos de cruce p^* frente L en doble escala logarítmica. Panel derecho: p^* frente a $1/L$.

de forma que encontramos que el uso del término $(p - p_c)^2$ se justifica por el ajuste, mientras que el uso de un término superior $(p - p_c)^3$ no. Construimos, otra vez, una función de ajuste $f_{\text{splines}}(x)$ usando *B-splines cúbicos* con 16 puntos y las combinamos con las correcciones al escalado, caracterizadas por y_{irr} y un polinomio de orden m , de dos formas alternativas: bien como

$$f_1(x, L) = f_{\text{splines}}(x)[1 + P_m(x)L^{y_{\text{irr}}}] \quad (3.14)$$

o como

$$f_2(x, L) = f_{\text{splines}}(x) + P_m(x)L^{y_{\text{irr}}}. \quad (3.15)$$

Conseguimos el mejor ajuste usando la forma $f_1(x, L)$ con $m = 1$. Y este da $\nu = 0.706(8)$ e $y_{\text{irr}} = -1.0(3)$ con $\chi^2 = 300.5$ para 291 grados de libertad. Este escalado se ilustra en la figura 3.8.

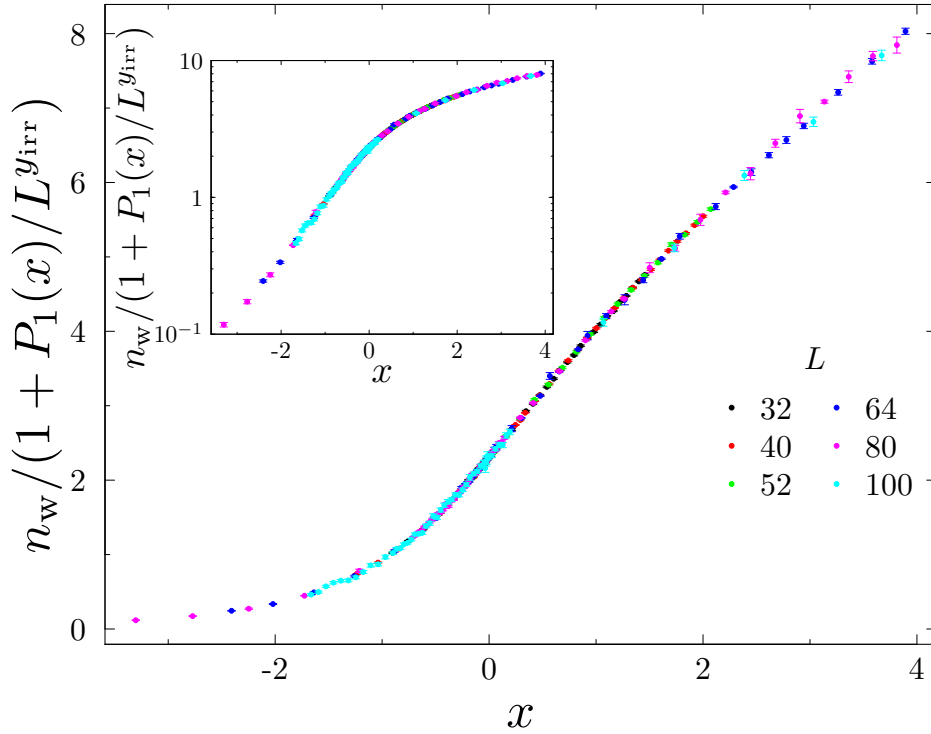


Figura 3.8: Colapso de escala del WN para $n = 2$ del observable n_w en función de x definido en (3.13), para tamaños $32 \leq L \leq 100$. En el panel interior se muestra la misma cantidad en escala semilogarítmica, con el fin de mostrar el comportamiento exponencial de la fase aislante.

Analizamos también los datos para la susceptibilidad y el parámetro de orden adaptando el tratamiento comentado para el WN en las ecuaciones (3.13) - (3.15). Teniendo en cuenta los ajustes para los tres observables, las mejores estimaciones que hemos obtenido son $\nu = 0.708(5)$ y $\gamma = 1.39(1)$.

Como una comprobación más de que nuestros resultados para $n = 2$ son compatibles con la clase de universalidad del modelo $O(3)$, intentamos hacer un colapso de escala usando la mejor estimación del exponente que hay hasta el momento (Campostrini *et al.*, 2002) para esta clase, $\nu = 0.7112$. Omitimos las correcciones de tamaño finito, dejando como único parámetro ajustable p_c . Este procedimiento produce una buena superposición de los datos para diferentes tamaños, tal y como se ilustra en la figura 3.9.

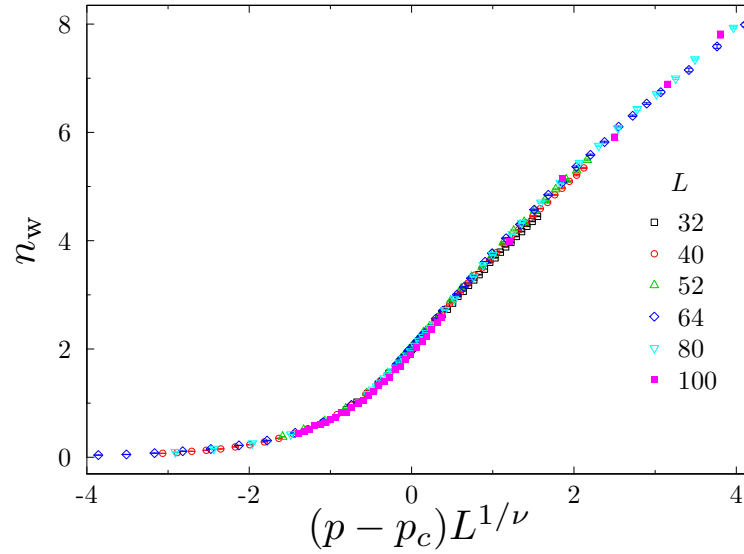


Figura 3.9: Colapso de escala en $n = 2$ de $n_w(p)$ en función de $L^{1/\nu}(p - p_c)$ usando la mejor estimación de ν para el modelo $O(3)$, sin permitir correcciones al escalado.

Como alternativa, intentamos también colapsar los datos para la susceptibilidad usando la mejor estimación del exponente disponible para el modelo $O(3)$. El resultado se puede ver en la figura 3.10, donde representamos $\chi L^{-\gamma/\nu}/(1 + AL^{y_{\text{irr}}})$ como función de $L^{1/\nu}(p - p_c)$, fijando los valores de los exponentes (Campostrini *et al.*, 2002) $\nu = 0.7112$, $\gamma = 1.3960$ e $y_{\text{irr}} = -0.8$. Quedan así libre sólo los valores de p_c y A . Una vez más podemos ver que se obtiene una buena superposición de los datos para diferentes tamaños.

Repetimos los mismos procedimientos para los datos en la red L con resultados similares. Del análisis de, por ejemplo, el n_w y el parámetro de orden \mathcal{M} obtenemos los valores de los exponentes críticos $\nu = 0.722(10)$ y $\eta = 0.04(8)$. El colapso de escala de estos dos observables se muestra en la figura 3.11. Estos valores también están de acuerdo con las mejores estimaciones del modelo $O(3)$.

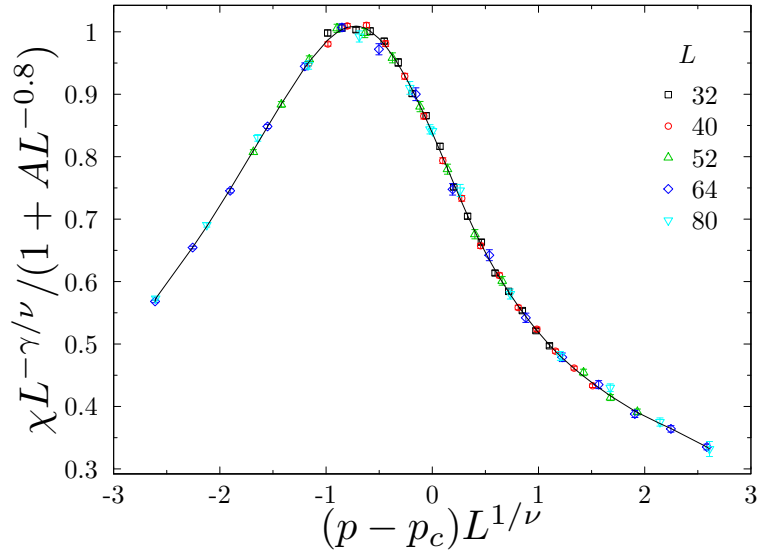


Figura 3.10: Colapso de escala para la susceptibilidad χ en función de $(p - p_c)L^{1/\nu}$, para $n = 2$ en la red K, usando las mejores estimaciones de los exponentes del modelo $O(3)$.

3.5.3. Identificación del carácter de la transición

La transición de fase en los modelos de loops puede ser de primer o segundo orden, dependiendo del valor de n , y en esta sección indicamos el procedimiento que hemos seguido para determinarlo con los datos Monte Carlo. Tal y como discutimos al comienzo del capítulo, mientras que esperamos que la transición sea continua para $n = 1$ o $n = 2$ por sus equivalencias a la clase C de las transiciones de Anderson y al modelo $O(3)$, respectivamente, una transición de primer orden sería natural para n mayores dado que la teoría Landau admite un término cúbico si $n \neq 2$. Sin embargo, los resultados que hemos obtenido son consistentes con una transición continua para $n = 3$ y de primer orden para $n \geq 4$.

Para $n \geq 5$ en la red L no hay fase extendida y exhibe una transición de primer orden en $p = 1/2$ entre dos fases de loops cortos con simetrías relacionadas (véase la figura 3.1). Para demostrarlo, representamos $n_+ = N_p / (N_p + N_{1-p})$ (esencialmente la energía por sitio) en función de p , cerca del valor $p = 1/2$, mostrado en el panel

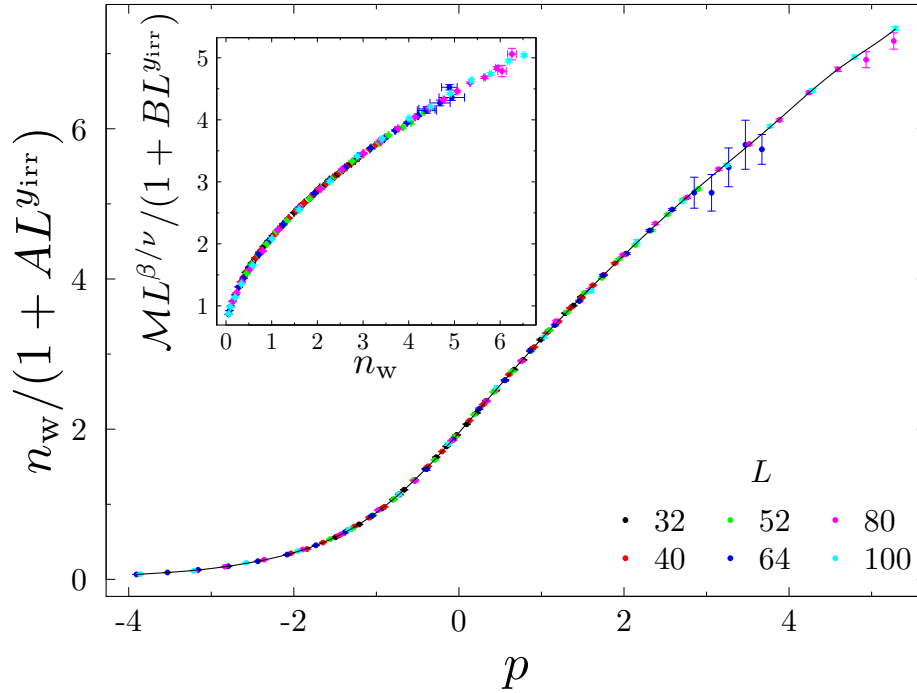


Figura 3.11: Red L, $n = 2$. Panel principal: Colapso de escala para el número de curvas extendidas, mediante correcciones de tamaño finito $n_w/(1 + AL^{y_{irr}})$, donde $y_{irr} \approx 0.6$. Panel interior: Colapso de escala para el parámetro de orden \mathcal{M} , también con correcciones de tamaño finito similares al n_w .

interior de la figura 3.12 . Se puede observar en esta energía el comportamiento típico de una transición de primer orden.

Por otra parte, el carácter de la transición para los modelos $n \geq 5$ en la red K es bastante claro. En todas estas transiciones estudiadas $5 \leq n \leq 10$ se observa el fenómeno de histéresis y los observables muestran una discontinuidad en su comportamiento evidente. Como muestra se ilustra en la figura 3.12 el comportamiento del número de curvas extendidas entre el tamaño L para el modelo $n = 5$. Cerca del punto $p_c \approx 0.514$ se produce un salto de una fase donde el n_w es nulo a otra donde es proporcional al tamaño L , signo de que se trata de la fase extendida.

En casos marginales, distinguir el orden de una transición puede ser delicado debido a los efectos de tamaño finito. Dados los resultados presentados en las sec-

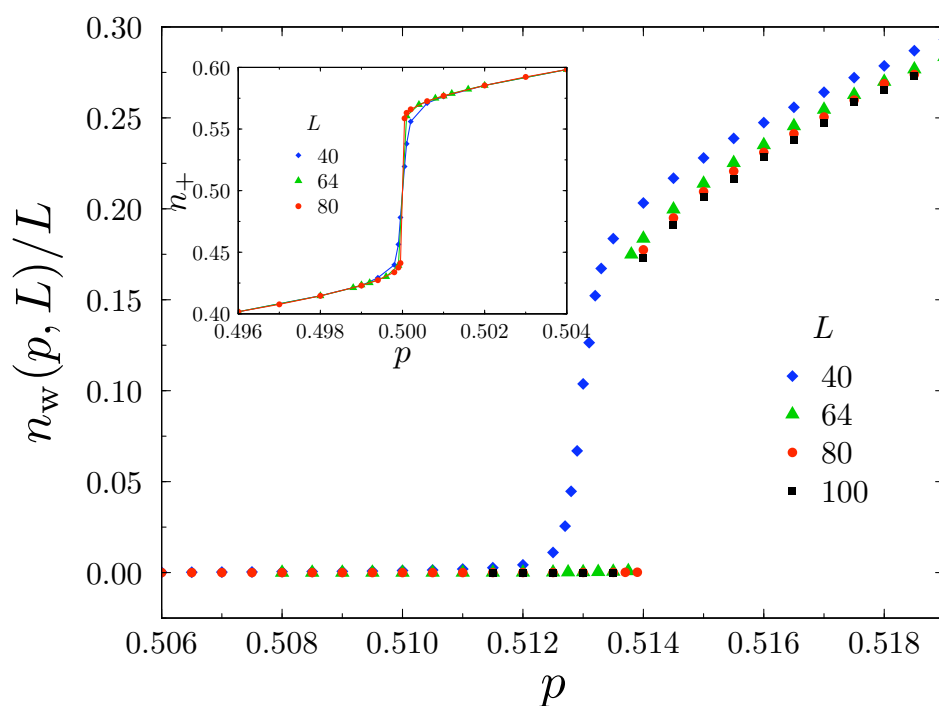


Figura 3.12: Panel principal: se representa $n_w(p, L)/L$ frente a p , se observa que el WN es proporcional a L en la fase extendida. Panel interior: se muestra n_+ en función de p , en la red L , que exhibe un comportamiento típico de una transición de primer orden .

ciones anteriores (3.5.1 y 3.5.2), tanto para $n = 1$ como para $n = 2$ asumimos que las transiciones en ambas redes son continuas. Por otra parte, la transición para $n = 4$ en la red K es de primer orden. Este carácter se puede observar en la distribución de n_+ , como mostramos en la figura 3.13, para tres valores diferentes de p muy cercanos a la transición. La forma bimodal, característica de las transiciones de primer orden, es bastante clara.

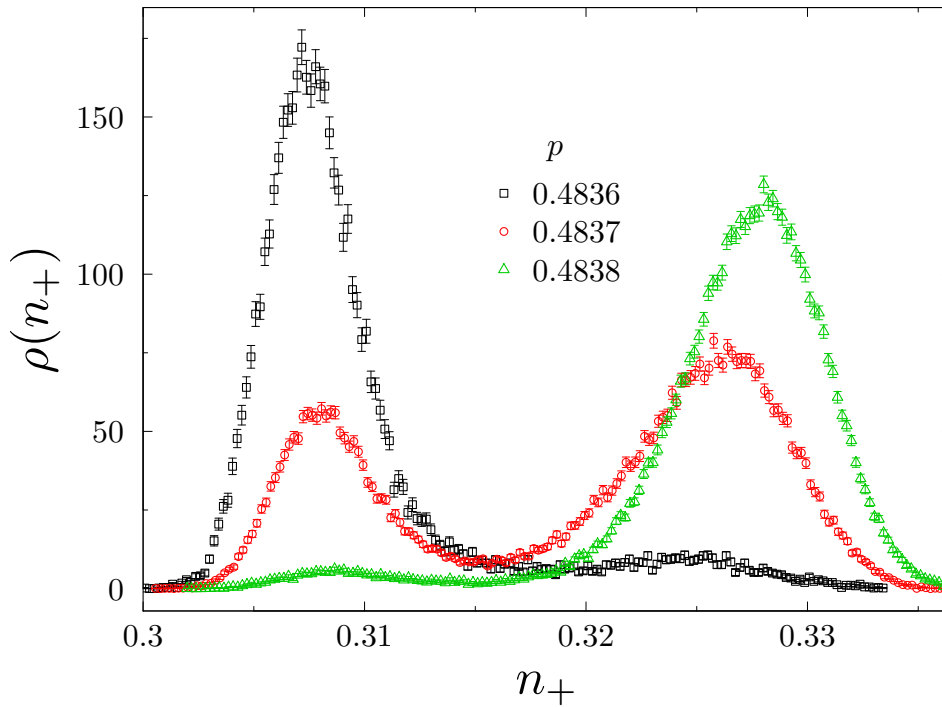


Figura 3.13: Evidencias de una transición de primer orden en $n = 4$ en la red K para $L = 80$. Se muestra la distribución de probabilidades de la energía donde se observa una forma bimodal característico de las transiciones de primer orden.

De forma más general, tal y como indicamos en el capítulo 1, una forma estándar de diagnosticar el orden de la transición es mediante el uso del parámetro de Binder, definido como

$$V_L = 1 - \frac{1}{3} \frac{\langle n_+^4 \rangle}{\langle n_+^2 \rangle^2}. \quad (3.16)$$

En un sistema con una transición continua esperamos que este parámetro tenga

como límite $\lim_{L \rightarrow \infty} V_L = 2/3$ en cualquier parte del diagrama de fases, puntos críticos incluidos, sin embargo en el punto donde hay una transición de primer orden tiende a un valor no trivial $\lim_{L \rightarrow \infty} V_L < 2/3$ (Challa *et al.*, 1986) relacionado con el calor específico.

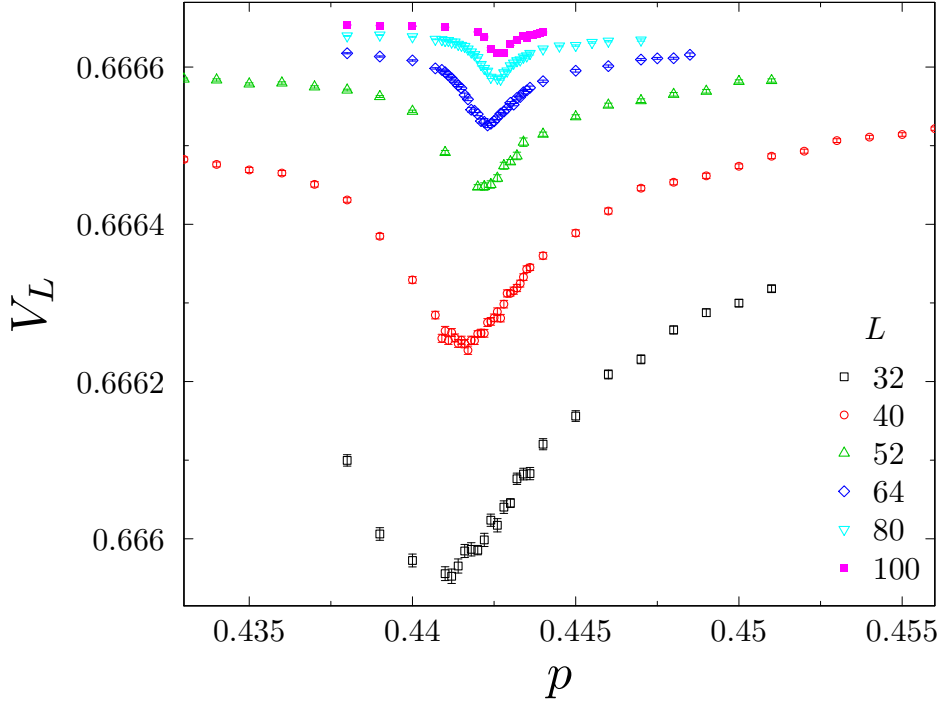


Figura 3.14: Parámetro de Binder V_L en $n = 3$: comportamiento de V_L en función de p para varios tamaños L .

Ilustramos el comportamiento del cumulante de Binder para $n = 3$ en la red K (anticipamos que se trata de un caso marginal) en la figura 3.14. V_L como función de p tiende un mínimo cerca del punto crítico y se acerca a $2/3$ lejos de la transición en ambos lados. El mínimo se hace cada vez menos profundo al aumentar L y el punto clave es su valor límite. Para verlo en detalle, mostramos en la figura 3.15 la diferencia $2/3 - [V_L]_{\min} \equiv [\mathcal{V}]_{\max}$ en función de L en una escala doble logarítmica. Los datos para $n = 4$ en la red K indican un valor límite finito para $[\mathcal{V}]_{\max}$ para tamaños grandes, y por tanto una transición de primer orden en este caso. Para el resto de casos ($n = 2$ y $n = 3$ en ambas redes y $n = 4$ en la red L), los datos

ajustan a líneas rectas con pendiente finita, como podemos esperar de una transición continua. Si cualquiera de estas transiciones es de hecho primer orden, la longitud de correlación en la transición debe ser mayor a 100 unidades de la red (véase la sección 3.5.5 para una discusión más detallada de la transición con $n = 4$ en la red L).

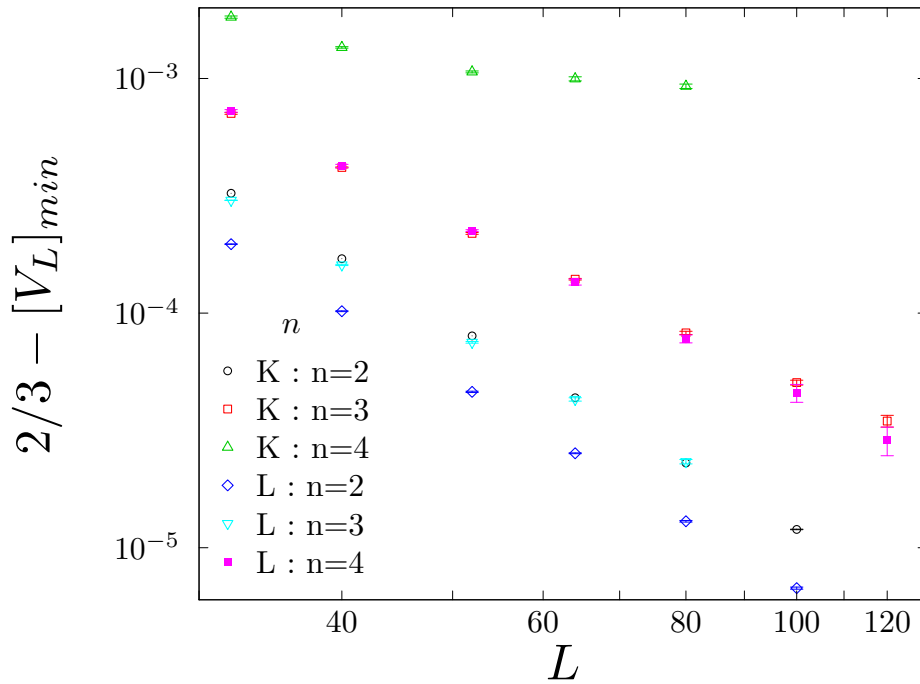


Figura 3.15: Distinción entre transiciones de primer orden y continuas: representación en escala doble logarítmica de la dependencia con el tamaño del sistema de la redefinición $[\mathcal{V}]_{\max} = 2/3 - [V_L]_{\min}$ del Distinguishing continuous from first order transitions: log-log plot of the dependence on system size of the deviation $2/3 - [V_L]_{\min}$ del valor mínimo del parámetro de Binder de su valor teórico fuera de la transición. Los datos muestran evidencias de transiciones continuas en $n = 2$ y $n = 3$, y de primer orden en la red K para $n = 4$.

Una medida de la discontinuidad de la transición de primer orden viene dada por $\Delta V(n) = \lim_{L \rightarrow \infty} [\mathcal{V}]_{\max}(L)$, relacionado a su vez con el calor latente en la transición de primer orden. Para el modelo de loops con $n \geq 4$ en la red K podemos

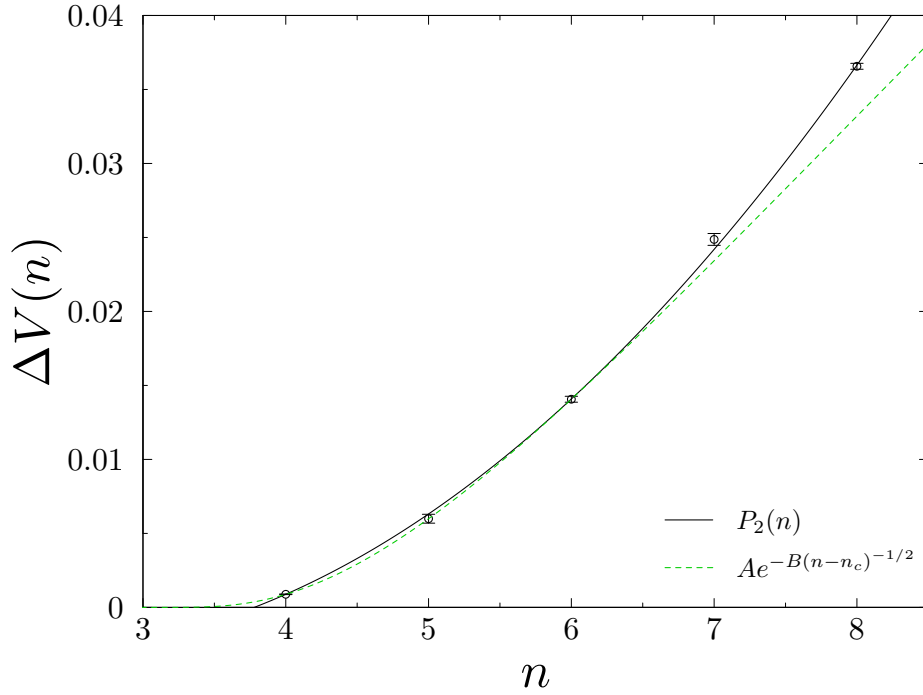


Figura 3.16: Discontinuidad $\Delta V(n)$ en transiciones de primer orden en función de n . Se muestran ajustes a un polinomio de segundo orden $P_2(n)$ y a la forma funcional $Ae^{-B(n-n_c)^{-1/2}}$ motivada por el modelo sigma \mathbb{CP}^{n-1} (Nahum *et al.*, 2013c). Los valores ajustados por debajo de los cuales la transición es continua son $n_c = 3.78(4)$ y $n_c = 3.0(2)$, respectivamente.

obtener el límite $\Delta V(n)$ con alta precisión. Como se muestra en la figura 3.16, la dependencia de $\Delta V(n)$ con n puede ser ajustada a diferentes formas funcionales con un valor crítico n_c que separa las transiciones de primer y segundo orden y que siempre es mayor que 3. Así, la transición en $n = 3$ es aparentemente continua, pero n_c es claramente menor que cuatro y cercano a ese valor.

Por otra parte, un método alternativo para caracterizar la naturaleza de la transición es construir funciones de escala que no necesiten ningún parámetro libre. Consideremos para los modelos de loops la probabilidad $P_1(p, L)$ de que una configuración tenga exactamente una curva que abarque el sistema, como función del número promedio $\langle n_w(p, L) \rangle$ de estas curvas. En una transición continua se espera que esta función sea independiente del tamaño del sistema, si las correcciones de

tamaño finito al escalado no son importantes. En contraste, el número de curvas que abarquen el sistema salta en una transición de primer orden, desde cero en una fase a un valor proporcional a L en la otra. En este caso $P_1(p, L)$ se hace cero conforme aumenta L para todo $\langle n_w(p, L) \rangle$. En la figura 3.17 presentamos esta función de escala para $n = 2$ (panel interior superior), $n = 3$ (panel principal) y $n = 4$ (panel interior inferior) para la red K. Los datos para tamaños diferentes residen en una única curva para $n = 2$, mientras que en $n = 4$ claramente no. En el caso de los datos de $n = 3$, parecen caer cerca de una única curva, aunque hay mayores desviaciones que en $n = 2$. Dado que estas desviaciones pueden ser atribuidas a correcciones de tamaño finito al escalado, los resultados de este análisis son consistentes con los del comportamiento del parámetro de Binder.

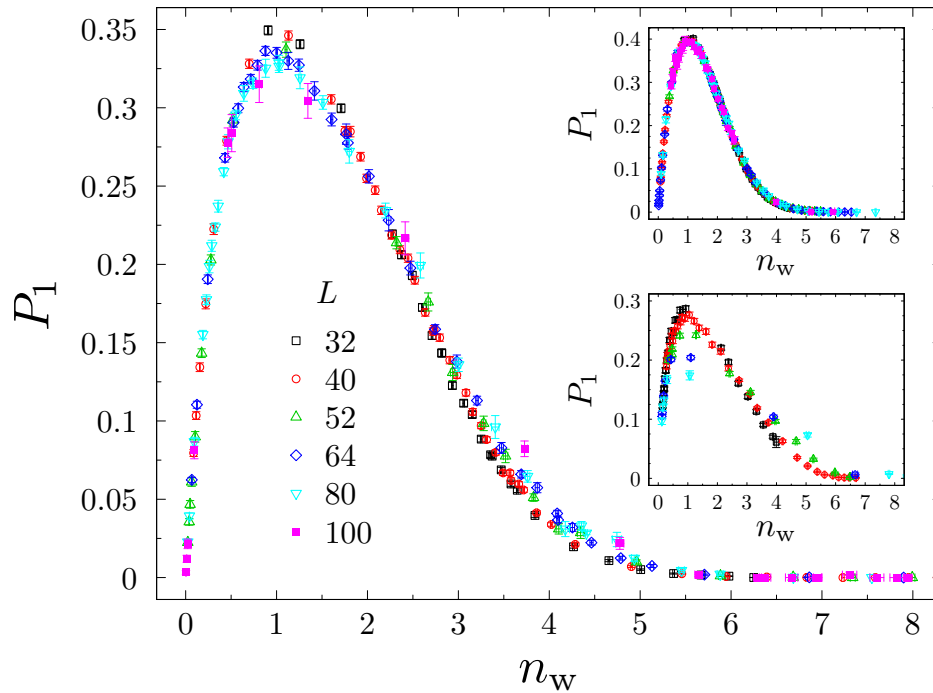


Figura 3.17: Colapso de escala sin parámetros ajustables. Se muestra la probabilidad $P_1(p, L)$ de que una configuración tenga exactamente $n_w = 1$ en función del promedio de $n_w(p, L)$. El panel principal es $n = 3$, el panel interior superior $n = 2$ y el inferior $n = 4$.

3.5.4. Comportamiento crítico para $n = 3$

Habiendo ya establecido que la transición del modelo de loops con $n = 3$ en la red K tiene una longitud de correlación que aparentemente diverge y ciertamente es más grande que el mayor de los tamaños accesibles, queda caracterizar el comportamiento crítico. Para ello seguimos los métodos descritos en las secciones 3.5.1 y 3.5.2 para $n = 1$ y 2, excepto que en el caso presente no hay disponibles valores independientes de los exponentes críticos.

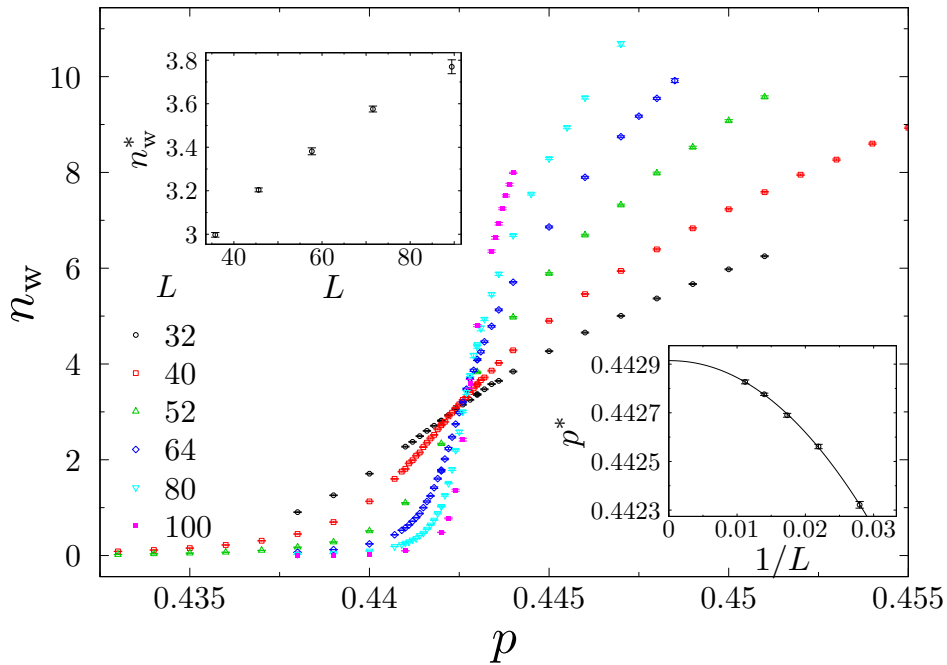


Figura 3.18: WN para $n = 3$ en la red K. Panel principal: representación de $n_w(p)$ en función de p para diferentes tamaños L . Panel interior de la izquierda: dependencia de n_w en los cruces p^* con el tamaño L . Panel interior de la derecha: p^* frente $1/L$.

Los datos sin escalar para $n_w(p, L)$ en función de p para diferentes tamaños se muestran en la figura 3.18 (panel principal). El punto de la transición es visible en los cruces de las curvas para los diferentes tamaños. En el panel interior inferior de la figura 3.18 mostramos la dependencia de la probabilidad p^* en la cual los

datos para dos tamaños sucesivos se cruzan, en función de la inversa de la media geométrica L de estos tamaños. La curva continua es un ajuste a la forma $p_c + a/L^b$, con $p_c = 0.44291(2)$ y $b = 2.1(3)$. En el panel interior superior representamos la dependencia en L del valor n_w^* en el cual dos tamaños sucesivos se cruzan. Esto muestra que los tamaños de efecto finito en este observable no son insignificantes. En cualquier caso, hemos llevado un colapso de escala de todos los datos, usando una

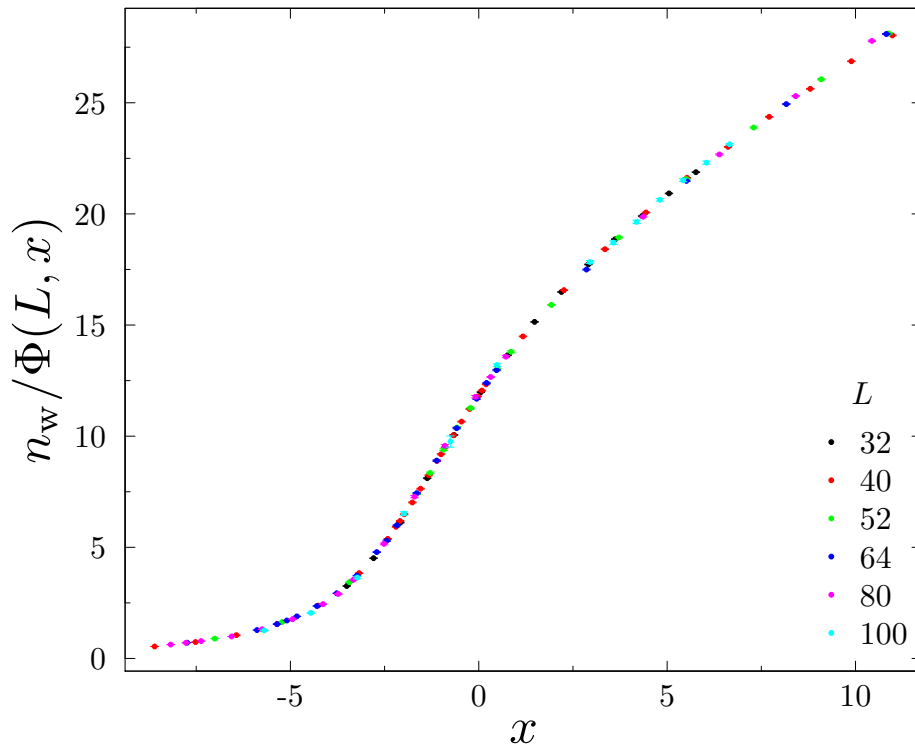


Figura 3.19: Colapso de escala para el WN en $n = 3$ para la red K usando la variable de escala x definida en Eq. (3.13).

variable de escala no lineal e incluyendo correcciones de escala como en la sección 3.5.2. En la figura 3.19 se puede observar este colapso. En esta ocasión, observamos que se justifican correcciones del tipo

$$f(x) = f_{\text{splines}}(x)[1 + P_1(x)L^{y_{\text{irr}}} + Q_1(x)L^{2y_{\text{irr}}}] \quad , \quad (3.17)$$

donde $P_1(x)$ y $Q_1(x)$ son polinomios de grado 1. Esto proporciona un valor de $\chi^2 = 473$ frente a 85 grados de libertad y el ajuste se representa en 3.19. Descartando

los tamaños más pequeños el ajuste mejora sensiblemente. Este valor alto del χ^2 respecto al número de grados de libertad indican que los efectos de tamaño finito no están totalmente bajo control. Las mejores estimaciones que hemos obtenido para los parámetros son $\nu = 0.51(2)$ y $p_c = 0.44292(2)$, donde los errores indicados son sólo estadísticos, dado que los sistemáticos son difíciles de estimar.

A diferencia de esto, hemos encontrado que el análisis del comportamiento de escala de la susceptibilidad χ es más directa. Su dependencia en p y el tamaño del sistema se muestra en la figura 3.20. Una de las características de esta es que tiene un máximo cerca del punto crítico que crece con L . Representando $\chi L^{-\gamma/\nu}$ en función de $x = L^{1/\nu}[(p - p_c) + A(p - p_c)^2]$, los datos exhiben un buen colapso de escala, tal y como se ilustra en el panel interior de la figura 3.20, donde el ajuste tiene $\chi^2 = 53$ para 60 grados de libertad. Los valores de los exponentes que se obtienen por este procedimiento son $\nu = 0.542(16)$ y $\gamma/\nu = 1.78(2)$, y por tanto $\gamma = 0.97(2)$.

Los datos para la capacidad calorífica C se representan en la figura 3.21. Ésta es fuertemente divergente en la transición pero los valores para los tamaños menores están dominados por un fondo suave. Para poder realizar el colapso de escala sustraemos una contribución C_{reg} independiente de L que varía suavemente con p (polinomio de grado 3), y representamos $(C - C_{\text{reg}})L^{-\alpha/\nu}$ en función de $L^{1/\nu}[(p - p_c) + A(p - p_c)^2]$ (panel interior de la figura 3.21). Mediante este tratamiento obtenemos $\chi^2 = 73$ para 95 grados de libertad. Además, asumiendo la relación de *hyperscaling* d -dimensional $\alpha = 2 - d\nu$ encontramos que $\nu = 0.526(15)$.

Combinando los resultados de nuestro análisis de los datos en la red K para χ , C , además del parámetro de orden y usando métodos *bootstrap* para determinar errores, nuestras mejores estimaciones para los dos exponentes críticos independientes son $\nu = 0.536(13)$ y $\eta = 0.23(2)$. Las relaciones de escala $\gamma = (2 - \eta)\nu$ y $\beta = \nu(1 + \eta)/2$ implican los valores $\gamma = 0.97(2)$ y $\beta = 0.33(1)$.

Un análisis similar para la red L es complicado, puesto que en este caso los efectos de tamaño finito parecen estar más acentuados. En la figura 3.22 se representan los datos del n_w frente p y se puede observar como los cruces se comportan de forma

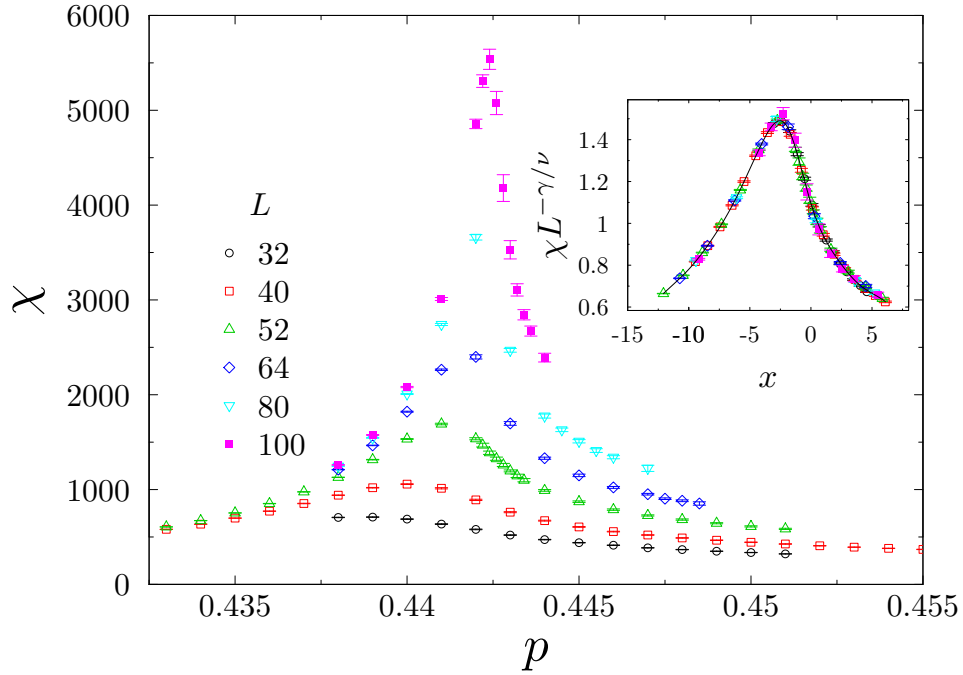


Figura 3.20: Susceptibilidad χ en $n = 3$ para la red K. Panel interior: colapso de escala del panel principal, usando la variable de escala x definida en Eq. (3.13)

similar a los de la red K. Por este motivo, es difícil conseguir un buen colapso de escala para este observable. Además, la estimación del exponente ν mediante las derivadas en el punto crítico puede contener errores sistemáticos. En este caso particular esta estimación proporciona el valor $\nu = 0.53(2)$, donde la barra de error es la estadística. En el panel interior, se ilustra el colapso de escala para el parámetro de orden O_w , usando como variable de escala n_w . Éste colapso se corresponde con valores de $\beta/\nu = 0.635(20)$ o equivalentemente $\eta = 0.27(4)$.

También podemos extraer estimaciones de los exponentes críticos de la susceptibilidad, que se muestra en el panel principal de la figura 3.23. El máximo de χ proporciona la estimación del exponente $\gamma/\nu = 1.79(1)$ y la dimensión anómala asociada es $\eta = 0.21(1)$. El hecho de que no coincida con la otra estimación dentro de las barras de error lo asociamos a errores sistemáticos debido a efectos de tamaño finito asociados a exponente irrelevantes. En el panel interior de la figura 3.23 se

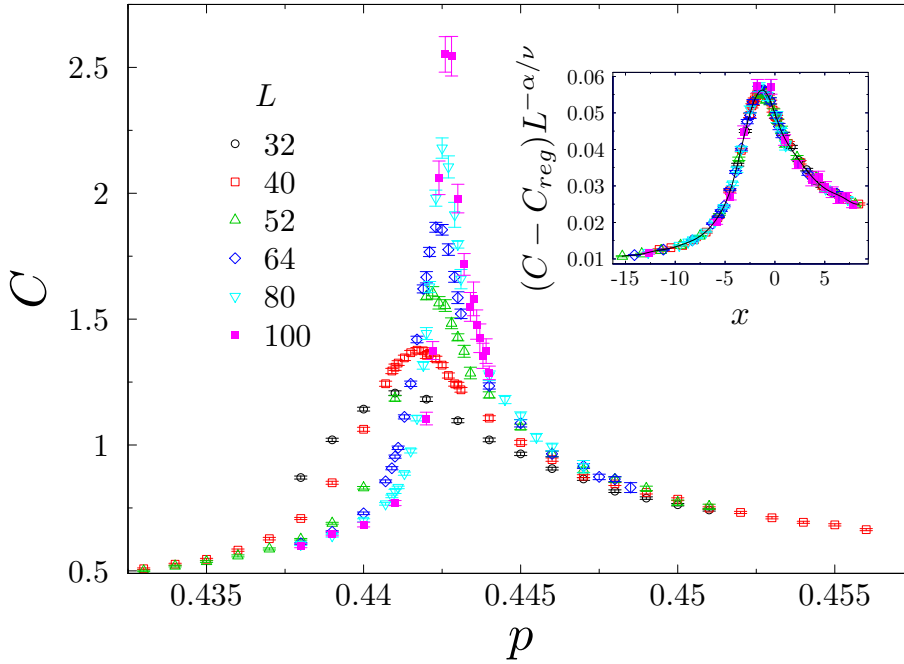


Figura 3.21: Capacidad calorífica en función de p en $n = 3$ para la red K. Panel interior: colapso de escala de la contribución divergente de la capacidad calorífica.

muestra el calor específico cuyo máximo proporciona una estimación del exponente $\alpha/\nu = 0.26(2)$ y por la relación de *hyperscaling* (1.13), $\nu = 0.61(1)$. Sin embargo, vemos que los valores del máximo son sensiblemente menores que los del caso de la red K, por lo que es posible que en este caso el fondo suave pueda estar introduciendo un error sistemático grande. Así, un ajuste que permita una constante de la forma $[C]_{\max} = a + bL^c$, proporciona una estimación del exponente $\nu = 0.56(4)$, valor compatible con las derivadas del WN y la red K.

3.5.5. Red L en $n = 4$

El caso $n = 4$ en la red L requiere una discusión específica. En el diagrama de fases para esta red (véase la figura 3.1) la línea $p = 1/2$ está dentro de la fase extendida para n pequeño y es una línea de transiciones de primer orden para n

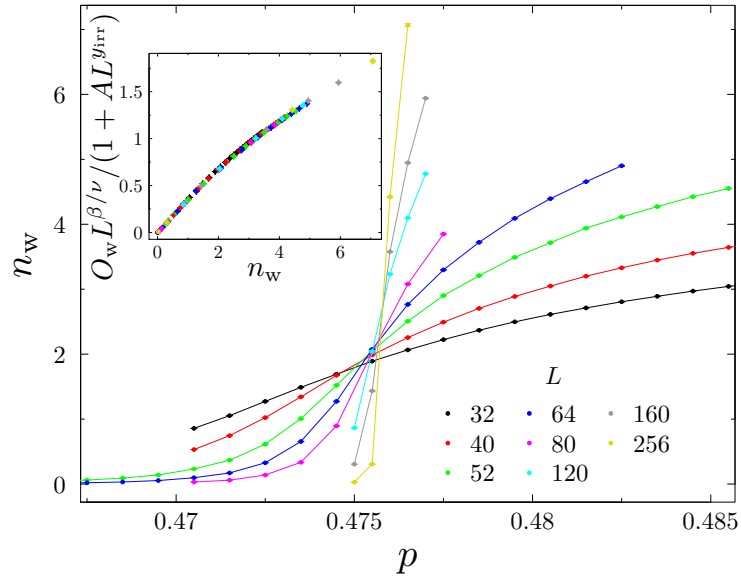


Figura 3.22: Panel principal: número de curvas extendidas frente a p para la red L. Panel interior: colapso de escala del parámetro de orden O_w para la red L, representado frente a n_w y usando correcciones de tamaño finito.

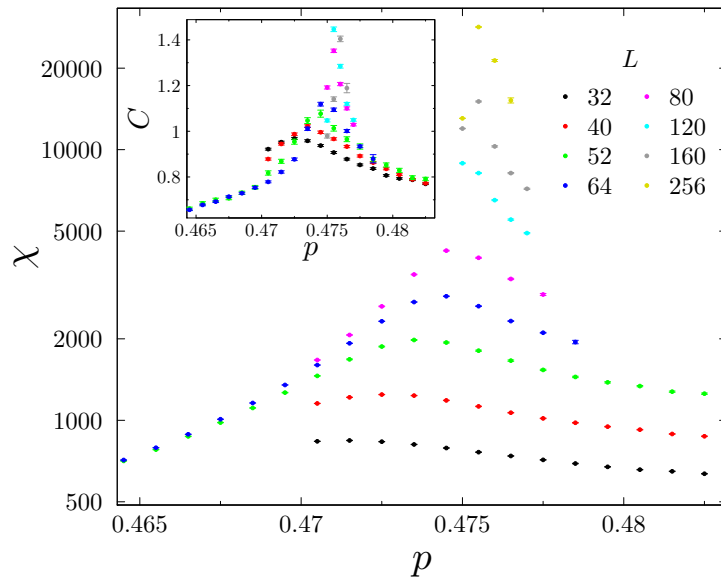


Figura 3.23: Susceptibilidad (panel principal) y calor específico (panel interior) en la red L frente a p .

grande. El punto $p = 1/2, n = n^*$ en el cual comportamiento cambia, se espera que sea un punto crítico de deconfinamiento. A pesar de que la localización precisa de este punto con las simulaciones es difícil, las siguientes evidencias parecen indicar que $n^* > 4$. En $n = 4$, en función de p encontramos dos transiciones distintas, en p_c y $1 - p_c$, con $p_c = 0.4994(3)$. Es más, el comportamiento en $p = 1/2$ coincide con el esperado en la fase extendida: $n_w(p = 1/2, L)$ es proporcional a L para nuestro sistemas con mayor tamaño, véase el panel interior de la figura 3.24. A pesar de que esperamos que, por universalidad y nuestros resultados para la red K, la transición en la red L para $n = 4$ sea primer orden, la proximidad de dos transiciones en p_c y $1 - p_c$ y del punto crítico en n^* hace que sea natural que la longitud de correlación en la transición deba ser muy grande.

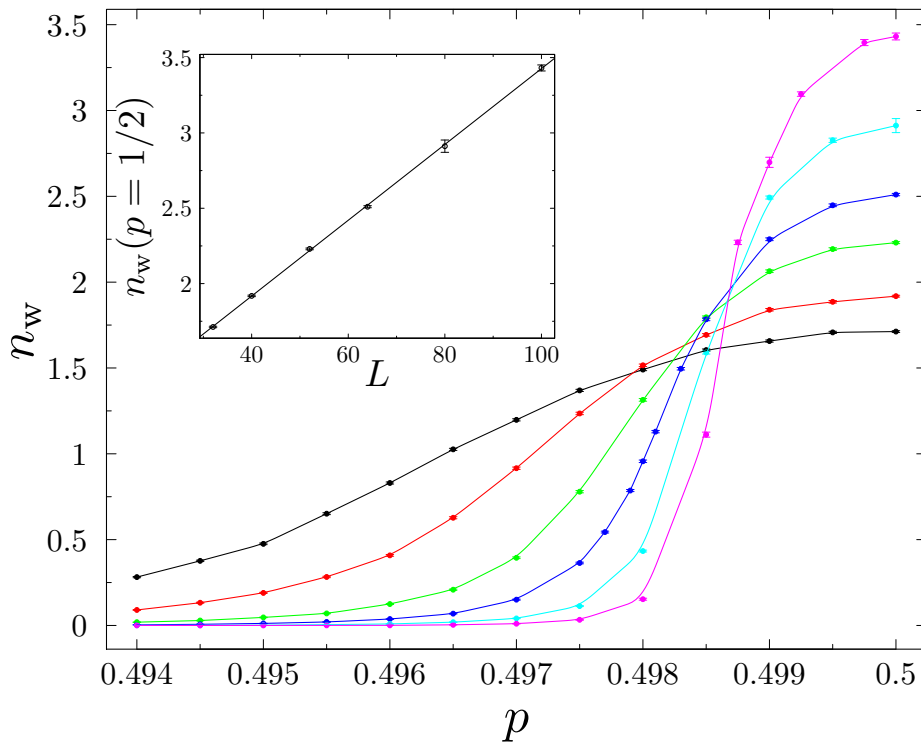


Figura 3.24: Número de curvas extendidas n_w frente a p en la red L (panel principal) y la misma cantidad en $p = 1/2$ frente a L (panel interior)

3.5.6. Dimensión fractal

Resumimos el cálculo de la dimensión fractal en esta sección para todos los modelos. Para caracterizarla, medimos la distancia de punta a punta definida como el promedio del cuadrado de la distancia euclídea entre dos puntos, $R^2(l)$, de un loop. Esta cantidad la representamos frente a la longitud l que recorre el loop entre esos dos puntos, véase la figura 3.25. Recordamos que la dimensión fractal viene definida como una relación entre las dos escalas del tipo

$$R^2(l) \propto l^{2/d_f}. \quad (3.18)$$

En la fase extendida los loops son brownianos y $R^2(l) \propto l$, por lo que el exponente $d_f = 2$, mientras que en el punto crítico tiene un valor no trivial. Este valor de la dimensión fractal proporciona una medida equivalente de la dimensión anómala de la correlación η , mediante la relación (Saleur y Duplantier, 1987; Kondev y Henley, 1995),

$$d_f = \frac{5 - \eta}{2}. \quad (3.19)$$

Presentamos aquí las medidas de la dimensión fractal de los loops en el punto crítico para $n = 2$ y $n = 3$ en ambas redes. Ajustes a líneas rectas en doble escala logarítmica proporciona los valores de la dimensión fractal que detallamos a continuación. Para $n = 2$, este procedimiento da los valores $d_f = 2.475(20)$ y $2.47(5)$ en las redes K y L respectivamente, lo que implica dimensiones anómalas de $\eta = 0.05(4)$ y $\eta = 0.06(10)$. Esto es consistente con el resultado de $\eta = 0.0375(5)$ proveniente de anteriores de estudios Monte Carlo (Campostrini *et al.*, 2002) y con los valores obtenido en el análisis de la sección 3.5.2. Para $n = 3$ se obtiene $d_f = 2.40(3)$ y $2.36(6)$ en la redes K y L respectivamente, lo que implica valores de $\eta = 0.20(6)$ y $0.28(12)$, que son consistentes con los obtenidos mediante *hyperscaling* en la sección 3.5.4 ($\eta = 0.22(2)$ y $0.21(4)$, respectivamente).

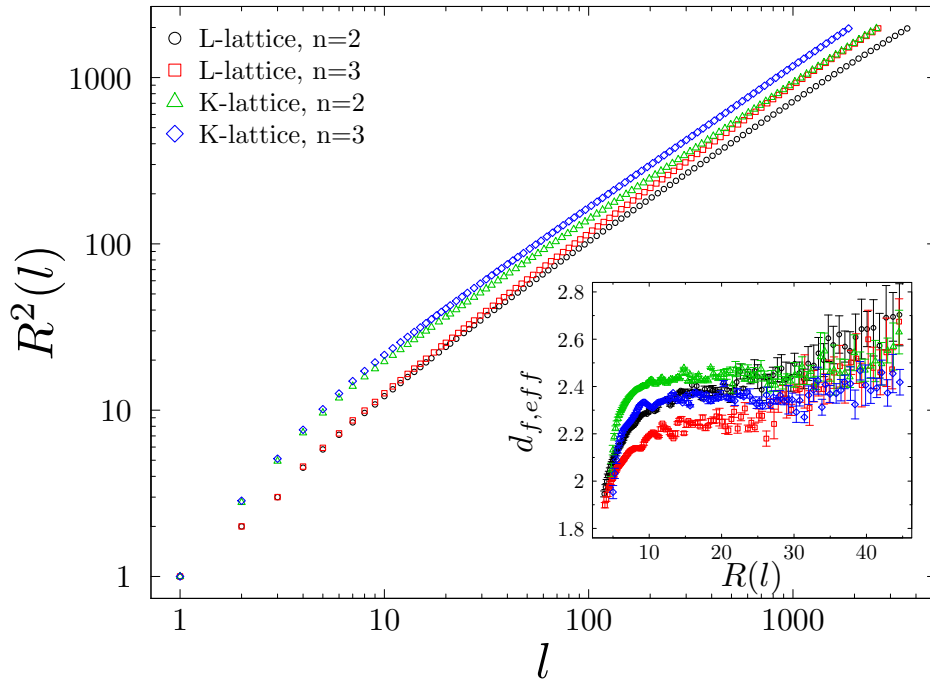


Figura 3.25: Distancia de punta a punta. Panel principal: representación de la distancia de punta a punta frente a la longitud del loop para los modelos $n = 2$ y $n = 3$ en las redes L y K tridimensionales. Panel interior inferior: representación del dimensión fractal efectiva, definida como la inversa de la derivada de $\log(R^2(l))/2$, frente a la distancia $R(l) \equiv \sqrt{R^2(l)}$.

3.6. Fase extendida

En esta sección caracterizamos la fase extendida de los modelos de loops. Recientemente, Goldschmidt *et al.* (2011); Grosskinsky *et al.* (2012) con el soporte de simulaciones propusieron la conjetura de que la distribución de longitudes que se aplica a loops extendidos en sistemas tridimensionales es la de Poisson-Dirichlet (PD). Aquí presentamos resultados que apoyan estas conjeturas.

3.6.1. Consideraciones teóricas

Introducimos primero la distribución de Poisson-Dirichlet. Se puede definir (Kingman, 1975) como el caso límite de una distribución de Dirichlet para M variables

cuando M diverge. Por su parte, la distribución de Dirichlet es una distribución de M variables $y_i \geq 0$ ($i = 1, \dots, M$) que satisfacen la ligadura $\sum_{i=1}^M y_i = 1$, de la forma

$$P(y_1, \dots, y_n; \alpha) = \frac{\Gamma(M\alpha)}{[\Gamma(\alpha)]^M} (y_1, y_2 \dots y_M)^{\alpha-1}, \quad (3.20)$$

donde el parámetro $\alpha > 0$. La distribución PD es el límite $M \rightarrow \infty$ y $\alpha \rightarrow 0$ de la distribución de Dirichlet con el parámetro $\theta = M\alpha$ fijo. En este límite se pueden obtener los diferentes momentos desde la ecuación (3.20),

$$\left\langle \sum'_{i_1, \dots, i_q} y_{i_1}^{m_1} \dots y_{i_q}^{m_q} \right\rangle = \frac{\theta^q \Gamma(\theta) \Gamma(m_1) \dots \Gamma(m_q)}{\Gamma(\theta + m_{\text{tot}})}. \quad (3.21)$$

El cálculo de estos momentos en las fases extendidas de los modelos de loops, así como una extracción de los mismos desde las teorías de campos (Nahum *et al.*, 2013a), muestran que las longitudes ordenadas de los loops extendidos están distribuidas de acuerdo a PD, donde el parámetro de PD identifica el valor $\theta = n$ para los loops que aquí estudiamos.

Para poner estas definiciones en el contexto de los modelos de loops, resumimos lo que se conoce sobre la estadística de las longitudes de loops en escalas más cortas. Consideramos la distribución de probabilidad $P_{\text{link}}(l) = \mathcal{L}^{-1} l \langle \sum_i \delta(l - l_i) \rangle$ para la longitud l de un loop que pasa por un enlace elegido de forma aleatoria, donde llamamos $\mathcal{L} = 3L^3/2$ al número total de enlaces del sistema y la suma es a todos los loops con longitudes l_i . Esta cantidad está relacionada con el número de loops de longitud l de forma simple, $P_{\text{link}}(l) \propto ln(l)$. La longitud de correlación ξ del sistema fija una escala de longitudes a partir de la cual los loops son brownianos. A distancias pequeñas $l \ll \xi$ el comportamiento o bien depende del modelo concreto, si ξ es del orden del espaciado de la red, o bien es crítico, si ξ es suficientemente grande (régimen discutido en la sección 3.5.6). En el rango $\xi \ll l \ll L^2$, donde los loops no son sensibles al contorno de la muestra, el carácter browniano implica un comportamiento difusivo

$$P_{\text{link}}(l) = Cl^{-d/2} \quad (3.22)$$

con C una constante de normalización no universal. Para $L^2 \ll l \leq f\mathcal{L}$, con f la fracción de enlaces que ocupan los loops extendidos, la distribución cambia su

comportamiento al de la distribución PD, de la forma

$$P_{\text{link}}(l) = \theta \mathcal{L}^{-1} (1 - l/(f\mathcal{L}))^{\theta-1} \quad (3.23)$$

obtenido mediante la integración de todos los y_i excepto uno en la ecuación (3.20). Ambas ecuaciones (3.22) y (3.23) coinciden en el orden de magnitud en $l \sim L^2$. Nótese que para poder observar ambos regímenes es importante que las condiciones de contorno no permita la existencia de ramas sueltas, es decir, que sólo se formen loops.

3.6.2. Distribución de Probabilidades

Estudiamos la fase extendida del modelo para fugacidades enteras $1 \leq n \leq 8$ en estos modelos de loops, que se corresponden con valores $\theta = n$. Además, podemos acceder a valores del parámetro $\theta = 1/2$ usando una modificación de los modelos de loops, que discutiremos en detalle más adelante (Serna *et al.*, n.d.). La modificación consiste en permitir los cruces en los modelos de loops, generando el modelo de loops equivalente al CPLC definido en 1.2.6 en la red L tridimensional. Esto impide orientar de forma consistente los loops, y el parámetro de PD asociado es $\theta = n/2$. De este modelo de loops no orientados sólo consideramos el caso $n = 1$, que se corresponde con un parámetro $\theta = 1/2$. Para este estudio usamos sistemas con tamaño $40 \leq L \leq 100$ y promediamos a 10^5 configuraciones de loops.

Estos resultados sirven de complemento a simulaciones previas de un modelo diferente con el parámetro de PD fijo $\theta = 1$ (Grosskinsky *et al.*, 2012). Además, resulta interesante observar que hubieron previamente observaciones numéricas de la distribución PD en la literatura de los problemas de loops, pero que no fueron reconocidas en estos términos: por ejemplo, Fig. 2 (panel derecho) en Jaubert *et al.* (2011) para $\theta = 1/2$, Fig. 7 en Khemani *et al.* (2012) para $\theta = 1$ o Fig. 3 en Albuquerque *et al.* (2012) para $\theta = 2$.

Analizamos primero los resultados para $P_{\text{link}}(l)$. Una ilustración del comportamiento de esta distribución se muestra en la figura 3.26, donde se representa $\mathcal{L}P_{\text{link}}(l)$ frente l/\mathcal{L} para el tamaño $L = 40$. Los dos regímenes descritos por las ecuaciones

(3.22) y (3.23) son evidentes. En el panel interior comprobamos como la longitud en la que se produce el cambio entre el comportamiento browniano y las formas de PD escala con L^2 , mediante la comparación de dos tamaños $L = 40$ y 100 para el caso $\theta = 1$. Este fenómeno también se observa en el resto de casos. En la figura 3.27 examinamos en más detalle el régimen PD, donde se muestra un excelente acuerdo entre los datos y las predicciones teóricas usando la constante f como único parámetro ajustable. La dependencia de la distribución con el parámetro θ de PD es extraordinaria.

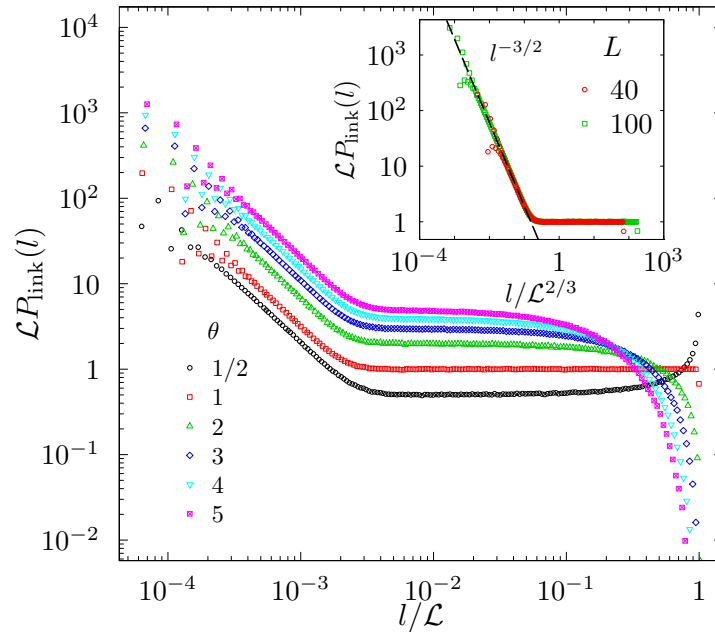


Figura 3.26: $\mathcal{L}P_{\text{link}}(l)$ frente a l/\mathcal{L} , en doble escala logarítmica para los valores θ indicados. Panel interior: comparación entre los datos para $L = 40$ y $L = 100$. La línea discontinua tiene pendiente $-3/2$ como se espera del comportamiento browniano. Surgen fluctuaciones para l pequeños en la distribución en el caso de los loops con longitudes del orden del espaciado de la red, son específicas del modelo.

Otra forma de comprobar esta relación entre la distribución de longitudes y PD, independiente de cualquier parámetro, es el cálculo de las proporciones entre

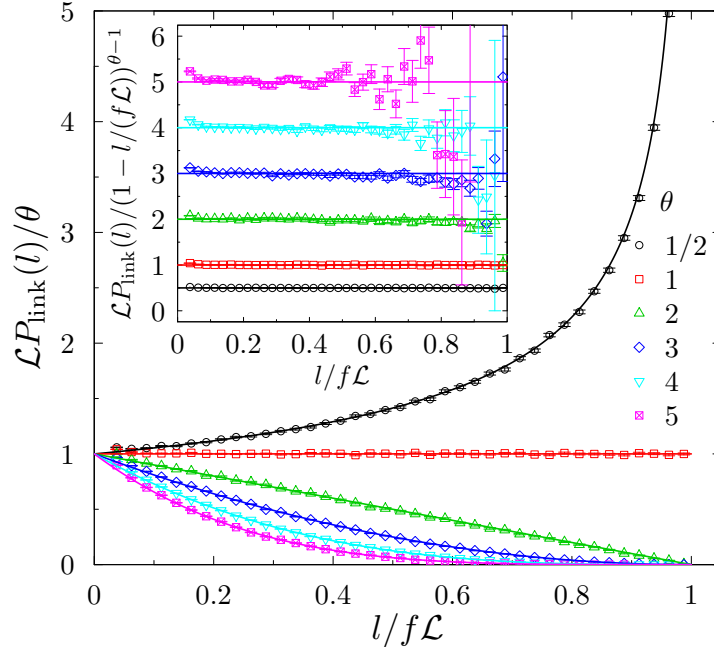


Figura 3.27: Comportamiento de la distribución en el régimen PD: $\mathcal{L}P_{\text{link}}(l)/\theta$ frente a $l/f\mathcal{L}$, donde se muestra la dependencia en el parámetro de PD θ . Las líneas continuas son las curvas correspondientes a la ecuación (3.23). Panel interior: proporción $\mathcal{L}P_{\text{link}}(l)/(1 - l/(f\mathcal{L}))$ que es cercana a su valor teórico θ , excepto para $l \approx f\mathcal{L}$, donde los errores estadísticos son grandes.

momentos de la distribución de longitudes. Definimos

$$R \equiv \frac{\langle \sum_i l_i^4 \rangle}{\langle \sum_k l_k^2 \rangle^2} \quad \text{y} \quad Q_m \equiv \frac{\langle \sum_{i \neq j} l_i^m l_j^m \rangle}{\langle \sum_k l_k^m \rangle^2}. \quad (3.24)$$

De la ecuación (3.21) esperamos que

$$R = \frac{6(\theta + 1)}{(\theta + 3)(\theta + 2)} \quad (3.25)$$

y

$$Q_m = \frac{(m - 1 + \theta)(m - 2 + \theta) \dots \theta}{(2m - 1 + \theta)(2m - 2 + \theta) \dots (m + \theta)}. \quad (3.26)$$

Estos mismos resultados se pueden obtener mediante el cálculo de estos momentos desde las teorías de campos (Nahum *et al.*, 2013b). Las simulaciones mostradas en la figura 3.28 presentan un excelente acuerdo con estas expresiones para R , Q_2 , Q_3 y Q_4 . Insistimos en el hecho de que no hay parámetros ajustables.

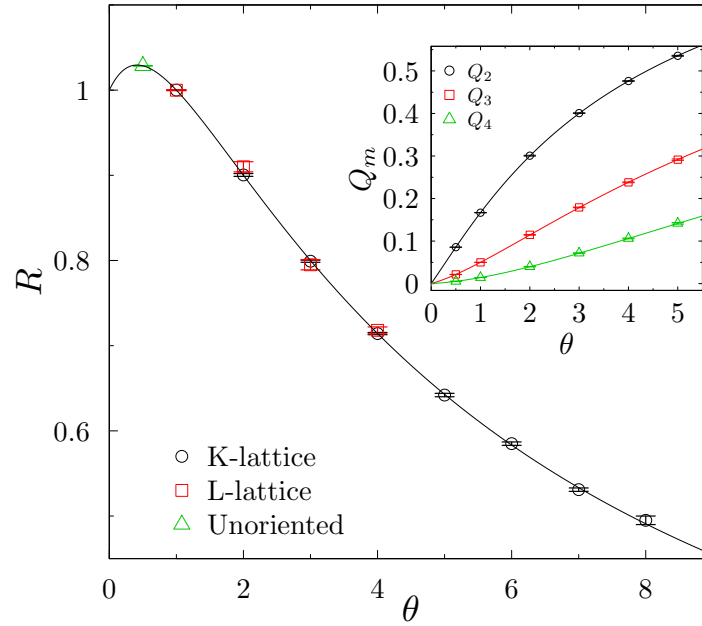


Figura 3.28: Comparación entre las medidas en las simulaciones (puntos) y el valor teórico esperado (líneas) para las proporciones entre los momentos de las longitudes de los loops. En el panel principal se representa la proporción R para la distribución de un sólo loop, y en el panel interior las proporciones para la distribución de dos loops, Q_2 , Q_3 y Q_4 . Se comprueba que hay universalidad comparando los resultados para las dos redes y el caso desorientado.

Por último, tal y como hemos visto en los momentos Q_m , cabe recordar, que la distribución de PD es en realidad una distribución multidimensional. Así, como ilustración de que los loops no siguen sólo la forma donde todas las variables excepto una han sido integradas, además de los propios momentos Q_m , presentamos la distribución para las dos longitudes más grandes en la figura 3.29. La forma de la distribución de PD es evidente,

$$P_{\text{link}}(l_1, l_2) \propto \left(1 - \frac{l_1 + l_2}{f\mathcal{L}}\right)^{\theta-1}. \quad (3.27)$$

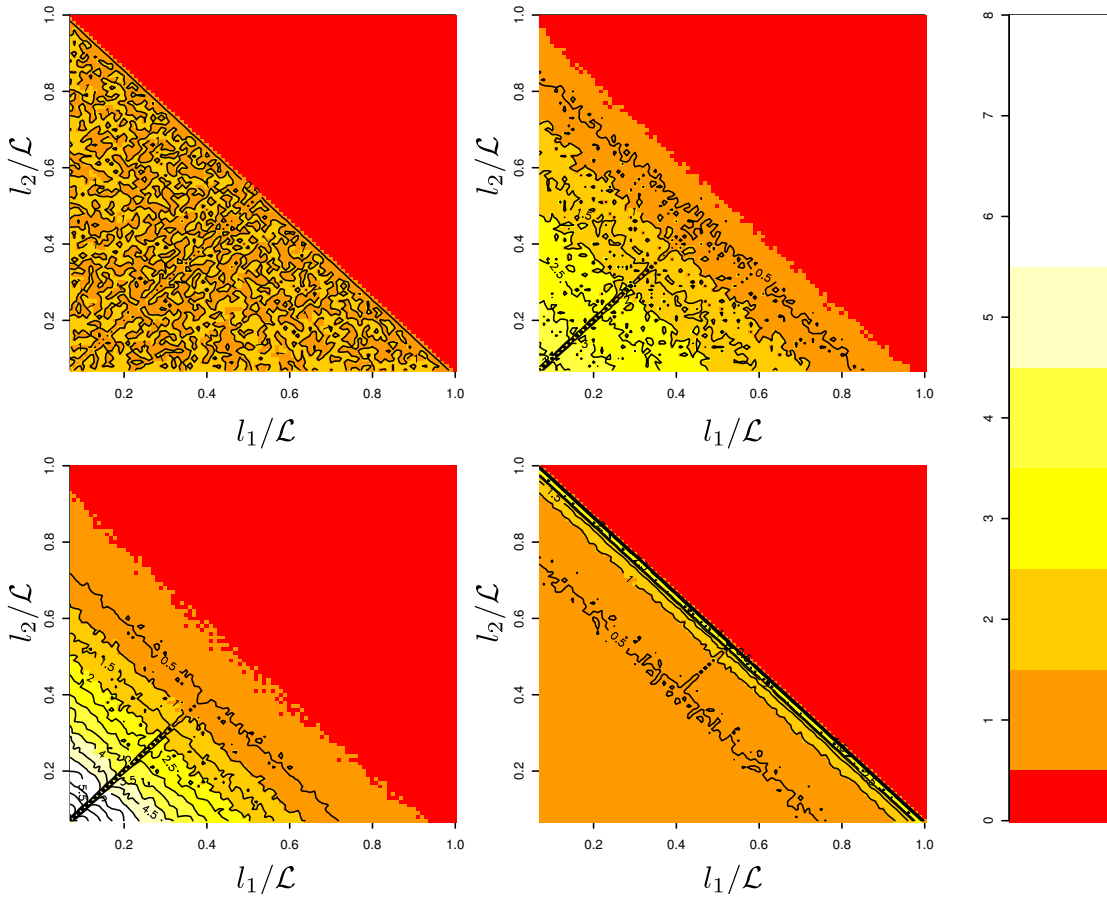


Figura 3.29: Distribución de probabilidades para los dos tamaños más grandes para los casos $\theta = 1$ (panel superior izquierdo), $\theta = 2$ (panel superior derecho), $\theta = 3$ (panel inferior izquierdo) y $\theta = 1/2$ (panel inferior derecho). Se puede observar claramente la forma de la distribución de PD.

3.6.3. Análisis

Resulta remarcable que la distribución de probabilidad conjunta de las longitudes de loops macroscópicos tenga una forma que es calculable y no trivial. Aparte de la obtención de la distribución desde la teoría de campos (Nahum *et al.*, 2013a), un punto de vista alternativo sobre estos resultados proviene de argumentos que han sido desarrollados en la literatura de la física matemática (Goldschmidt *et al.*, 2011), que resumimos aquí.

El punto de partida consiste en considerar procesos estocásticos en las configu-

raciones de loops, del tipo llamado corte-mezcla (*split-merge*), bajo las cuales la distribución es estacionaria. Este proceso es de hecho el que nosotros usamos para la simulación de Monte Carlo (sec. 3.3). Cuando en el primer tipo de actualización elegimos un nodo, o bien las dos ramas de loops forman parte de un único loop que visita el nodo dos veces, o bien son partes de dos loops separados. En este caso, si el color de ambas ramas es el mismo, el efecto del movimiento de Monte Carlo es o bien separa un loop en dos (en el caso de que fuera un único loop) o bien unir dos loops en uno (en el caso de ser dos loops).

El siguiente paso es derivar las consecuencias para la distribución de loops del requisito de que la tasa de uniones y cortes ha de ser igual. Llamamos λ_1 y λ_2 a las longitudes de los loops separados y $\lambda_1 + \lambda_2 \equiv \lambda$ la de la unión de ambos. Entonces, estamos interesados en saber la relación entre las probabilidades $\pi_1(\lambda)$, probabilidad de que por el nodo elegido sólo pase un loop, y $\pi_2(\lambda_1, \lambda_2)$, probabilidad de que sean dos. Si λ_1 y λ_2 son pequeños, afirmaciones exactas son imposibles puesto que las probabilidades dependen de forma directa de las correlaciones del colectivo de loops. En el caso en el que los loops son macroscópicos ($\lambda_{1,2} \gg L^2$) es posible suponer la conjetura de que pasan por los nodos de forma descorrelacionada (Goldschmidt *et al.*, 2011). Estas probabilidades entonces están relacionadas con las longitudes por la expresión

$$\pi_1(\lambda) = \mathcal{L}^{-2} \lambda \left\langle \sum_i \delta(\lambda - l_i) \right\rangle \equiv \mathcal{L}^{-1} P_{\text{link}}(\lambda) \quad (3.28)$$

y

$$\pi_2(\lambda_1, \lambda_2) = \mathcal{L}^{-2} \lambda_1 \lambda_2 \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(\lambda_1 - l_i) \delta(\lambda_2 - l_j) \right\rangle. \quad (3.29)$$

En este caso, balance detallado implica que

$$\theta \pi_1(\lambda_1 + \lambda_2) = \pi_2(\lambda_1, \lambda_2), \quad (3.30)$$

con $\theta = n$ para los loops orientados, puesto que el proceso de unión sólo ocurre cuando ambos loops tienen el mismo color. Al evaluar el lado derecho de las ecuaciones (3.28) y (3.29) usando la distribución PD queda $\pi_1(\lambda) = \mathcal{L}^{-2} \theta [1 - \lambda / (f\mathcal{L})]^{(\theta-1)}$ y $\pi_2(\lambda_1, \lambda_2) = \mathcal{L}^{-2} \theta^2 [1 - (\lambda_1 + \lambda_2) / (f\mathcal{L})]^{(\theta-1)}$. Es decir, PD es estacionaria bajo procesos de corte-mezcla, en el caso en que los loops largos son suficientemente

independientes como para que las formas supuestas de $\pi_1(\lambda)$ y $\pi_2(\lambda_1, \lambda_2)$ sean correctas. Por otra parte, en el caso de los modelos de loops sin orientación, en el movimiento de Monte Carlo hay tres emparejamientos posibles, dos de los cuales implican un único loop. Es decir, un único loop sólo se separa la mitad de los intentos, por lo que el parámetro $\theta = n/2$ en estos modelos.

3.7. Conclusiones

Exponemos a continuación un pequeño resumen de las conclusiones de este capítulo. Hemos caracterizado los modelos de loops completamente empaquetados tridimensionales para valores de fugacidad entera.

Hemos caracterizado las fases extendidas de los modelos, determinando la equivalencia entre los momentos de las distribuciones de longitudes de los loops y momentos obtenidos desde las correlaciones de los modelos sigma sobre \mathbb{CP}^{n-1} . Además, hemos dado pruebas que apoyan la conjetura de que esta distribución de longitudes se corresponde con la distribución de Poisson-Dirichlet, tal y como conjeturaban Goldschmidt *et al.* (2011); Grosskinsky *et al.* (2012), y que identifican la fase extendida de los modelos de loops con la fase ordenada de los modelos sigma sobre \mathbb{CP}^{n-1} (Nahum *et al.*, 2013a).

En la red L hemos comprobado que la fase extendida desaparece para valores $n > 4$, por lo que la posible transición de fase de *deconfinamiento* (Senthil *et al.*, 2004a,b) en $p = 1/2$ queda restringida a valores $n^* > 4$. Para este rango de fugacidades, en $p = 1/2$ se produce una transición de fase de primer orden entre dos fases con loops cortos. En el valor especial de $n = 4$ no hemos conseguido alcanzar el tamaño de la longitud de correlación, que en caso de ser una transición de primer orden es finita, como el análisis de la red K sugiere. En la red K hemos determinado que el carácter de la transición para $n \geq 4$ es discontinuo y hemos predicho un valor mínimo de $n^* = 3.0(2)$ por debajo del cual las transiciones son continuas. En ambas redes hemos encontrado que los valores $1 \leq n \leq 3$ son compatibles con transiciones de fase continuas y hemos caracterizado los exponentes críticos de estas clases de

universalidad, véase la tabla 3.2.

Red L			Red K		
n	ν	η	n	ν	η
1	0.997(2)	-0.06(2)	1	0.987(10)	-0.07(3)
2	0.722(10)	0.04(8)	2	0.708(5)	0.04(3)
3	0.54(2)	0.21(4)	3	0.536(13)	0.23(2)

Tabla 3.2: Exponentes ν y η en las redes L y K tridimensionales.

Los valores de los exponentes críticos para $n = 1$ y $n = 2$ son compatibles con resultados previos en las mismas clases de universalidad: en la clase C de las transiciones de Anderson (Ortuño *et al.*, 2009) para $n = 1$ y en el modelo sigma $O(3)$ o Heisenberg tridimensional (Campostrini *et al.*, 2002) para $n = 2$. Para $n = 3$ hemos encontrado una nueva clase de universalidad, que ha de ser la correspondiente al modelo sigma sobre \mathbb{CP}^2 y hemos proporcionado por primera vez estimaciones de los exponentes críticos en esta clase. Ésta también se corresponde con posibles transiciones de fase en sistemas cuánticos en $2 + 1$ dimensiones de imanes $SU(3)$, como parece indicar nuevos trabajos (Kaul, 2012).

Criticalidad de deconfinamiento

El comportamiento cualitativo de la mayoría de transiciones de fases viene bien caracterizado bajo el paradigma Landau-Ginzburg-Wilson (LGW). En éste, el parámetro de orden juega un papel fundamental: las propiedades de un punto crítico vienen descritas mediante las teorías efectivas Ginzburg-Landau sobre el parámetro de orden, en donde se modela su comportamiento de largas distancias y bajas energías, y las ideas generales de grupo de renormalización. Así, las transiciones observadas en los modelos de loops del capítulo anterior podían ser descritas en este paradigma, mediante un modelo sigma estándar sobre el parámetro de orden nemático Q , véase la sección 1.3.2.

Los numerosos trabajos realizados en las últimas décadas en puntos críticos cuánticos (QCP), mediante técnicas de Monte Carlo cuántico o teorías cuánticas de campos entre otros, han propiciado la aparición de escenarios en los que este paradigma puede fallar. En sistemas bidimensionales, Senthil *et al.* (2004a,b) propusieron una nueva clase de puntos críticos que separan dos fases ordenadas, con orden asociado a simetrías diferentes, a los que llamaron puntos críticos de deconfinamiento (DCP). La particularidad de estos puntos reside en que la descripción del comportamiento crítico viene, no mediante teorías efectivas sobre el parámetro de orden, sino teorías sobre grados de libertad fraccionarios que componen los parámetros de orden asociados a cada fase.

Entre los modelos concretos propuestos para la criticalidad cuántica de deconfinamiento (QDC) están una clase de modelos magnéticos con simetría $SU(2)$ y ciertas interacciones asociadas a la presencia de defectos topológicos. En el capítulo anterior encontramos que los modelos de loops completamente empaquetados en

$n = 2$, definidos allí, son compatibles con discretizaciones del modelo sigma tridimensional \mathbb{CP}^1 , o equivalentemente modelos cuánticos en 2+1 dimensiones $SU(2)$. Por lo que estos modelos de loops son candidatos al estudio del QDC.

En la primera sección (Sec. 4.1) resumimos el contexto en el que se genera este trabajo, introducimos la fenomenología de los DCP y su relación con el paradigma LGW. A continuación (Sec. 4.2) damos los detalles de la definición del modelo y describimos el diagrama de fases. Como para estos modelos han sido necesarios estudiar tamaños mucho más grandes que en los del capítulo anterior, en la Sec. 4.3 damos las ideas para la versión del Monte Carlo paralelizada, que es la que usamos aquí. Las tres siguientes secciones se ocupan del estudio y la caracterización de la transición de fase para $n = 2$. En la Sec. 4.4 caracterizamos las dos fases ordenadas del modelo mediante el estudio de los dos parámetros de orden y magnitudes relacionadas: susceptibilidades, funciones de correlación, número de curvas extendidas, etc. Dedicamos la siguiente Sec. 4.5 a la energía y su distribución, para arrojar luz sobre el carácter de la transición. Estudiamos también el *crossover* a la fase anisótropa en la Sec. 4.6 y, por último para el caso $n = 2$, damos un resumen de los posibles exponentes críticos que parece que encontramos en caso de ser una transición continua, Sec. 4.7. Para completar el diagrama de fases analizamos también el mismo modelo para $n = 1$ (Sec. 4.8) y $n = 3$ (Sec. 4.9).

4.1. Generalidades

El estudio de los puntos críticos cuánticos (QCP), que ha generado un gran interés en las últimas décadas, se ha venido realizando mediante técnicas numéricas, entre las que destacan Monte Carlo cuántico, DMRG, TEBD y otros, y sus descripciones teóricas a través de teorías efectivas y grupo de renormalización, principalmente. Sin embargo, estos QCP no parecían quedar fuera del paradigma LGW, en parte gracias a la descripción de los modelos con integrales de Feynman que identifican muchos de estos modelos cuánticos en d dimensiones con equivalentes clásicos en $d + 1$ dimensiones. Excepciones a esto se conocían y estaban bien documenta-

das en sistemas unidimensionales (Haldane, 1982), pero en general, dependían de propiedades específicas de esta clase de modelos unidimensionales. A finales de la década de los 90 y principios del 2000, surgieron unos primeros trabajos en QCP que parecían evidenciar el fallo de este paradigma en sistemas cuánticos bidimensionales (Assaad *et al.*, 1996, 1997; Sandvik *et al.*, 2002). Concretamente, dentro del marco LGW dos fases ordenadas donde las simetrías rotas son diferentes sólo pueden separarse por una transición de primer orden, un punto multicrítico, una región de coexistencia de las dos fases o una región desordenada entre medias. Estos trabajos encontraron evidencias compatibles con transiciones continuas entre: un aislante de Mott y un superconductor $d_{x^2-y^2}$ Assaad *et al.* (1996, 1997), y una fase con orden $U(1)$ a otra con orden por tiras en un modelo tipo XY Sandvik *et al.* (2002).

La primera pregunta que surgía era si estas simulaciones eran capaces de ajustar los parámetros con la precisión que requiere un punto multicrítico o si en cambio, es posible una transición continua entre dos fases ordenadas con simetrías rotas diferentes. En una serie de artículos, Senthil *et al.* (2004a,b, 2005) dieron argumentos de como se podían interpretar este tipo de transiciones dentro de una teoría cuántica de campos. Mostraron a su vez como en varios ejemplos de posibles transiciones de fase cuánticas se violaba este paradigma. En estos trabajos, para explicar esta familia de transiciones continuas se proponía el hecho de que la transición no fuese inducida por las fluctuaciones de largas distancias de los parámetros de orden, sino de grados de libertad emergentes, sólo visibles en el punto crítico. Es decir, las teorías efectivas que describen las dos fases ordenadas, modelos sigma sobre el parámetro de orden correspondiente, no serían capaces de describir las propiedades del punto crítico. En éste, los grados de libertad relevante, para una teoría efectiva, son grados de libertad fraccionarios que componen los parámetros de orden de ambas fases, pero que están confinados en las fases ordenadas. A estos puntos críticos les llamaron *puntos críticos de deconfinamiento* (DCP o *deconfined critical points*).

En concreto, uno de los modelos en los que proponían la existencia un DCP es

un sistema cuántico magnético con simetría $SU(2)$,

$$H = J \sum \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \dots, \quad (4.1)$$

donde los puntos suspensivos representan interacciones de corto alcance que mantienen la simetría del hamiltoniano, en la red cuadrada, por ejemplo. Este escenario ocurriría en una transición de fase entre un estado antiferromagnético, estado de *Néel*, y un estado paramagnético, donde los los espines están apareados en forma de *singletes* (VBS o *valence bond solid* (Read y Sachdev, 1989a)). El comportamiento de la primera de estas fases es bastante conocido, y está asociada a la fase ordenada del modelo sigma $O(3)$ o modelo Heisenberg. En la otra fase la simetría rota es la del grupo de simetrías de la red, mediante la *dimerización* de los espines. En Senthil *et al.* (2004a,b), proponen la existencia de una transición continua directa entre estas dos fases mediante un DCP. En esta, la teoría efectiva que describe sus propiedades no dependería del parámetro de orden de *Néel*, \vec{N} , o del parámetro de orden del VBS, Ψ_{VBS} . Depende de campos $\mathbf{z} \in \mathbb{CP}^1$ (*espinones*), que se pueden relacionar con estos dos parámetros de orden. Por una parte, es estándar la descripción \mathbb{CP}^1 del vector de Néel $\vec{N} \sim z^\dagger \vec{\sigma} z$ donde $\vec{\sigma}$ es el vector de matrices de Pauli. Por otra, Read y Sachdev (1989a,b) encontraron que el parámetro de orden Ψ_{VBS} se puede identificar con el operador creación de defectos topológicos tipo *instantones* llamados también *monopolos de Dirac*. Estos monopolos tienen una interpretación natural en el estado de *Néel*: están asociados, a un tiempo dado, con el número de *skyrmions* de una configuración. Una representación visual del cambio en el número de skyrmions en un sistema cuántico en 2 dimensiones viene al aplicarse el operador de evolución temporal. Al cambiar el número de skyrmions, el sistema cuántico en 2+1 dimensiones se corresponde con configuraciones de *erizo* del vector de *Néel* en el espacio-tiempo, donde el skyrmion es equivalente al corte a un tiempo dado de una de estas configuraciones. Este tipo de configuraciones de *skyrmions* y *erizos* se ilustran en la figura 4.1.

La teoría efectiva que proponen Senthil *et al.* (2004a,b) que describiría esta transición es un modelo sigma sobre los campos z , y un campo gauge asociado a la simetría gauge $U(1)$ de estos campos. Como indican los autores, un punto

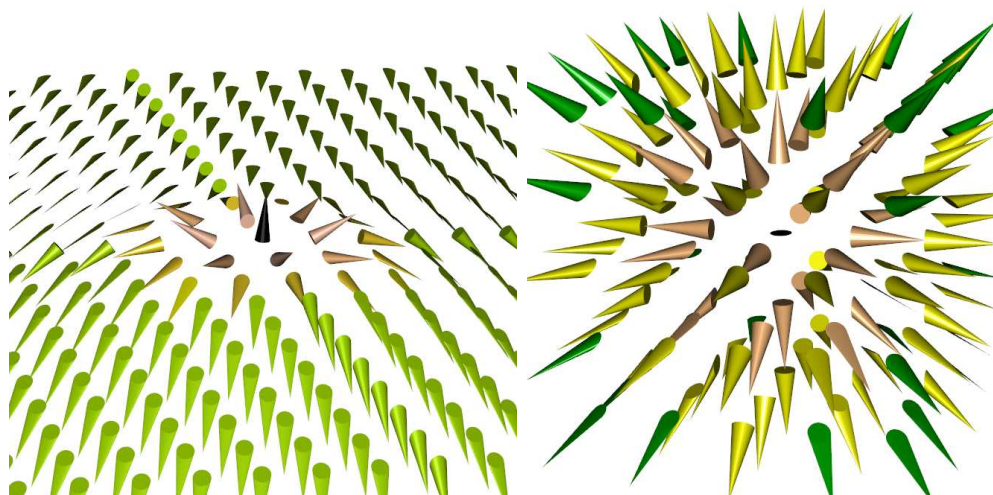


Figura 4.1: Izquierda: Representación de una configuración con un skyrmion para espines $O(3)$. Derecha: Representación de una configuración de erizo.

clave es el hecho de que el campo gauge sea no-compacto, o equivalentemente, la ausencia de los monopolos. Encontraron como consecuencia de esto, que a bajas energías en esta teoría efectiva el número de skyrmions se conserva. La existencia de esta ley de conservación topológica y emergente, es usado por Senthil *et al.* (2004a,b) para dar una definición equivalente a un punto crítico de deconfinamiento. En la representación espacio-temporal se traduce en la ausencia de configuraciones de erizo en el punto crítico y en que las excitaciones asociadas a los espinones quedan libres (Senthil *et al.*, 2004a,b; Levin y Senthil, 2004), a diferencia de las fases ordenadas donde están confinados. Su confinamiento en la fase paramagnética, por ejemplo, viene dado por la proliferación de estos defectos. Nótese que hubo estudios previos en modelos tipo Heisenberg donde se forzaba a mano la ausencia de erizos, esto provocaba la aparición de una nueva clase de universalidad (Kamal y Murthy, 1993; Motrunich y Vishwanath, 2004) distinta a la del $O(3)$.

La fase paramagnética de la teoría efectiva para la QDC viene descrita como un líquido de espín $U(1)$ con “campos de fotón deconfinados sin gap” (Levin y Senthil, 2004). Podemos describir este líquido de espín, acercando el sistema a la transición

desde la fase VBS, donde los espines están en una de las cuatro posibles dimerizaciones de la red cuadrada (aquí se le conoce como fase \mathbb{Z}_4). La presencia de estas dos fases paramagnéticas implica la existencia de dos escalas de longitudes divergentes distintas, que crecen una como potencia de la otra. Para tamaños mayores que la longitud de correlación del VBS, el sistema no elige una de estas dimerizaciones, sino que está fluctuando entre todas ellas, esta es la fase $U(1)$. Esta fase es *inestable* a la aparición de monopolos, a diferencia del punto crítico, por lo que en términos de RG el sistema fluye a la fase VBS (Levin y Senthil, 2004). En la fase VBS los monopolos están en forma condensada y la representación en el espacio-tiempo se corresponde con un condensado de erizos. El diagrama esquemático de RG puede representarse como se muestra en la figura 4.2. El *crossover* que se observa en el diagrama de RG, de la fase $U(1)$ a la \mathbb{Z}_4 , describe la evolución del sistema de una fase paramagnética sin configuraciones de erizo a otra formada por un condensado de estos.

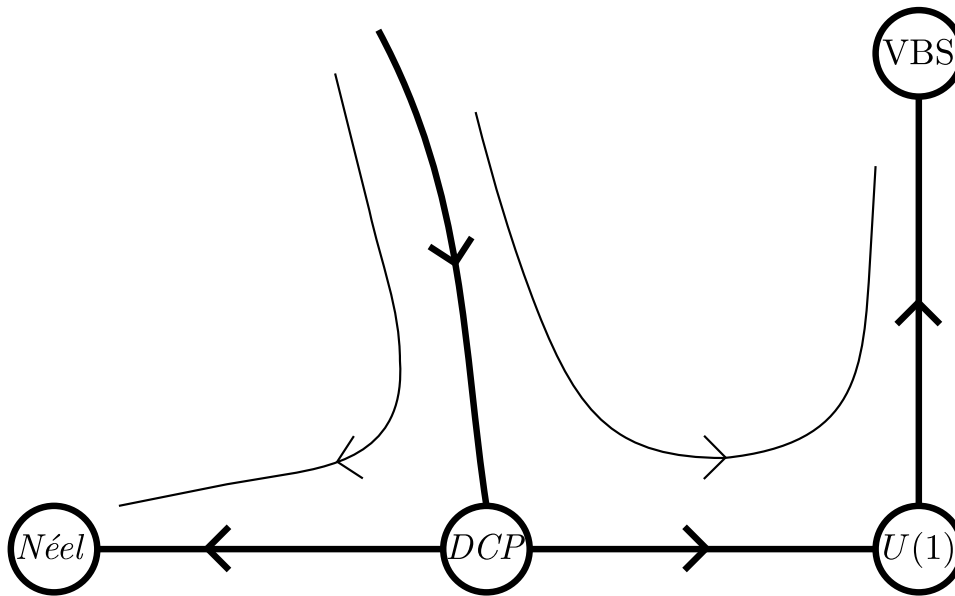


Figura 4.2: Diagrama esquemático de una transición de deconfinamiento. Se puede observar el fenómeno de *crossover* de la fase $U(1)$ a \mathbb{Z}_4 .

La búsqueda de un modelo en esta clase de universalidad, ha ocupado bastantes

trabajos en la última década, algunos ejemplos son (Sandvik, 2007; Senthil y Fisher, 2006; Wenzel *et al.*, 2008; Alet *et al.*, 2006; Farnell *et al.*, 2011; Kaul y Melko, 2008; Kaul, 2011, 2012; Kaul y Sandvik, 2012; Sandvik, 2010b; Kuklov *et al.*, 2006, 2008; Pujari *et al.*, 2013; Albuquerque *et al.*, 2012; Beach *et al.*, 2009; Kragset *et al.*, 2006; Harada *et al.*, 2013). Entre ellos destacan ciertos modelos por la controversia en el análisis de los resultados obtenidos. Por ejemplo, el modelo $J-Q$ (Sandvik, 2007) es uno de los modelos paradigmáticos en la búsqueda de QDC en $SU(2)$, donde se han sugerido tanto una transición de fase continua (Sandvik, 2007; Melko y Kaul, 2008; Sandvik, 2010b), aunque no necesariamente estándar, o una de transición de fase de primer orden (Jiang *et al.*, 2008; Kuklov *et al.*, 2008; Chen *et al.*, 2013). Uno de los problemas a los que se enfrentan es un comportamiento anómalo en observables como la rigidez, en el que Sandvik (2010b) observa una divergencia logarítmica para los tamaños que estudia. También se observa el fallo del colapso de escala cuando se consideran tamaños cada vez mayores, asociado al hecho de que los exponentes críticos varían con el tamaño (definidos de forma efectiva), esto también aparece en otros sistemas relacionados como los estudiados por Harada *et al.* (2013). Además se presentaron casos anteriormente (Kuklov *et al.*, 2006; Kragset *et al.*, 2006; Sandvik y Melko, 2006) donde fenómenos similares condujeron a la interpretación de una transición débilmente de primer orden, por ello este modelo $J-Q$ ha suscitado tanto interés. En la actualidad, queda pendiente determinar de manera precisa un modelo que con las simetría $SU(2)$ produjera una transición de fase en la clase de QDC.

Volviendo a los modelos de loops, resulta destacable el hecho de que los modelos estudiados en el capítulo 3 se identificaban con una discretización de modelos sigma $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$. En particular, esto implica su equivalencia con modelos cuánticos $SU(n)$ en 2+1 dimensiones, algo que también se puede observar mediante la construcción de una matriz de transferencia (Nahum *et al.*, 2013c). Los espines viven en los enlaces y los loops son las líneas de la propagación del operador evolución, donde los colores son las componentes de los espines z . Esta equivalencia permite pensar que estos modelos de loops pueden ser candidatos para la búsqueda de un DCP. Como hemos

indicado, uno de los puntos cruciales en la descripción de estos DCP es la supresión de monopolos de Dirac o equivalentemente defectos de erizo, en $n = 2$. Este hecho se da de forma natural en el modelo de loops en la red L tridimensional, para $p = 1/2$.

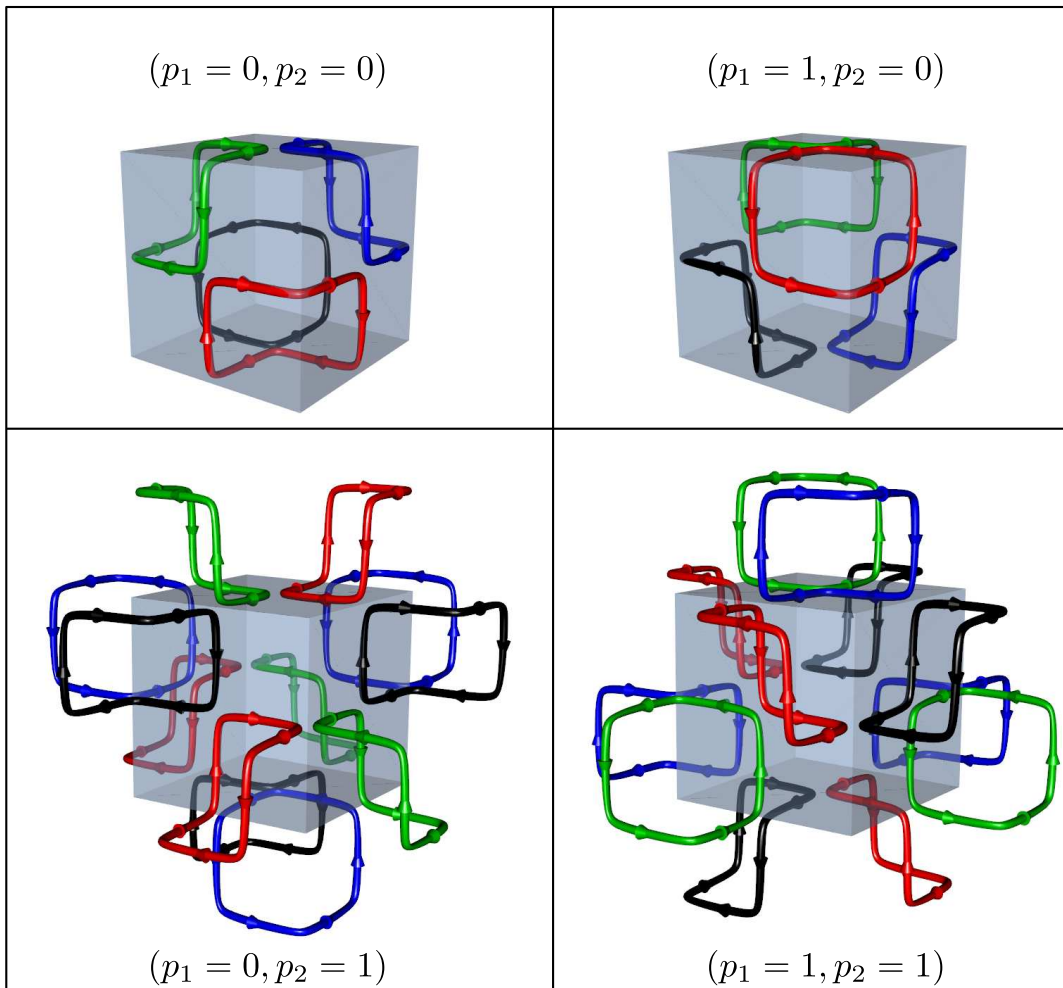


Figura 4.3: Caricaturas de las cuatro posibles fases de loops cortos en la red L tridimensional. Las variables p_i , con $i = 1, 2$, están asociadas a cada una de las dos subredes de la red L .

Para entenderlo podemos observar primero los cuatro posibles estados con loops cortos en la red L . Recordamos que la red L es una red bipartita, por lo que podemos asociar un p_i a las dos subredes $i = 1$ y 2 . Los extremos del diagrama de fases del modelo de loops estudiado en el capítulo anterior, $p_1 = p_2 = 0$ y $p_1 = p_2 = 1$, se

corresponden con dos configuraciones de loops de tamaño 6. Estas dos posibilidades no son las únicas para producir configuraciones con loops de tamaño mínimo. Los extremos $p_1 = 1, p_2 = 0$ y $p_1 = 0, p_2 = 1$ también producen configuraciones con loops hexagonales. Caricaturas de estas cuatro fases se pueden ver en la figura 4.3. Éstas, que en el lenguaje de los espines se corresponden con fases dimerizadas donde los espines que viven en los enlaces de un mismo loop están en forma de singlete, se corresponderán con las que se observan en la fase \mathbb{Z}_4 . Read y Sachdev (1989a,b) encontraron que el campo asociado al parámetro de orden de estas fases, se corresponde con la fugacidad asociada a las configuraciones de erizos, en la descripción espacio-temporal de los modelos cuánticos $SU(n)$ en 2+1 dimensiones. El único punto del diagrama de fases (p_1, p_2) donde no se ven favorecidas ninguna de estos cuatro parámetros de orden es $p \equiv p_1 = p_2 = 1/2$, es decir, sus campos asociados son cero. En otras palabras, la línea $p = 1/2$ en el diagrama de fases del modelo de loops para distintos n tiene la característica de que estas configuraciones con erizos están suprimidas. Un argumento basado en la teoría de campos discreta asociada probablemente aparecerá en (Nahum *et al.*, n.d.). Recordamos que el punto $n = 2$ y $p = 1/2$ está dentro de la fase ordenada, donde los loops son largos. Es decir, en este punto, una interacción que no favorezca ninguna de estas cuatro fases de loops cortos y que localice los loops, puede conducir una fase de loops extendidos a otra en la que hay orden \mathbb{Z}_4 . La supresión de las configuraciones de erizo, nos permite esperar la clase de universalidad del escenario QDC. Veremos que en efecto, con una interacción simple, del tipo Ising, podremos provocar la aparición de una transición a una fase $U(1)$ y un crossover a otra fase \mathbb{Z}_4 , cuyos mínimos son las configuraciones mostradas en la figura 4.3. Queda pendiente dilucidar el carácter de la transición, pero en este trabajo damos las claves que pueden conducir a su caracterización.

4.2. Modelo

El modelo de loops que estudiamos en este capítulo está definido otra vez en la red L tridimensional, Sec. 3.2. Para su definición, cabe recordar que la red L es una

red bipartita cuyas dos subredes son redes octaédricas de coordinación 8. Usaremos como en los modelos anteriores condiciones de contorno periódicas y por tanto el número de nodos será $N = 3L^3/4$ con L el tamaño lateral.

Situaremos el modelo en el punto simétrico $p = 1/2$ y añadimos a la función de partición una interacción que localiza los loops, pero que no favorece ninguna de las cuatro fases indicadas,

$$Z = \sum_{\{\sigma(i)\}} p^{N_p} (1-p)^{N_{1-p}} n^{\#\text{loops}} \exp \left[\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle_2} \sigma(i)\sigma(j) \right], \quad (4.2)$$

donde $\sigma(i)$ tiene como valor la configuración α o β del nodo i . Le asignamos al estado con probabilidad $1-p$ el valor $\alpha = -1$, mientras que al otro le asignamos valor $\beta = 1$. El parámetro de acople J determina la fuerza de la interacción y $\langle i,j \rangle_2$ indica que se trata de los segundos vecinos, primeros vecinos en cada subred. Valores de J grandes tienden a localizar las trayectorias, ordenando cada una de las subredes. De hecho, cuando $J \rightarrow \infty$, como todos los nodos de cada subred están en el mismo estado, bien sea $\sigma = 1$ ó -1 , las cuatro posibles combinaciones son las de la figura 4.3. En estos cuatro mínimos todos los loops tienen tamaño seis.

Como hemos indicado el caso $p = 1/2$ es el de más interés. Además de no favorecer ninguna de las cuatro posibles fases de loops cortos, hace que la función de partición se simplifique y sólo quede el factor de Boltzmann de la interacción. Como en los modelos anteriores, la fugacidad para el número de loops la implementamos mediante un índice de color. En concreto, nos concentramos en el caso $n = 2$, el cual es el problema más interesante por su relación con el modelo Heisenberg en $2+1$ dimensiones. También estudiamos los modelos en $n = 1$ y $n = 3$ para una descripción completa del diagrama de fases, en las secciones 4.8 y 4.9, respectivamente.

La figura 4.4 muestra el diagrama de fases de esta transición en el plano $p - J$ para el modelo con $n = 2$. Hemos indicado con una línea roja la fase $U(1)$ que desaparece conforme aumenta el tamaño mediante un *crossover* a la fase \mathbb{Z}_4 . El punto donde ocurre la transición está bien determinado, como iremos justificando a lo largo del capítulo, su valor es $J_c = 0.088500(2)$. Por otra parte, a cualquiera de los dos lados de las líneas se ven favorecidos uno de los dos mínimos asociados

a $p = 0$ o $p = 1$, por lo que la transición en estas líneas debe estar en la clase de universalidad del modelo de loops no interactuante, la clase $O(3)$. Estos puntos críticos, para $p \neq 1/2$, han sido estimados mediante los cruces del WN entre sólo dos tamaños $L = 40$ y $L = 80$, definido en 3.4, por lo que posibles errores sistemático pueden estar presentes. En cualquier caso, podemos obtener de forma aproximada el comportamiento de esta línea cerca de $p = 1/2$, mediante un ajuste a una ley de potencias, $|p_{lc} - 1/2| = A(J_{lc} - J_c)^b$, donde p_{lc} y J_{lc} son las coordenadas de la línea crítica. Este ajuste produce un exponente $b \approx 1.5$.

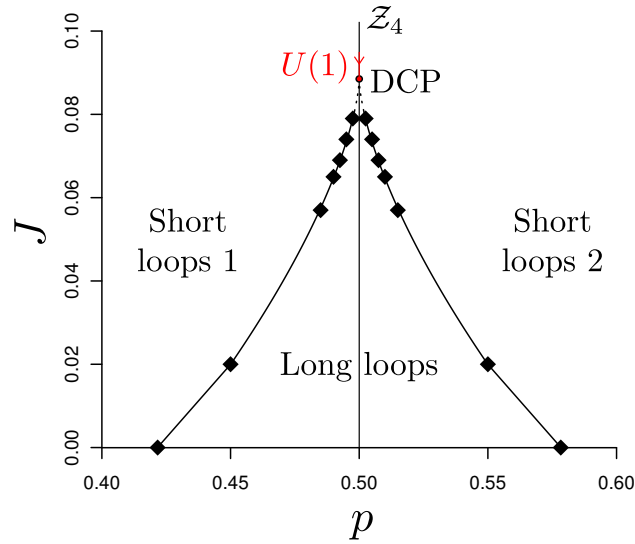


Figura 4.4: Diagrama de fases esquemático del modelo de loops para $n = 2$. La línea de interés donde se han realizado la mayoría de simulaciones es $p = 1/2$. La fase $U(1)$ desaparece mediante un *crossover* a la fase \mathbb{Z}_4 , sólo presente en la línea $p = 1/2$. El punto crítico está en $J_c = 0.088500(2)$, $p = 1/2$ y las líneas críticas se acercan a éste de forma $|p_{lc} - 1/2| \sim (J_{lc} - J_c)^{1.5}$. Las líneas representadas son una guía visual.

4.3. Procedimiento de Monte Carlo

El procedimiento numérico para implementar el modelo es similar al mencionado en el caso de los modelos de loops \mathbb{CP}^{n-1} , tanto la formación de los loops

como la asociación de la fugacidad mediante colores. En este caso, para la actualización de los nodos debemos adaptar el algoritmo de Metrópolis a la nueva función de partición. Cada nodo i , cambiará su estado $\sigma(i)$ de acuerdo a la probabilidad $\min \left\{ \exp \left[-J\sigma(i) \sum_{j_{nn,i}} \sigma(j_{nn,i}) \right], 1 \right\}$, donde $j_{nn,i}$ indica los segundos vecinos de i . Así, una vez generado un estado inicial con estados aleatorios, los estados subsecuentes se generaran usando tres tipos de movimientos Monte Carlo para asegurar que las configuraciones en equilibrio se distribuyen de acuerdo a la función de partición, ec. (4.2).

En este caso describimos el algoritmo paralelizado. Para ello, como la red L es bipartita, podemos usar un algoritmo de descomposición de dominios separados del tipo explicado en la sección 2.1.6, llamamos a estas dos subredes: A y B. Cada subred se puede descomponer a su vez en tres subredes cúbicas separadas, que actualizaremos en cada movimiento Monte Carlo. Entonces, el primer paso consiste en repartir los nodos de una subred cúbica de la subred A entre todos los procesos paralelos y actualizar sus estados. Repetimos este proceso para una subred de la subred B. El segundo movimiento Monte Carlo consiste en que cada proceso paralelo elige un enlace de forma aleatoria y cambia el color de los enlaces del loop al que pertenece. Como en el caso $n = 2$ sólo hay dos colores, no hay interferencia entre procesos. Un proceso dado se para si llega a un enlace que ya ha sido cambiado de color. Cuando n es mayor el cambio se realiza en un vector temporal y se escribe sólo si el proceso llega al final. En este caso, un proceso dado se para si visita un enlace cuyo color ha sido cambiado y el índice del proceso que lo ha visitado es menor. Por último el tercer tipo de movimiento consiste en re-colorear todos los loops del sistema, con colores nuevos elegidos independiente y aleatoriamente para cada loop. De esta forma aseguramos que los colores de los loops cortos se equilibran eficientemente.

Los dos primeros pasos se repiten tres veces, eligiendo una subred diferente para la actualización de los nodos en cada repetición, así, todos los nodos tienen la posibilidad de actualizarse. Dado el aumento considerable del tiempo de correlación para el punto crítico, usamos la definición de paso Monte Carlo a la repetición de

este proceso 10 veces. Cada dos pasos Monte Carlo se obtienen medidas de los observables y se realiza el tercer paso indicado. Otra vez, la función de autocorrelación de la energía se usa para estimar el tiempo de correlación, aunque otros observables dan estimaciones compatibles. Para calcular las barras de error usamos el método de los bloques y el método bootstrap, véase Sec. 2.4.1 y 2.4.2.

Mediante el método de los múltiples histogramas (Sec. 2.3.2), desarrollado por Ferrenberg y Swendsen (1989), obtenemos conjuntos de valores continuos en función de J para las distintas cantidades y mejoramos la precisión de los puntos simulados. Además, lo usamos siempre que se calcule una derivada o un extremo relativo. Las barras de error asociadas a esta técnica las calculamos mediante el método de bootstrap, tal y como se indicó en la sección 2.4.2.

Para estos sistemas ha sido necesario usar tamaños mucho más grandes que los usados en el capítulo 3 para $n = 2$, llegando a tamaños $L = 640$ que está formado aproximadamente 3.9×10^8 enlaces. Exceptuando el tamaño $L = 640$, el número mínimo de pasos Monte Carlo es 10^5 para todos los J , y aumenta conforme decrece L . En particular, dado el tiempo de correlación, para el tamaño $L = 512$ justo en J_c hay al menos un mínimo de 200 pasos completamente independientes y aumenta en el resto del rango. Para el tamaño $L = 640$ sólo se han simulado hasta ahora aproximadamente 60000 pasos para dos valores de J .

4.4. Caracterización de las fases y la transición

En esta sección y las dos siguientes, vamos a dar argumentos por los que esta transición es tan difícil de caracterizar. Por una parte, veremos que algunos comportamientos de los observables, como el fallo del colapso de escala o una distribución de energías excepcionalmente ancha, donde parece intuirse una forma bimodal, pueden indicar que estamos ante una transición de primer orden. También observaremos que los exponentes críticos efectivos varían con el tamaño, lo cual apoya esta tesis, o que por lo menos los sistemas están lejos de un comportamiento crítico usual. Además, en este rango de tamaños simulados, quizás debido al hecho del cambio de

comportamiento crítico, parecen fallar algunas de las relaciones usuales de *hyperscaling*. Por otra parte, no observamos en ningún momento el fenómeno de histéresis ni una divergencia en los tiempos de correlación como la esperada en una transición de primer orden, además de que el parámetro de binder \mathcal{V} parece tender a cero. Las funciones de correlación, por su parte, parecen seguir bien una ley de potencias, sin dependencia con el tamaño.

4.4.1. Parámetros de Orden

Como indicamos en la sección 4.1, esperamos que se produzca una transición entre dos fases ordenadas, con diferentes simetrías rotas diferentes, por lo que podremos definir dos parámetros de orden, cada uno asociado a una fase. Uno de ellos es el parámetro de orden definido para los modelos de loops en la sección 3.4, la probabilidad de que un enlace pertenezca a un loop extendido. En el lenguaje del modelo magnético es equivalente a la magnetización. Para un sistema de tamaño finito L , donde el número de nodos es $N = 3L^3/4$, podemos definir como

$$N\mathcal{O}_w = \sum_{s=0}^{2N} sn_{\text{ext}}(s) \quad (4.3)$$

donde $n_{\text{ext}}(s)$ es el número de loops extendidos de tamaño s . O de forma similar, $N\mathcal{O}_s$ la longitud de las ramas de loops extendidas (no del loop entero). Contamos como ramas extendidos las que sean del tamaño del sistema en una dirección, es decir, que contribuyan al WN (definido en secciones 3.4 y 4.4.2). Este parámetro de orden se hará cero en la fase con loops cortos, y crecerá en la fase con loops infinitos.

El segundo parámetro de orden, diferente de cero en la fase localizada, lo definimos como

$$N\varphi = \left(N_+^{(1)} - N_-^{(1)}, N_+^{(2)} - N_-^{(2)} \right), \quad (4.4)$$

donde $N_+^{(i)}$ y $N_-^{(i)}$ son el número de nodos en la configuración $\sigma = 1$ y -1 , respectivamente, en la subred i . Una de las predicciones de la QDC es la existencia de una competencia entre dos longitudes asociadas a dos simetrías diferentes en la fase localizada. Estas dos simetrías, $U(1)$ y \mathbb{Z}_4 , caracterizan las dos fases localizadas que

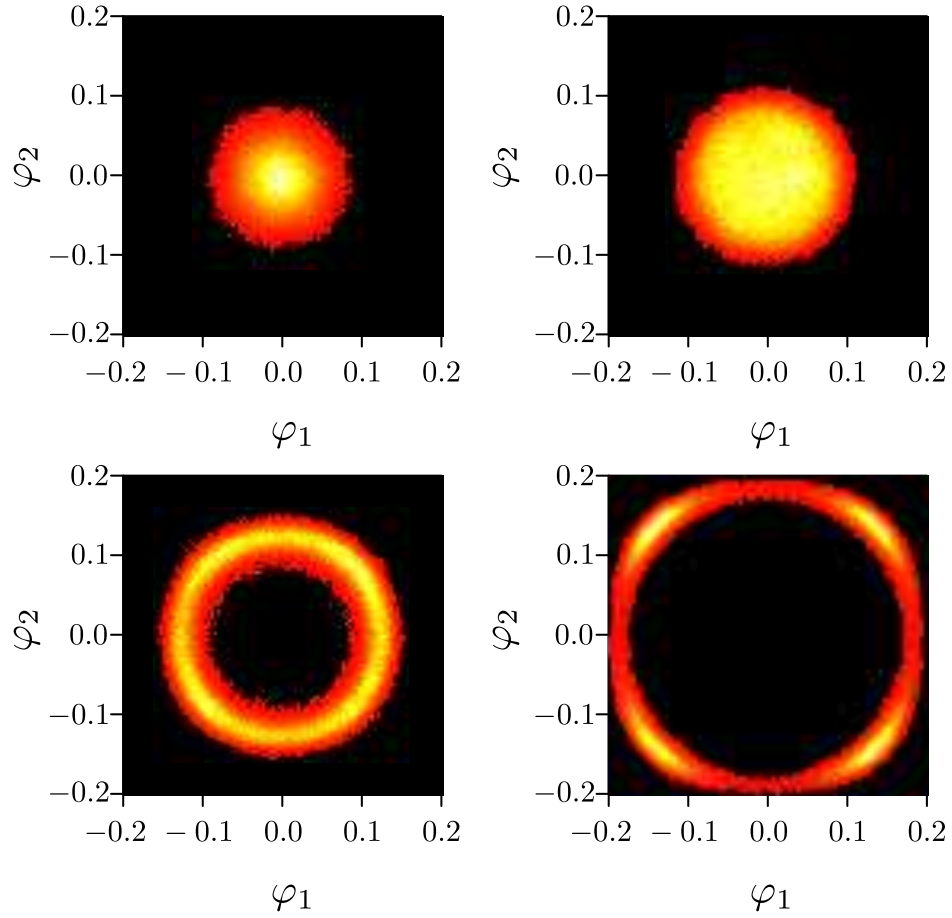


Figura 4.5: Distribución de probabilidades bidimensional de φ , $P(\varphi)$, para tamaño $L = 64$ y varios valores de J . 0.088 (panel superior, izquierdo), 0.0886 (panel superior, derecho), 0.091 (panel inferior, izquierda) and 0.096 (panel inferior, derecho).

se pueden encontrar en el diagrama de fases (Fig. 4.4) y el parámetro de orden φ permite observarlas.

En la figura 4.5 representamos la distribución bidimensional de φ para el tamaño $L = 64$ y varios valores de J . El panel superior de la izquierda se corresponde con la fase extendida y la distribución es aproximadamente una gaussiana bidimensional. El de la derecha se corresponde con un valor de J cercano al punto crítico J_c . Los paneles inferiores son para las dos fases localizadas, la fase $U(1)$ a la izquierda y la \mathbb{Z}_4 a la derecha. Es decir, la fenomenología asociada a la QDC parece reproducirse

en este modelo, al menos para tamaños pequeños.

Como queremos analizar los dos parámetros de orden por igual, fijamos nuestra atención en el módulo del parámetro φ , al que llamamos como $\mathcal{O}_\varphi \equiv |\varphi|$. En la figura 4.6, representamos los datos de los dos parámetros de orden, \mathcal{O}_s y \mathcal{O}_φ , en función de J para sistemas con diferentes tamaños. Cabe destacar que, conforme el tamaño del sistema aumenta, la pendiente de ambos parámetros de orden crece drásticamente cerca de la transición. Las curvas continuas son interpolaciones obtenidas mediante el método de los múltiples histogramas, Sec. 2.3.2. En el panel interior de la izquierda de la figura 4.6, representamos los valores de J^* en los que las derivadas de cada parámetro de orden presenta un extremo relativo y el punto en el que los dos parámetros de orden se cruzan. Los valores extrapolados de las tres estimaciones del punto crítico mediante J^* coinciden dentro de las barras de error (véase la tabla 4.1), lo que indica que es una única transición y los dos parámetros de orden están acoplados. En el panel de la derecha representamos el valor del parámetro de orden correspondiente a los puntos dibujados en el panel de la izquierda.

En caso de ser una transición de primer orden, queda claro por esta figura que no se trata de una de carácter fuerte, puesto que con los tamaños más grandes alcanzados no se observan fenómenos de histéresis ni una discontinuidad en el parámetro de orden. Si estamos ante una transición continua, los dos parámetros de orden deben seguir un comportamiento de escala del tipo

$$\mathcal{O} = L^{-\beta/\nu} f\left(L^{1/\nu}(J - J_c), L^{y_1}(J - J_c), \dots\right). \quad (4.5)$$

Como en el punto crítico la derivada del parámetro de orden presenta un extremo relativo, el punto $J^*(L)$ en el que se produce este extremo, para sistemas de tamaño finito L , tiende al punto crítico como $J^*(L) - J_c \sim L^{-1/\nu}$. Esto implica a su vez, que el parámetro de orden en este punto debe tender a cero como una ley de potencias con el exponente $L^{-\beta/\nu}$, más las correcciones correspondientes que provienen de los exponentes irrelevantes. De los datos en el panel interior de la derecha de la Fig. 4.6 obtenemos que $\beta/\nu = 0.23(3)$ para el parámetro de orden de los loops y $0.30(3)$ para el parámetro de orden de los nodos, mediante un ajuste a los tamaños $L \geq 200$.

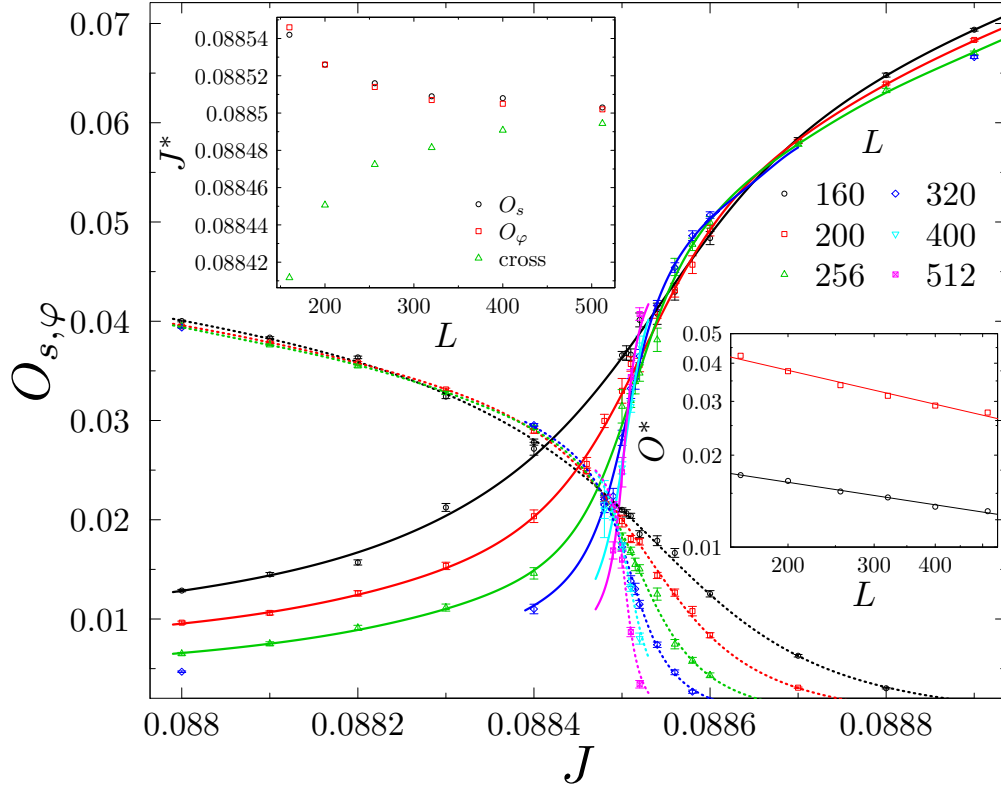


Figura 4.6: \mathcal{O}_s y \mathcal{O}_φ en función de J para varios tamaños. Las curvas continuas son interpolaciones usando el método de los múltiples histogramas. Panel interior izquierdo: valor de J en el cual el valor absoluto de la derivada del parámetro de orden presenta un máximo (círculos negros \mathcal{O}_s , cuadrados rojos \mathcal{O}_φ) y en el que los dos parámetros de orden se cruzan (triángulos verdes). Panel interior derecho: valor de los parámetros de orden en los puntos del panel izquierdo.

Ambos valores de β/ν son bastante similares y sorprendentemente pequeños, lo que produce el comportamiento abrupto observado en la Fig. 4.6 cerca del punto crítico. El valor absoluto del máximo o mínimo de las derivadas de los parámetros de orden respecto a J crece con el tamaño como $L^{(1-\beta)/\nu}$, como se puede obtener a partir de la Ec. (4.5). Mediante la caracterización de este comportamiento y el del parámetro de orden en el mismo valor de J^* , podemos dar estimaciones del valor de los tres exponentes independientes, $\beta_{s,\varphi}$ y ν (véase tabla 4.1), además de su dependencia de

forma efectiva con el tamaño, Fig. 4.22.

Ambos parámetros de orden dan valores compatibles entre sí para el exponente asociado a la longitud de correlación, ν , en consonancia con otros trabajos en este tipo de transiciones (Sandvik, 2007, 2010a; Harada *et al.*, 2013; Pujari *et al.*, 2013). En cambio y de forma similar a lo encontrado en estos trabajos, los valores de los dos exponentes $\beta_{s,\varphi}$ son diferentes, por lo que usamos los subíndices s y φ para diferenciarlos. El primer estudio directo de la transición parece indicar entonces, que tenemos una transición continua, en un caso límite muy abrupto, o una transición débilmente de primer orden, por lo que es necesario un análisis más refinado para poder establecer apropiadamente el carácter de la transición.

Usualmente, unas cantidades útiles para distinguir el tipo de transición son los parámetros de Binder asociados a los dos parámetros de orden B_s y B_φ y a la energía, este último lo presentamos en la sección 4.5. Encontramos entonces que en nuestro caso, B_φ es muy útil para determinar el punto crítico J_c asociado a φ y el exponente ν , en caso de tener carácter continuo. Aunque no parece mostrar ninguna señal de un posible carácter de primer orden. Por ser un parámetro de orden bidimensional, definimos el parámetro de Binder B_φ como

$$B_\varphi \equiv 2 - \frac{\langle \mathcal{O}_\varphi^4 \rangle}{\langle \mathcal{O}_\varphi^2 \rangle^2}. \quad (4.6)$$

En la figura 4.7 mostramos esta cantidad en función de J para varios L . En el panel interior mostramos los valores del máximo de la derivada dB_φ/dJ . En una transición continua, $B_\varphi = f_{B_\varphi}(L^{1/\nu}\delta J)$, por lo que el máximo de la derivada crece como $L^{1/\nu}$ en el punto crítico. Un ajuste a la forma $AL^{1/\nu}$ para los datos del panel interior proporciona el valor $\nu = 0.457(24)$. Este valor es totalmente compatible con el obtenido por el método anterior, véase la tabla 4.1.

El parámetro de Binder B_s permite obtener otra estimación del exponente ν , asociado al parámetro de orden de los loops, aunque la forma de la distribución de \mathcal{O}_s no permite obtener una estimación directa de J_c . Desafortunadamente, en la forma de este parámetro no observamos ninguna señal de una transición de primer orden. Sin embargo, el parámetro de Binder V_L para la energía es especialmente

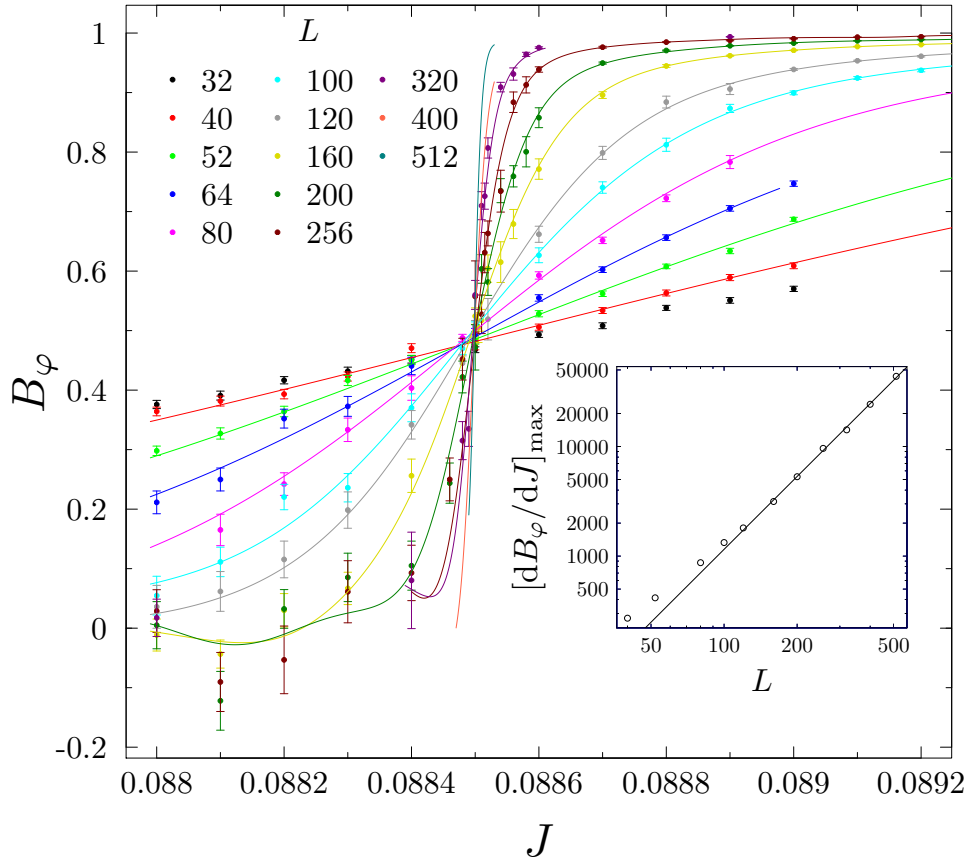


Figura 4.7: Parámetro de Binder B_φ frente a J para sistemas con tamaños de 32 a 512. Panel interior: valor del máximo de la derivada de B_φ respecto a J .

adecuado para dilucidar el carácter de la transición, véase la Sec. 4.5. Por otra parte, la experiencia en los modelos de loops anteriores nos indica que el número de curvas extendidas puede servir como parámetro para obtener estimaciones de ν de forma similar a los parámetros de Binder, además de ser sensible al carácter de la transición. Éste lo estudiamos en la siguiente sección.

Intentamos realizar el colapso de escala de todas estas cantidades hasta ahora definidas, sin embargo, éste es tremendamente difícil debido a la necesidad de incluir correcciones provenientes de términos irrelevantes que no son pequeñas. Para los dos parámetros de orden conseguimos dos escalados que se justifican sólo para los cuatro tamaños más grandes mostrados, y aún así, no queda claro si los errores

sistemáticos han sido totalmente controlados. Por ello, damos valores de los exponentes mediante las estimaciones más sencillas que podemos imaginar, en las que los errores sistemáticos sí que están controlados y se pueden observar en el cambio del exponente efectivo en cada ley de potencias. Por ejemplo, la pendiente de la curva en escala logarítmica mostrada en el panel interior de la Fig. 4.7 define un exponente efectivo $1/\nu_{\text{eff}}(L)$. El comportamiento de los exponentes efectivos se muestra en la figura 4.22 de la sección 4.7.

4.4.2. Número de curvas extendidas y longitud de correlación

Como indicamos en la sección 3.4, podemos distinguir entre curvas extendidas y curvas con índice topológico mayor que 1., pero consideramos que la diferencia entre ambas cantidades no es relevante para la discusión que hacemos a continuación. Más aun, en ambas cantidades vemos la misma fenomenología, con la diferencia de que el número de curvas extendidas alcanza valores mayores. Recordamos que la definición que damos para WN o n_w es el de número de curvas que cruzan la muestra desde un extremo a otro.

En la figura 4.8 representamos el valor del promedio del WN en función de J para sistemas con tamaños de 32 a 512. Los puntos son datos obtenidos desde la simulación y las líneas son interpolaciones mediante el método de los múltiples histogramas. Se puede observar que las curvas no se cruzan en un punto fijo. De hecho, los cruces se mueven hacia valores menores de J conforme el tamaño aumenta, convergiendo a un punto crítico J_c , mientras que el valor n_w^* en esos puntos aumenta sistemáticamente. Podríamos pensar que este aumento sistemático es producto de correcciones de tamaño finito, por la presencia de un exponente irrelevante, pero en un escenario así, el cambio debería decrecer conforme L aumentara. Diferentes intentos para cuantificar la dependencia del tamaño de este desplazamiento muestran la misma tendencia: el WN en la transición aumenta con el tamaño del sistema y no parece converger a un valor asintótico, aunque los valores observados son to-

avía pequeños, menores que 2. En el panel interior de la figura 4.8 presentamos los resultados de uno de estos análisis. Para cada tamaño, se representa el n_w^* en el valor de J^* en el que su derivada es mínima en función del tamaño L , en doble escala logarítmica. Este valor n_w^* aumenta con el tamaño del sistema y, para los tamaños mayores considerados, se comporta como $n_w^* \propto L^{0.43}$ (recta en el recuadro de la Fig. 4.8). Se obtienen resultados similares, por ejemplo, si se representan los valores de n_w en los que se cruzan las curvas de tamaños sucesivos frente a la media geométrica de los tamaños.

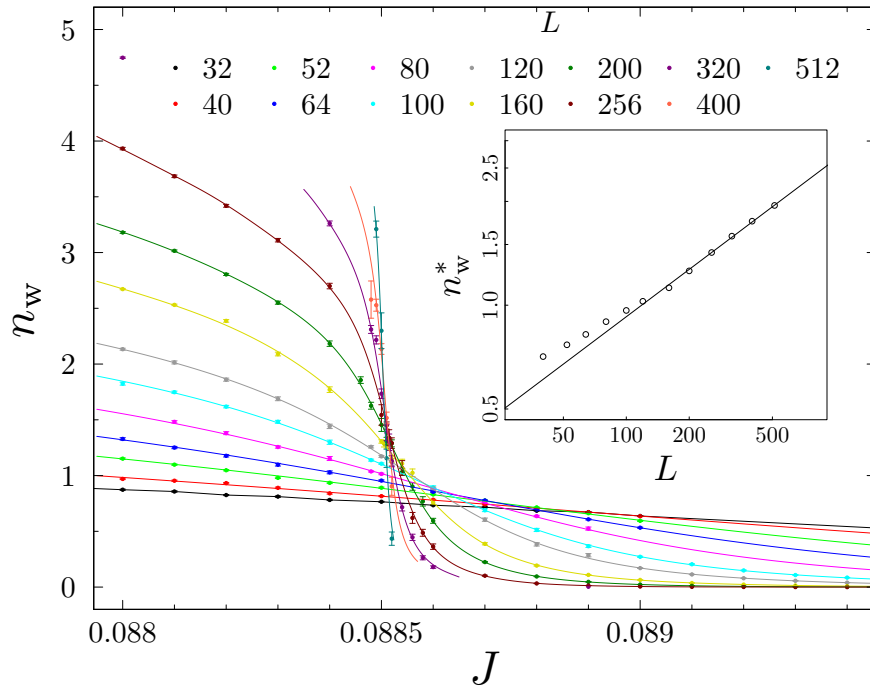


Figura 4.8: WN en función de J para varios tamaños. Panel interior: dependencia con el tamaño del WN en el valor de J en el que su derivada es mínima para cada tamaño. La línea recta se corresponde a una ley de potencias $L^{0.43}$.

Nótese que si estuviésemos ante una transición continua estándar, el WN en el punto crítico debería ser independiente del tamaño o tender a una constante con un exponente irrelevante, mientras que si estuviéramos ante una transición de

primer orden esta magnitud debería crecer linealmente con L (véase por ejemplo la figura 3.12 en Sec. 3.5.3). Intentamos también interpretar este comportamiento del n_w en términos de efectos de tamaño finito, mediante el intento del colapso de escala para estos datos, añadiendo un término proveniente de un exponente irrelevante. En todos los ajustes este exponente ($y_1 - 1/\nu$) tendía sistemáticamente a valores positivos, con lo que mostraba la posible presencia de un parámetro relevante y un cambio en el comportamiento, o la no analiticidad de la función de escalado (Kaul, 2011). Su interpretación puede realizarse de diferentes formas: una es que estamos, efectivamente, en un cambio de comportamiento del sistema, desde uno que se observa a tamaños pequeños a otro que será bien continuo con un WN crítico grande o bien primer orden; otra es que realmente este parámetro diverja con un exponente menor que el lineal, aunque no es sencillo encajar esta interpretación dentro de una teoría de campos estándar.

Un fenómeno similar se observa en los diferentes modelos en esta posible clase de universalidad. Por ejemplo en los llamados $J-Q$, Sandvik (2007, 2010b) encontraron que la rigidez (recordamos que está relacionada con el WN) en el punto crítico crece logarítmicamente con L . Se puede destacar un intento de explicar la divergencia logarítmica por Nogueira y Sudbø (2013) de la rigidez, en el que se predice un salto universal en el punto crítico. Resultados similares se encuentran en modelos $J_1 - J_2$ (Kaul y Sandvik, 2012), o en modelos de dimeros (Pujari *et al.*, 2013). El tamaño lateral considerado en estos trabajos es en todos estos casos menor que el tamaño considerado aquí, y para rangos de tamaños pequeños también vemos una dependencia menor que $L^{0.43}$ para el n_w .

Para ampliar el análisis del n_w en el punto crítico y su posible divergencia, representamos en la Fig. 4.9 su función de distribución, es decir, la probabilidad $P_k(J_c)$ de que una configuración tenga exactamente k curvas extendidas en función de k para diferentes tamaños L . En acuerdo con el comportamiento observado en la media, conforme L aumenta la distribución tiende a valores mayores de k , ensanchándose y disminuyendo su altura. En el panel interior representamos los mismos datos que en el principal, en escala logarítmica. Esta representación permite observar el

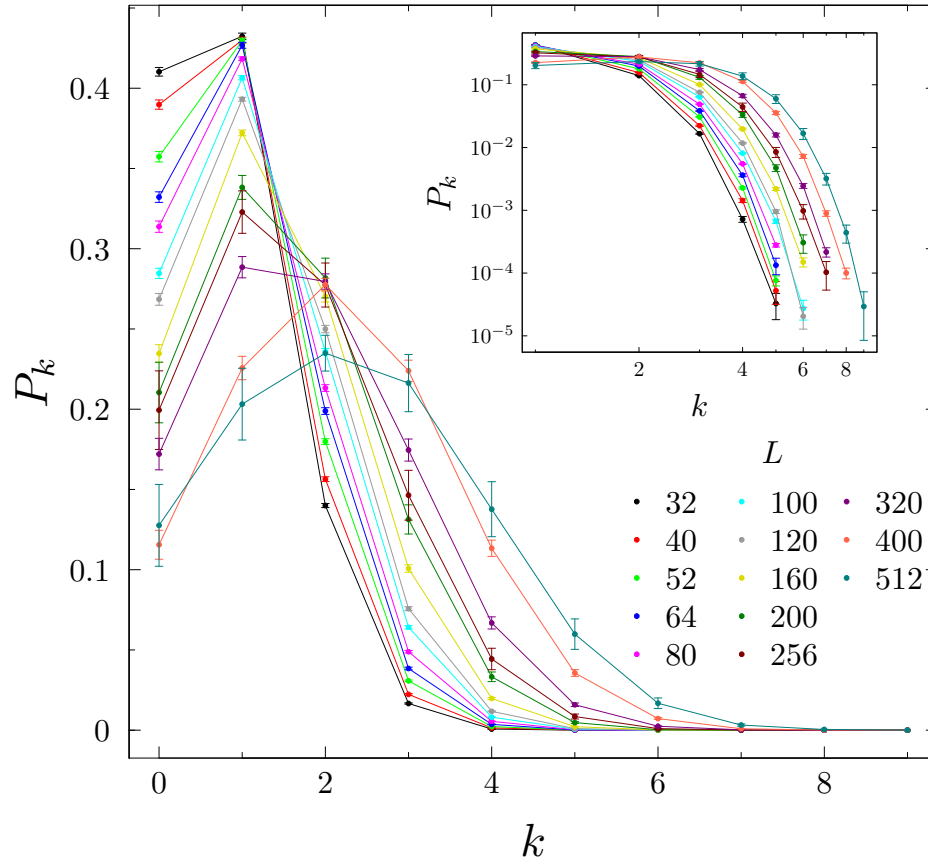


Figura 4.9: Distribución P_k del WN en función de k para diferentes valores de L . Panel interior: los mismos datos en escala doble logarítmica.

comportamiento de las colas de la distribución, que un análisis simple indica que se desplazan de forma $L^{0.2}$. Esto parece un indicio de que toda la distribución del WN se mueve y no es sólo un artificio del promedio, por lo que parece que este valor puede seguir aumentando, por lo menos en los tamaños más cercanos a los simulados. Se puede representar una forma alternativa de la distribución $P_k(J)$, fijando el valor de P_0 en lugar del valor de $J = J_c$. Esto produce un resultado similar y se mantiene el mismo tipo de comportamiento.

La analogía con las transiciones de Anderson para el modelo $n = 1$, nos indica que otra alternativa para analizar los datos del WN es a través de la conductividad σ . En la fase extendida, el WN crece linealmente con L para tamaños mayores que

la longitud de correlación, debido al carácter browniano de los loops. La expresión de escala del $n_w = f_{n_w}(L^{1/\nu}\delta J)$ implica que la constante de proporcionalidad proporciona una definición de la longitud de correlación, $n_w(J, L) = L/\xi(J)$. En la analogía con transiciones metal-aislante, en la fase extendida hay ley de Ohm, y la constante de proporcionalidad de la conductancia con el tamaño lateral L es la propia conductividad $\sigma = \xi^{-1}$.

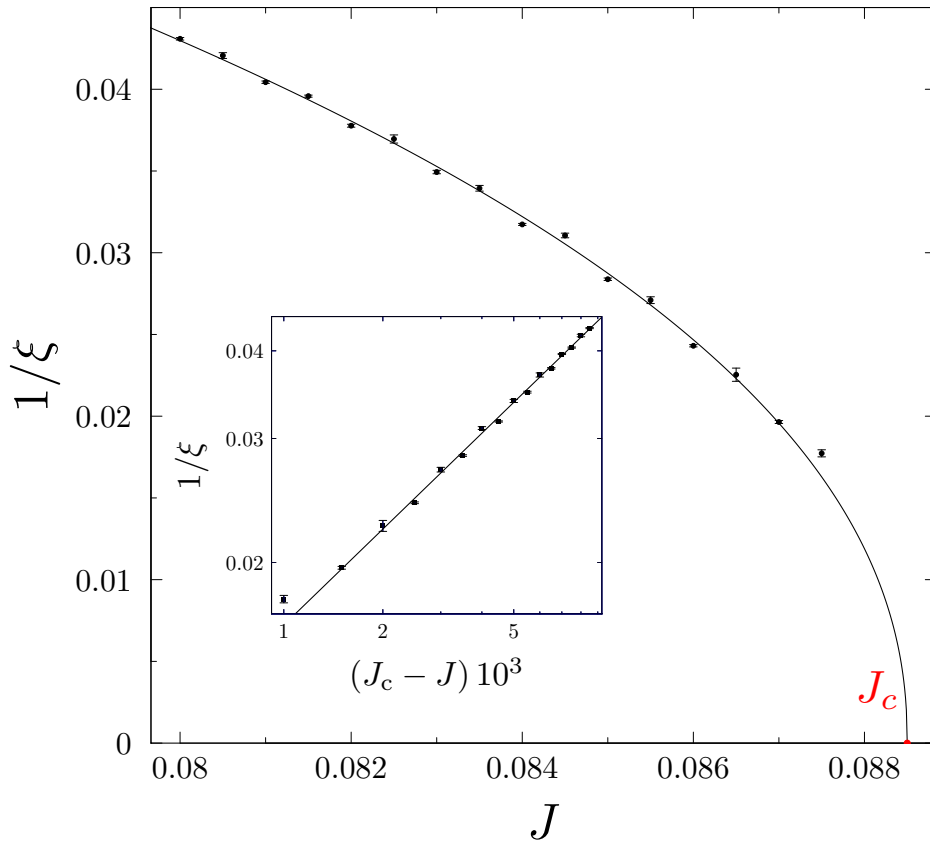


Figura 4.10: Inversa de la longitud de correlación en función de J . En el panel interior se muestran los mismos datos frente a $J_c - J$ en doble escala logarítmica.

En la Fig. 4.10 representamos la inversa de la longitud de correlación ξ^{-1} en función de J , en la fase extendida. En el panel interior, representamos estos mismos datos frente a $J_c - J$ en escala doble logarítmica para apreciar la ley de potencias en el comportamiento crítico. La longitud de correlación define el exponente crítico

ν mediante la ley de potencias $\xi \sim |J_c - J|^{-\nu}$, y el ajuste de los datos produce un exponente $\nu = 0.453(10)$.

4.4.3. Fallo del escalado sin parámetros libres

Otra posible ruta para distinguir el carácter de la transición es mediante la representación de algunas magnitudes, como la probabilidad $P_k(J, L)$ definida en la sección anterior, en función de una variable de escala, en este caso el promedio de $n_w(J, L)$. Como en el caso del modelo de loops CPL tridimensional, Sec. 3.5.3, si estamos ante una transición continua estas curvas deberían colapsar en una sólo, mientras que en caso contrario, los datos para diferentes tamaños no se superpondrían y habría una variación lineal con el tamaño cerca de la región de coexistencia.

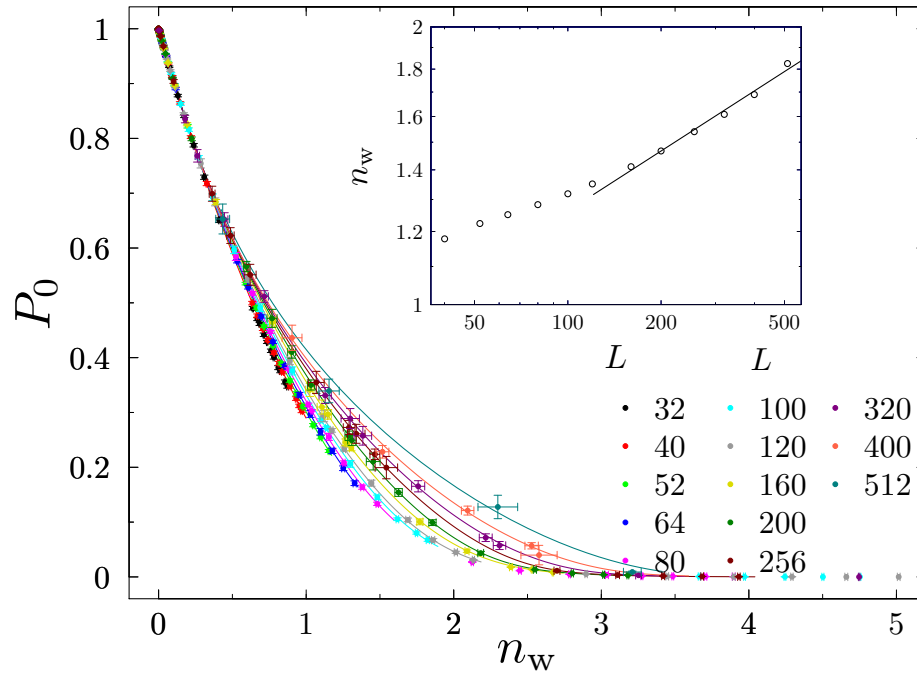


Figura 4.11: Datos para la probabilidad $P_0(J)$ de que una configuración no tenga curvas con índice topológico mayor que cero en función del promedio $n_w(J)$ del WN. Panel interior: dependencia con el tamaño del promedio del WN cuando $P_0(J) = 0.2$ en doble escala logarítmica.

En la Fig. 4.11 presentamos una de estas gráficas para $k = 0$. Queda claro que los datos no se superponen, por lo que en el caso de ser una transición de segundo orden, los efectos de tamaño finito no son insignificantes. Para comprobar si el comportamiento es el esperado para una transición de primer orden, representamos en el panel interior de la Fig. 4.11 el valor de $n_w(J)$ en el corte horizontal $P_0(J) = 0.2$ frente a L en doble escala logarítmica, obtenido mediante el método de los múltiples histogramas. En efecto, a este valor de P_0 , $n_w(J)$ crece con el tamaño del sistema, pero es significativo que lo hace mucho más lentamente que el comportamiento lineal. La línea recta que ajusta los datos para tamaños mayores se corresponde con $n_w \propto L^{0.21}$. Cabe destacar que el valor del exponente no es muy fiable, puesto que el rango ajustado es pequeño y cambia ligeramente con la elección del corte en P_0 , aunque es siempre claramente menor que la unidad.

En una transición de primer orden entre una fase localizada y otra extendida, la región de coexistencia para la representación de P_0 frente a n_w se correspondería con una línea recta con pendiente inversamente proporcional a L . Por ejemplo, en el modelo de loops no interactuante con $n = 4$, donde determinamos que el carácter de la transición era primer orden, el n_w parece mostrar una dependencia lineal con el tamaño para P_0 constante. Por otra parte, algo que también mostramos en este modelo era P_1 , donde veíamos que su máximo decrecía con el tamaño, figura 3.17. Para el rango de valores considerado ahí, el comportamiento es lineal en L .

En la Fig. 4.12 representamos la probabilidad de tener una única curva extendida $P_1(J)$ en función de $n_w(J)$ para varios tamaños. Otra vez, los datos deberían colapsar en una única curva si la transición de fase fuese continua, mientras que deberían tender a cero para una de primer orden, de forma similar al caso no interactuante con $n = 4$. Queda patente que no se produce la superposición de los datos, y parecen ir a cero conforme L aumenta. En el panel interior de la Fig. 4.12, se representa el valor máximo de $P_1(J)$ para cada L en función de L en doble escala logarítmica. La pendiente del ajuste a una línea recta es 0.17, otra vez un comportamiento sublineal, y similar al caso P_0

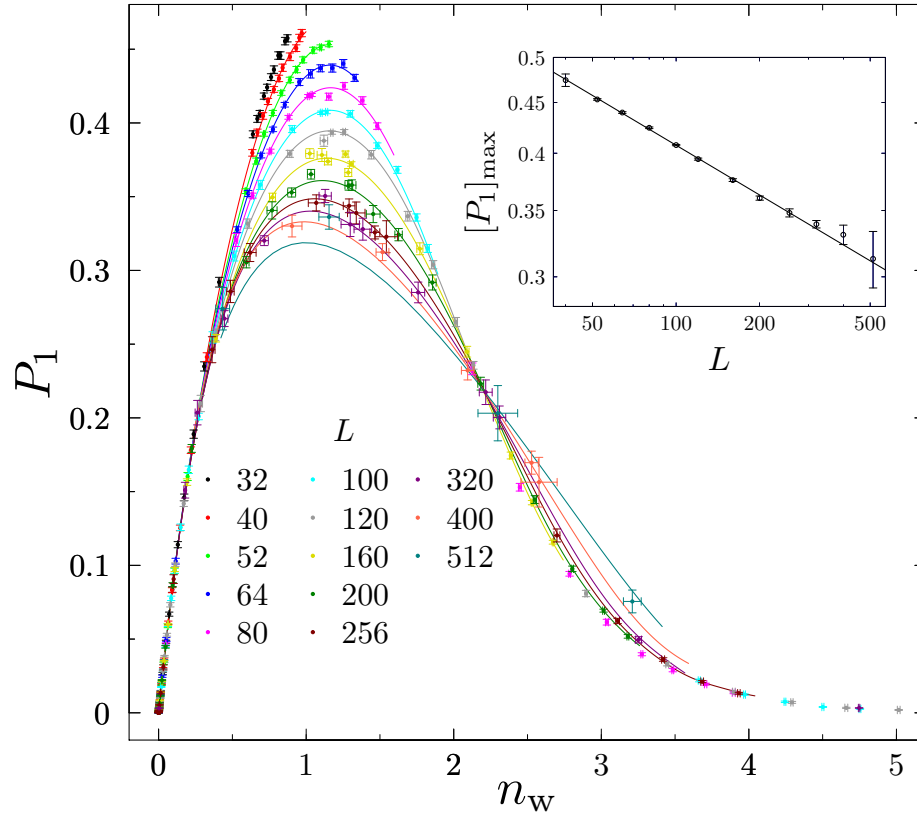


Figura 4.12: $P_1(J)$ en función del promedio $n_w(J)$ de curvas extendidas para sistemas de diferentes tamaños. Panel interior: dependencia con el tamaño del valor del máximo en $P_1(J)$ para cada tamaño en doble escala logarítmica.

4.4.4. Susceptibilidades

La susceptibilidad es otra cantidad, definida en general como la varianza del parámetro de orden, que permite obtener los exponentes críticos en caso de ser una transición continua. Para el parámetro de orden de los loops, ya dimos la definición en 3.4,

$$N\chi_s = \sum_{s=0}^{L^3} s^2 n_{\text{loc}}(s), \quad (4.7)$$

Para el parámetro de orden de los nodos, podemos definir la siguiente susceptibilidad

$$\chi_\varphi = \text{var}(|\varphi|). \quad (4.8)$$

En una transición continua, ambas deberían comportarse de acuerdo a su relación de escala (3.5), donde

$$\chi = L^{\gamma/\nu} f_\chi(L^{1/\nu}(J - J_c), L^{y_1}(J - J_c), \dots). \quad (4.9)$$

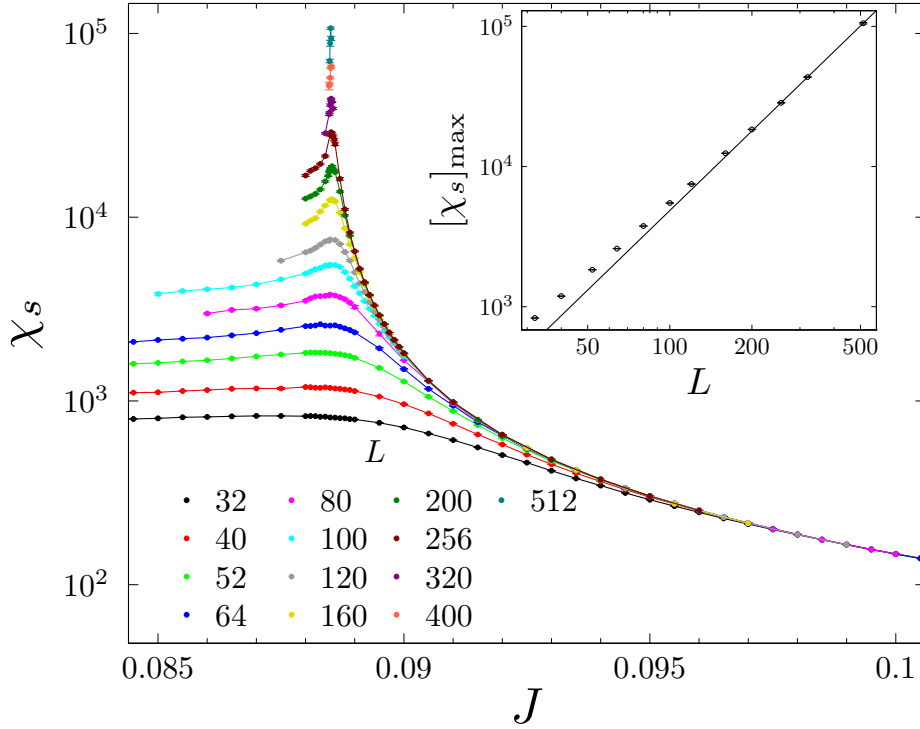


Figura 4.13: Susceptibilidad χ_s para el parámetro de orden de los loops en función de J para sistemas de tamaños diferentes. En el panel interior se muestra el máximo de la susceptibilidad en función del tamaño y en doble escala logarítmica.

En la Fig. 4.13 presentamos los datos de la susceptibilidad asociada al parámetro de orden de los loops, χ_s . El panel interior muestra el máximo de esta susceptibilidad frente a L y proporciona una estimación del exponente $\gamma/\nu = 2 - \eta$. El ajuste produce $\eta_s = 0.116(3)$. Este exponente, no parece estar en acuerdo con la estimación obtenida desde el parámetro de orden de los loops, véase tabla 4.1. Empieza aquí una serie desacuerdos entre las dimensiones anómalas obtenidas mediante las relaciones

de *hyperscaling* para β , γ y las obtenidas desde las correlaciones. Si se intenta obtener directamente mediante la varianza de la distribución del parámetro de orden \mathcal{O}_s parece que obtenemos resultados compatibles, pero en este caso resulta difícil el análisis debido a la forma de su distribución.

También presentamos la susceptibilidad para el parámetro de orden asociado a los nodos, χ_φ , Fig. 4.14. El máximo de esta susceptibilidad sigue una ley de potencias, resultados que se muestran en el panel interior de la figura, y el ajuste produce el resultado $\eta_\varphi = -0.35(10)$. En este caso, sí que coincide con el obtenido desde el parámetro de orden, como puede verse en la tabla 4.1, aunque ambos resultados son sorprendentes dado que dimensiones anómalas negativas están por debajo de los límites que marca la teoría de campos.

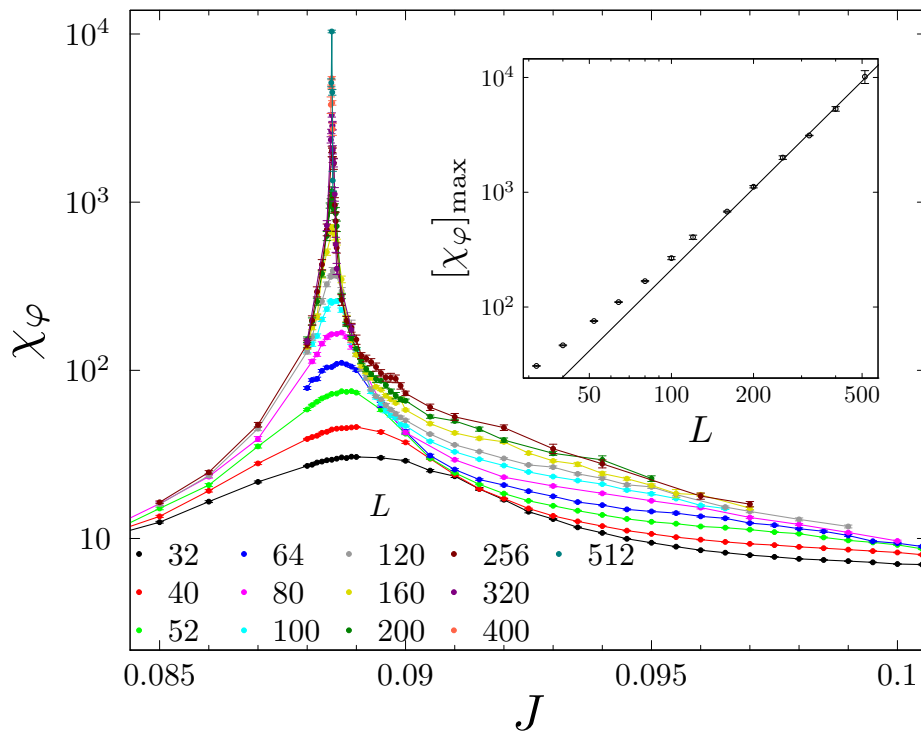


Figura 4.14: Susceptibilidad χ_φ en función de J para varios tamaños. En el panel interior se representan el máximo de la susceptibilidad en función del tamaño del sistema, en doble escala logarítmica.

4.4.5. Dimensión fractal y correlaciones

Otra vía para obtener los valores de las dimensiones anómalas es mediante el cálculo de las funciones de correlación, y de forma equivalente, mediante la dimensión fractal de los loops. Éstas son estimaciones directas de la dimensión anómala, bien por definición, bien por una relación directa con la dimensión fractal (Saleur y Duplantier, 1987; Kondev y Henley, 1995). Para obtener esta última calculamos el promedio del cuadrado de la distancia euclídea entre dos puntos $\langle R^2(l) \rangle$ de un loop en función de la longitud que recorre el loop l , entre esos dos puntos. Estas dos escalas de longitud, están relacionadas mediante la definición de la dimensión fractal $\langle R^2 \rangle \propto l^{2/d_f}$. En el cálculo, guardamos esta información para longitudes menores que $1/3$ de la longitud total del loop considerado. En la Fig. 4.15 se representa $\langle R^2 \rangle$ frente a la longitud del loop en doble escala logarítmica para sistemas con tamaños diferentes. Se puede observar que los resultados se superpone bastante bien y la dimensión fractal parece ser independiente del tamaño del sistema. De un ajuste a una ley de potencias, obtenemos el valor $d_f = 2.31(3)$, que implica un valor muy grande para el exponente anómalo $\eta_s = 2d_f - d = 0.38(6)$. Para comprobar cualquier posible tendencia de la dimensión fractal conforme aumenta el tamaño, representamos en el panel interior derecho la dimensión fractal efectiva frente a $\langle R \rangle$ para los diferentes valores de L . Ésta se calcula mediante la pendiente del ajuste de $\ln \langle R^2 \rangle$ en función de $\ln l$ para un pequeño rango de valores de l . A pesar de que puede haber ruido, no se aprecia ninguna tendencia sistemática.

También calculamos la dimensión anómala mediante la distribución de longitudes de los loops en el punto crítico, $P(l)$ que es la misma cantidad que el número de loops $n(l)$ de longitud l apropiadamente normalizada, con constante de normalización $(2N)^{-1}$. Una representación de esta distribución, hecha con cajas en escala logarítmica, se muestra en el panel interior izquierdo de la figura 4.15. El exponente que caracteriza la distribución es $P(l) \propto l^{-\tau}$, relacionado con la dimensión anómala como $\tau = (11 - \eta)/(5 - \eta)$ (Nahum *et al.*, 2011). El hecho de que se usen cajas logarítmicas implica que la curva obtenida sigue la ley $\tilde{P}(l) \sim l^{1-\tau}$. De aquí obtenemos una dimensión anómala de $\eta_s = 0.32$, aunque los errores son difíciles de estimar,

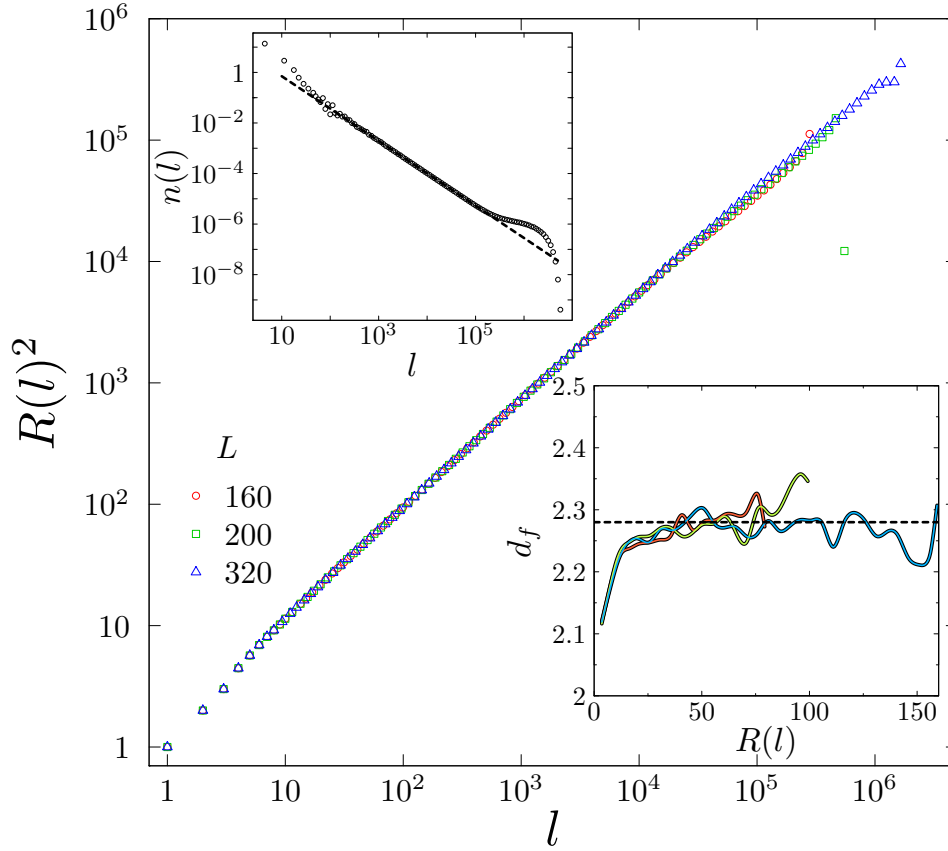


Figura 4.15: Distancia de punta a punta en función de la longitud en doble escala logarítmica para sistemas de diferentes tamaños, cerca del punto crítico. Panel interior izquierdo: distribución de longitudes de los loops en doble escala logarítmica. Panel interior derecho: dimensión fractal efectiva de los datos del panel principal frente a la distancia punta a punta.

resulta compatible con lo obtenido desde la dimensión fractal. Sin embargo, ambas estimaciones son incompatibles con las dadas por el parámetro de orden \mathcal{O}_s o su susceptibilidad, véase tabla 4.1.

Dados estos desacuerdos, resulta interesante obtener la correlación para el parámetro de orden de φ , que podemos definir como la correlación espín-espín para nodos de una misma subred,

$$C_\varphi(r) = \langle \sigma(r)\sigma(0) \rangle - \langle \sigma(0) \rangle^2 . \quad (4.10)$$

Para calcularla, como las tres direcciones del espacio son iguales, nos fijamos en el plano YZ . Para cada nodo de este plano, calculamos su correlación con los nodos que comparten el mismo eje X , que son segundos vecinos en su subred. En el punto crítico y para un sistema de tamaño finito, esta correlación debe tender a cero como una ley de potencias de la forma $C_\varphi(r) \sim r^{-1-\eta}$, por definición de la dimensión anómala. Esta función de correlación se muestra en la figura 4.16 en doble escala logarítmica, donde la representamos para varios tamaños. A pesar de que las fuentes de error (como la magnetización promedio) hacen que no coincidan plenamente las tres curvas, los exponentes obtenidos son similares. Esperamos que al reducir las barras de error estas coincidan. En estos casos, la dimensión anómala que se obtiene mediante el ajuste a una línea recta del tamaño mayor es $\eta_\varphi = 0.32(6)$. Aunque la presencia de ruido no permite asegurarlo, no parece que esta dimensión anómala tenga efectos de tamaño finito apreciables. Vemos, que al igual que la obtenida para el parámetro de orden de los loops, hay desacuerdo con las estimaciones de \mathcal{O}_φ y χ_φ .

Resulta curioso que estas funciones de correlación no muestre el cambio de comportamiento que se observa en el resto de magnitudes, aunque es posible que estos efectos sí que estén presentes pero sean mucho menores. En cualquier caso, estamos ante una situación donde las relaciones de hyperscaling entre los exponentes γ y β y la dimensión anómala fallan, al menos para el rango de tamaños simulados. La violación del hyperscaling parece estar relacionado de forma directa con el comportamiento divergente del WN, tal y como analizaba Kaul (2011). Si este comportamiento sub-lineal se mantiene para tamaños macroscópicos no estaríamos ante una transición de primer orden, pero las relaciones de escalado se verían modificadas. Esto lo consideraremos con un poco más de detalle en la sección 4.7.

4.5. Distribución de la energía

Dado que mediante la caracterización del parámetro de orden y cantidades relacionadas no hemos sido capaces de dilucidar el carácter de la transición, proseguimos

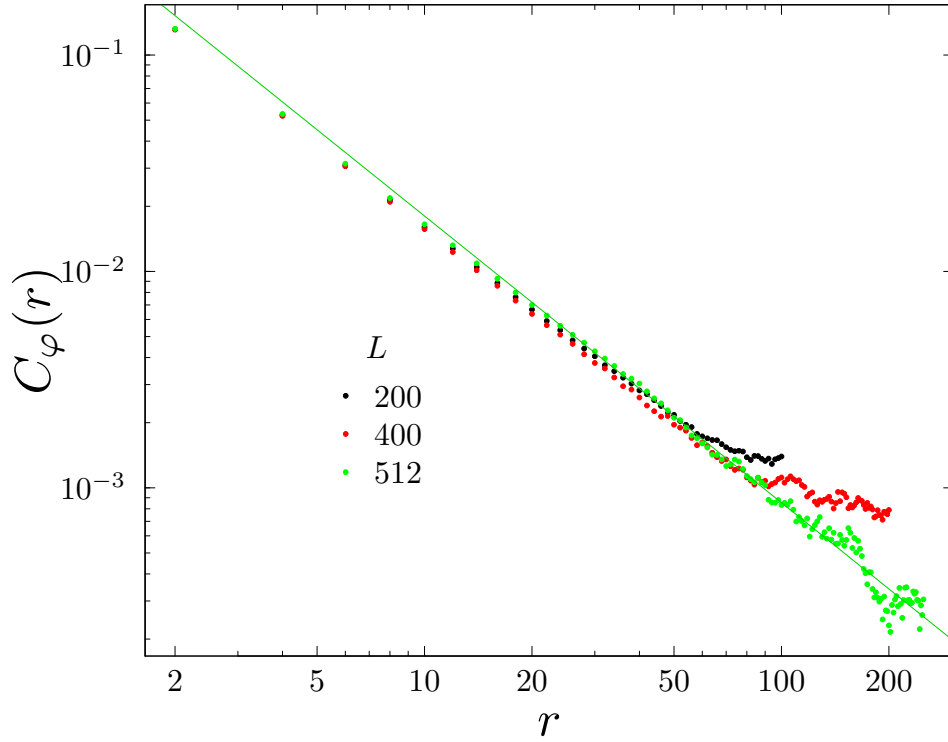


Figura 4.16: Función de correlación C_φ del parámetro de orden φ , para sistemas de diferentes tamaños. La línea recta se corresponde al ajuste de la correlación del tamaño $L = 512$ a la forma $r^{-1.32(6)}$.

con las indagaciones mediante el estudio de la energía y su distribución. Una de las formas estándar para caracterizar una transición es mediante el cálculo del parámetro de Binder de la energía V_L (Challa *et al.*, 1986), o una redefinición del mismo como la que dimos en el capítulo 1,

$$\mathcal{V} \equiv \frac{1}{3} \left(\frac{\langle E^4 \rangle}{\langle E^2 \rangle^2} - 1 \right). \quad (4.11)$$

donde E es la magnitud análoga a la energía definida mediante el factor de Boltzmann de la función de partición (4.2),

$$NE = -J \sum_{\langle i,j \rangle_2} \sigma(i)\sigma(j). \quad (4.12)$$

En la figura 4.17 está representada la distribución de la energía en $J_c = 0.0885$ para sistemas de diferentes tamaños. Para los dos mayores es posible distinguir

una incipiente estructura bimodal, pero con una separación entre máximos que es todavía del orden de las anchuras. Por otra parte, la anchura total de la distribución en el punto crítico decrece conforme aumenta el tamaño del sistema, lo cual no es consistente con una transición de primer orden. En el panel interior se muestra la distribución de energías para varios valores de J muy cerca de la región crítica, para el tamaño $L = 512$. Por ejemplo, en las simulaciones de Kuklov *et al.* (2006, 2008) es posible observar más claramente esta estructura bimodal, para sistemas con tamaños mucho más pequeños y, evidentemente, los autores interpretan esto como una señal clara de una transición de primer orden. Sin embargo, el error en las estimaciones implican que estas conclusiones podrían ser precipitadas.

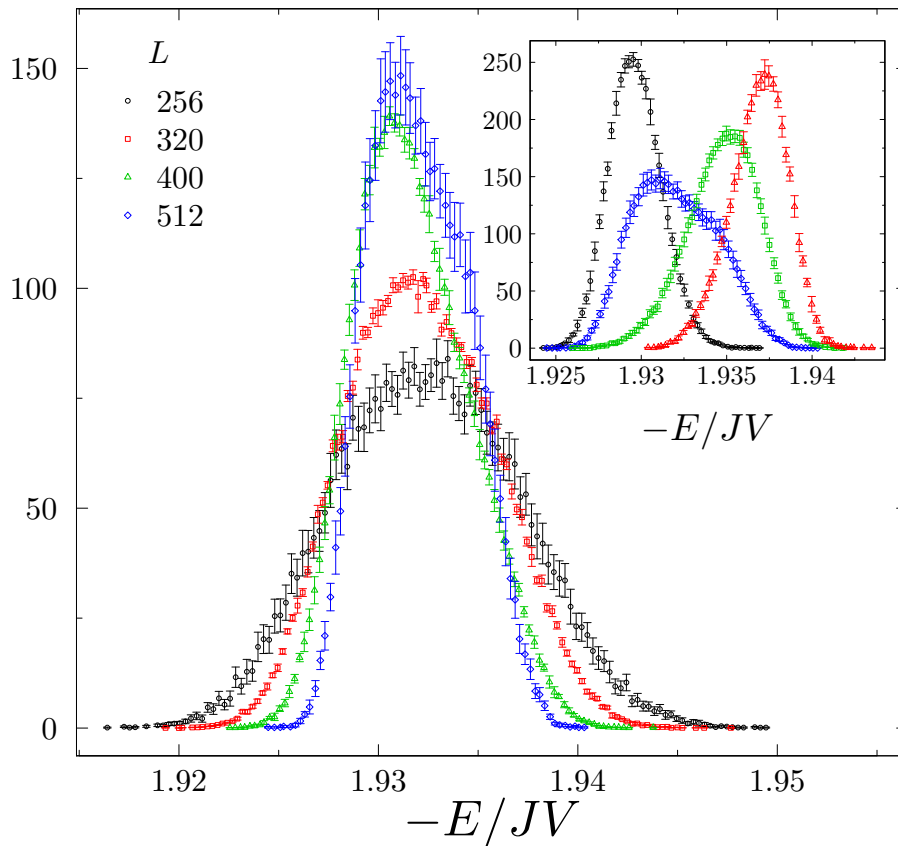


Figura 4.17: Función de distribución de energía en el punto crítico para varios tamaños en $J = 0.08850$. Panel interior: distribución de energías para en varios J para el tamaño $L = 512$.

Un análisis más cuantitativo depende del cálculo de \mathcal{V} según la definición 4.11. En el panel interior derecho de la Fig. 4.18 se representan los datos en bruto de \mathcal{V} en función de J en escala semi-logarítmica para varios tamaños. Para sistemas de tamaño finito, \mathcal{V} presenta un máximo cerca de la transición. Conforme el tamaño aumenta, el valor de este máximo se anula en una transición continua con una ley de potencias de la forma $\mathcal{V} \sim L^{-3+\alpha/\nu}$. En cambio, en una transición de primer orden el máximo tiende a una constante no trivial, relacionada con el calor latente, debido al carácter bimodal de la distribución de energías correspondiente a la región de coexistencia. Usamos el método de los múltiples histogramas para determinar el máximo y caracterizar este parámetro.

En el panel interior izquierdo de la Fig. 4.18 presentamos el máximo de \mathcal{V} en función del tamaño del sistema en doble escala logarítmica. El comportamiento esperado en una transición continua es una línea recta, sin embargo, los datos de los tamaños grandes se desvían sistemáticamente del comportamiento de los pequeños. Por otra parte, en una transición de primer orden estas curvas deberían saturar en un valor dado al que deberían tender con la inversa del volumen. Una posibilidad para el análisis de este comportamiento es substraer una posible contribución del fondo, para dejar expuesta la contribución crítica. Lejos de la transición, el parámetro \mathcal{V} se anula de forma proporcional L^{-3} , como se puede obtener de forma exacta de una distribución gaussiana. El panel interior derecho de la figura 4.18 nos sugiere modelar esta constante de proporcionalidad como una línea recta en esta escala semi-logarítmica (e^{aJ+b}). Este comportamiento extrapolado a los puntos donde \mathcal{V} es máximo para los diferentes tamaños proporciona el valor del fondo a substraer al parámetro, redefinimos $[\tilde{\mathcal{V}}]_{\max} = [\mathcal{V}]_{\max} - \mathcal{V}_{\text{fondo}}(J^*)$. El valor del fondo para los tamaños mayores lo extraemos extrapolando el comportamiento del fondo en el mismo J , dado el excelente acuerdo con el comportamiento $\mathcal{V}_{\text{fondo}}(J) \sim L^{-3}$. En el panel principal de la figura 4.18 representamos los mismo datos que en el panel interior izquierdo con la contribución del fondo substraída y vemos como los datos siguen una ley de potencias. Nótese que este procedimiento es similar al ajuste a dos leyes de potencias, de la forma $AL^{-3} + BL^{-x}$, que mostramos como línea

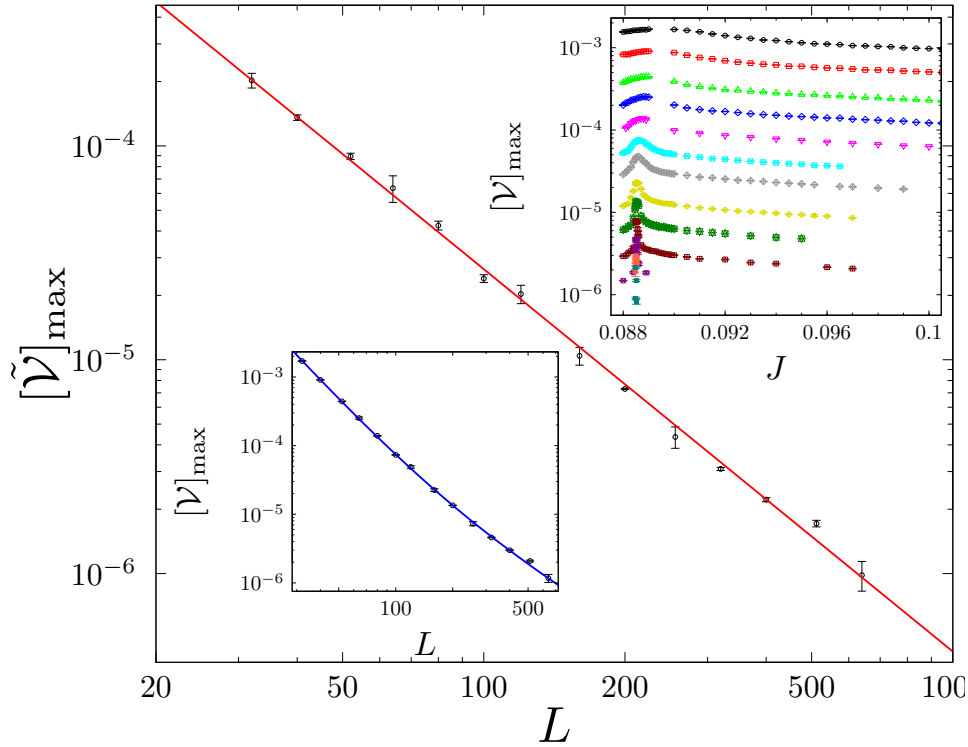


Figura 4.18: $[\tilde{\mathcal{V}}]_{\max}$ (definido en el texto) en función del tamaño del sistema en doble escala logarítmica. La curva continua es un ajuste a los datos de la forma AL^{-x} . Panel interior derecho: parámetro \mathcal{V} en función de J en escala semi-logarítmica para varios valores de L . Panel interior izquierdo: el máximo del parámetro \mathcal{V} en función de L . La curva continua se corresponde con un ajuste $AL^{-3} + BL^{-x}$.

continua (azul) en el panel interior de la figura 4.18. El exponente que obtenemos $x = 1.70(12)$ concuerda con la ley de potencias representada en el panel principal que proporciona un exponente $1.79(6)$. Estos dos exponentes se corresponden con valores de $\nu = 0.466(12)$ y $\nu = 0.475(6)$ respectivamente. Nótese que a pesar de que varios puntos quedan fuera del ajuste, los errores sistemáticos cometidos al calcular la contribución de fondo puede llegar a justificar esto. También probamos un ajuste del valor $[\mathcal{V}]_{\max}$ con dos exponentes independientes, y el mayor sale cercano a 3, aunque por debajo.

Este análisis parece indicar que quitar la contribución del fondo ayuda a ver lo que podría ser el comportamiento crítico. En concreto permite la observación de un comportamiento independiente del tamaño, algo que hasta ahora sólo habíamos podido observar directamente en las correlaciones. En cualquier caso, demuestra que en caso de ser una transición de primer orden, el comportamiento del parámetro de binder \mathcal{V} no parece ajustarse a lo que usualmente se espera en una de esta clase.

Si hubiese una región de coexistencia entre una fase extendida y una fase localizada, deberíamos de ser capaces de distinguir la existencia de dos contribuciones separadas en la distribución, conforme el sistema aumenta. Ajustamos las funciones de distribución en el punto crítico ($J_c = 0.0885$) como la suma de dos gaussianas, y observamos la separación en energía Δ entre las dos contribuciones y la desviación estándar δ_i , de cada una de las dos gaussianas que ajustaban la distribución de energías, en función de L a doble escala logarítmica. El procedimiento para el ajuste aunque es estable y se justifica frente a alternativas como usar una única gaussiana o la suma de tres, al ser la anchura de una de las contribuciones muy grande resulta peligroso. Los resultados de este análisis además no eran satisfactorios por lo que recurrimos a otro análisis más cuantitativo. Estas mismas señales deberíamos ser capaces de observarlas en el cuarto momento de la distribución. Dado que el parámetro de binder no parece indicarlo, usamos una redefinición de la *kurtosis* (1.8), que dimos en el capítulo 1:

$$\mathcal{B} = \frac{\langle [E - \langle E \rangle]^4 \rangle}{\langle [E - \langle E \rangle]^2 \rangle^2} - 1. \quad (4.13)$$

Se puede observar el comportamiento de su mínimo frente a $1/L$ en la figura 4.19. Resulta difícil decidir el comportamiento de este parámetro cuando L tiende a infinito, pero parece difícil que este vaya a cero. Por otra parte una representación del mismo frente a $L^{-1/\hat{\nu}}$ donde $\hat{\nu}$ es la mejor estimación que obtenemos del exponente crítico ν , Sec. 4.7, se puede observar en el panel interior de la figura 4.19. Con esta representación parece difícil también que este parámetro tienda a 0.

Otra característica de la energía que podemos estudiar es el calor específico, definido como la varianza de la energía por unidad de volumen. Éste es claramente

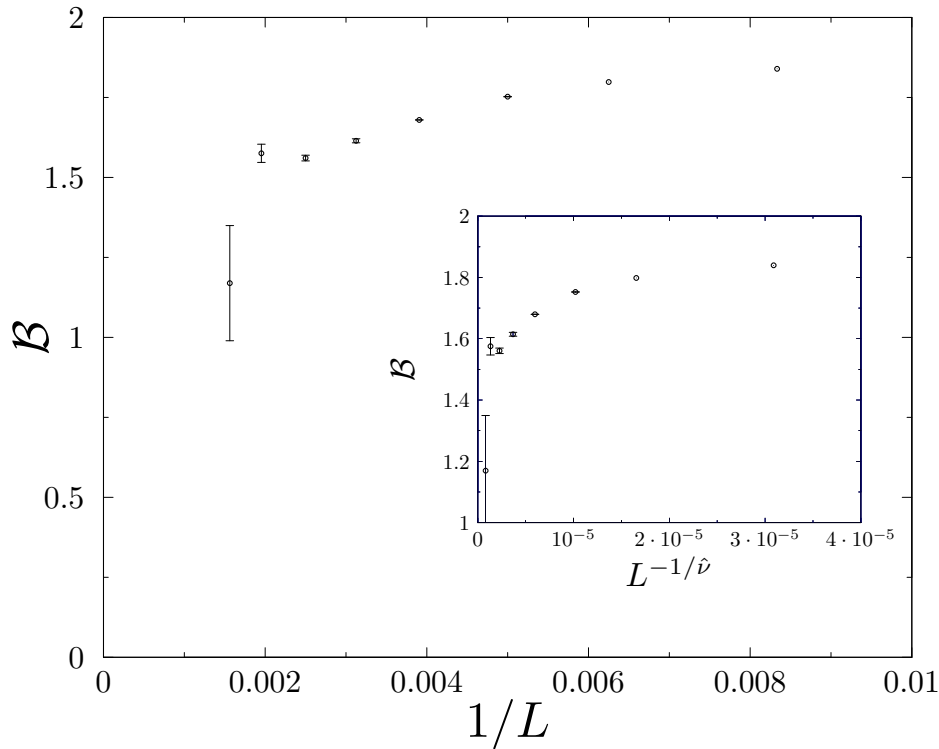


Figura 4.19: Separación de la energía y desviación estándar de las dos gaussianas cuya suma ajusta la función de distribución de la energía en el punto crítico en función de L en doble escala logarítmica.

divergente, y en el punto crítico crece como $L^{\alpha/\nu}$. En la Fig. 4.20 se muestra este calor específico frente a J para sistemas de diferentes tamaños. En el panel interior, se representa el máximo del calor específico en función de L en doble escala logarítmica, y se puede observar que su comportamiento depende dramáticamente con el tamaño. Siguiendo las mismas motivaciones que para el parámetro de Binder, podemos quitarle una constante asociada a un fondo suave. La línea de un ajuste a una ley de potencias más una constante se representa en azul y el valor del exponente crítico asociado mediante hyperscaling $\alpha = 2 - d\nu$ es $\nu = 0.435(15)$. Podemos obtener también una estimación directa mediante un ajuste a los tamaños mas grandes, que se corresponde con el valor de $\nu = 0.483(22)$.

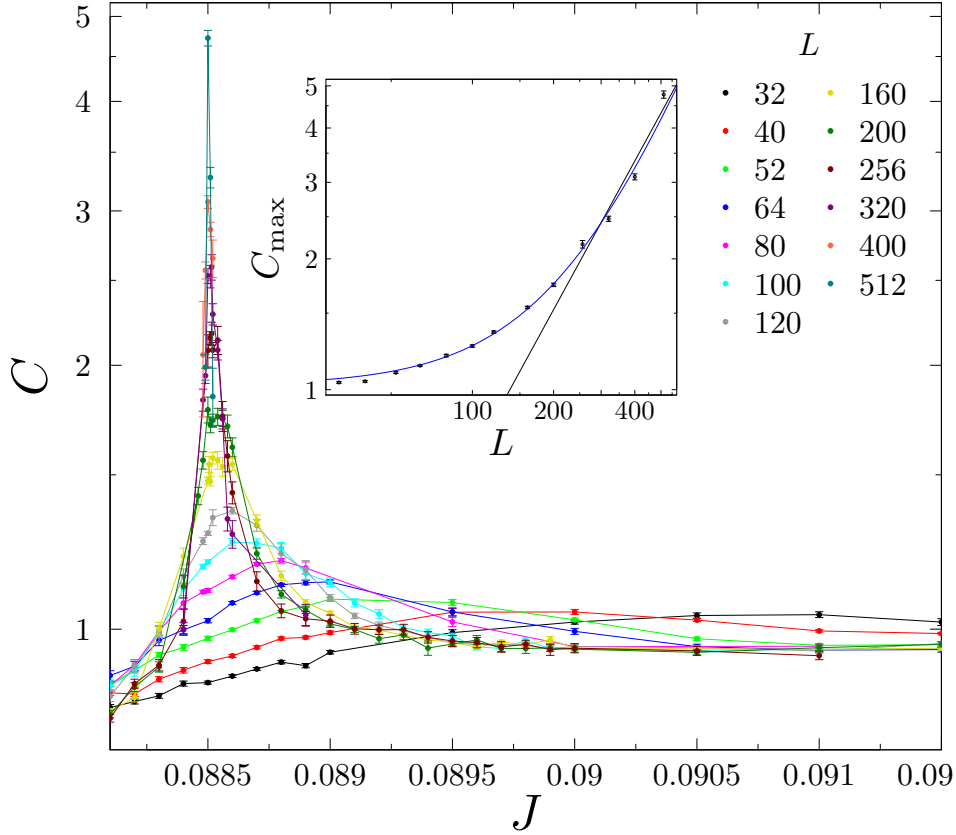


Figura 4.20: Calor específico en función de J para sistemas de diferentes tamaños. Panel interior: máximo del calor específico frente a L en doble escala logarítmica. La línea azul se corresponde a un ajuste a $aL^{\alpha/\nu} + b$ y la línea negra a una ley de potencias para los tamaños $L > 200$.

4.6. Fase anisótropa

Una predicción de la QDC es la existencia de dos longitudes características en la fase localizada, una de ellas relacionada con la fase con anisotropía \mathbb{Z}_4 . En la figura 4.5 dimos cuenta de la existencia de esta fase. Nos interesa ahora caracterizar el *crossover* que se produce de la fase $U(1)$ a la \mathbb{Z}_4 , Fig. 4.2. Para ello debemos definir una cantidad relacionada con el parámetro de orden φ que las distinga a ambas. La familia de parámetros

$$C_k = \frac{\langle \|\varphi\|^k \cos(4\theta) \rangle}{\langle \|\varphi^k\| \rangle}, \quad (4.14)$$

donde θ es el ángulo asociado al parámetro de orden bidimensional φ , permiten diferenciar ambas fases. En la fase con simetría $U(1)$, se anulan para todo k al integrar respecto al ángulo θ . En cambio, en la fase \mathbb{Z}_4 el sistema se encuentra en configuraciones donde el ángulo fluctúa alrededor de $(2n+1)\pi/4$, con n entero, por lo que su coseno dará valor cercano a -1 . El parámetro de orden C_0 debe seguir la relación de escala $C_0 = f(L^{1/a_4}\delta J)$, donde a_4 es el exponente del crossover de la fase $U(1)$ a la \mathbb{Z}_4 (Lou *et al.*, 2007). En la figura 4.21 se muestra el colapso de escala, usando una variable de escala con correcciones lejos del punto crítico, de la forma $L^{1/a_4}(J - J_c)(1 + A(J - J_c) + B(J - J_c)^2)$. Encontramos que el exponente da un valor $a_4 = 1.01(9)$ compatible con el obtenido por Lou *et al.* (2007) en una transición similar. El escalado es relativamente bueno, aunque las barras de error para los tamaños mayores representados son grandes.

4.7. Exponentes

Resumimos los diferentes exponentes finales que hemos obtenido para cada cantidad, en caso de ser una transición continua. Estas estimaciones simples las hemos hecho, mediante ajustes a los distintos extremos relativos y cantidades relacionados, para tamaños $L \geq 200$ y se muestran en la tabla 4.1.

Para el exponente ν parece no haber excesiva discrepancia entre las estimaciones obtenidas de los distintos parámetros. El valor medio de todas estas estimaciones es $\nu = 0.460(16)$. Sin embargo, para los exponente η_s y η_φ sí que hay bastante discrepancia. En principio estos dos exponentes pueden ser diferentes entre sí, pero resulta extraño que diferentes estimaciones del mismo no den valores compatibles. Para el obtenido desde el parámetro de orden de los loops se puede dar una explicación fenomenológica. El parámetro de orden es proporcional al WN, debido a que es la longitud de los loops extendidos y por cada curva extendida hay L^{d_f} enlaces que contribuyen al parámetro de orden. Si es así, y en el rango de valores considerados se produce la divergencia del $n_w \sim L^\theta$, el parámetro β_s estará relacionado con la dimensión fractal de la forma $L^d \mathcal{O}_s \propto L^{d_f} n_w \sim L^{d_f + \theta} \sim L^{d - \beta_s \nu}$. La dimensión

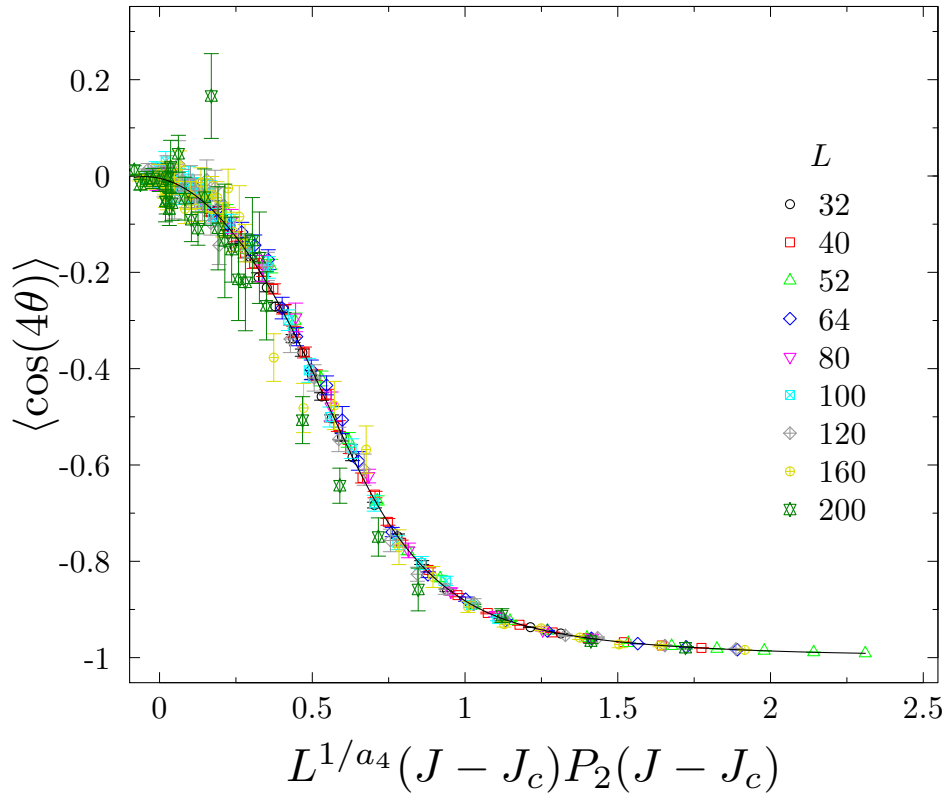


Figura 4.21: $\langle \cos(4\theta) \rangle$ as a function of the scaling variable $L^{1/a_4}(J - J_c)P_2(J - J_c)$. Inset: raw data of $\langle \cos(4\theta) \rangle$ versus J for several system sizes.

fractal por su parte está relacionada de forma directa con el exponente anómalo mediante $d_f = (5 - \eta)/2$ (Saleur y Duplantier, 1987; Kondev y Henley, 1995) y esto implica una relación de *hyperscaling* modificada $\beta_s/\nu = \theta + (1 + \eta)/2$. Esta relación se traduce en un dimensión anómala para el parámetro de orden $\eta_s = 0.32(6)$, que sí que está en acuerdo con la de la dimensión fractal o la distribución de longitudes. No ocurre así para la susceptibilidad, que no queda claro de donde viene su discrepancia. ¿Es posible una relación análoga para el parámetro de orden φ ? Usando el argumento anterior, y suponiendo que el exponente θ lo comparten ambos parámetros de orden, mediante un fenómeno similar para φ , la dimensión anómala que se obtiene desde φ es $\eta_\varphi = 0.46(7)$. Aunque esta estimación se sale de las barras de error, podríamos pensar que una caracterización mejor de el posible exponente θ

Tabla 4.1: Valores de los exponentes críticos obtenidos para tamaños $L > 200$.

Variabes	J_c	ν	$\eta_{s,\varphi}$
B_φ	0.088499(1)	0.457(24)	-
P_0	0.088503(1)	0.471(20)	-
n_w	0.088501(1)	0.430(22)	-
C	0.088493(5)	0.435(15)	-
\mathcal{V}	0.088500(1)	0.466(12)	-
\mathcal{O}_s	0.088500(1)	0.461(22)	-0.55(5)
χ_s	0.088509(6)	-	0.116(3)
\mathcal{O}_φ	0.088498(1)	0.457(23)	-0.40(5)
χ_φ	0.088499(2)	-	-0.35(10)
$R(l)^2$	-	-	0.38(6)
$P(l)$	-	-	0.32
C_φ	-	-	0.31(3)
k_4/k_2^2	0.088499(2)		
cruces $\mathcal{O}_s, \mathcal{O}_\varphi$	0.088501(1)		

asociado a φ podría mejorar el acuerdo. Esta pregunta queda abierta y esperamos que futuros trabajos puedan resolverla.

Podemos observar también el comportamiento con el tamaño de los exponentes, definidos de forma efectiva mediante las derivadas para tres tamaños consecutivos de los logaritmos de las diferentes cantidades. Para el caso del exponente ν se muestra en la figura 4.22, aunque los exponentes β y γ se comportan de forma similar. Los únicos casos donde no se observa dependencia con el tamaño es en las correlaciones, C_φ y $P(l)$, en la dimensión fractal extraída de la distancia de punta a punta y en la modificación del parámetro de Binder $\tilde{\mathcal{V}}$, en la que se le ha substraído un fondo que desaparece con el volumen.

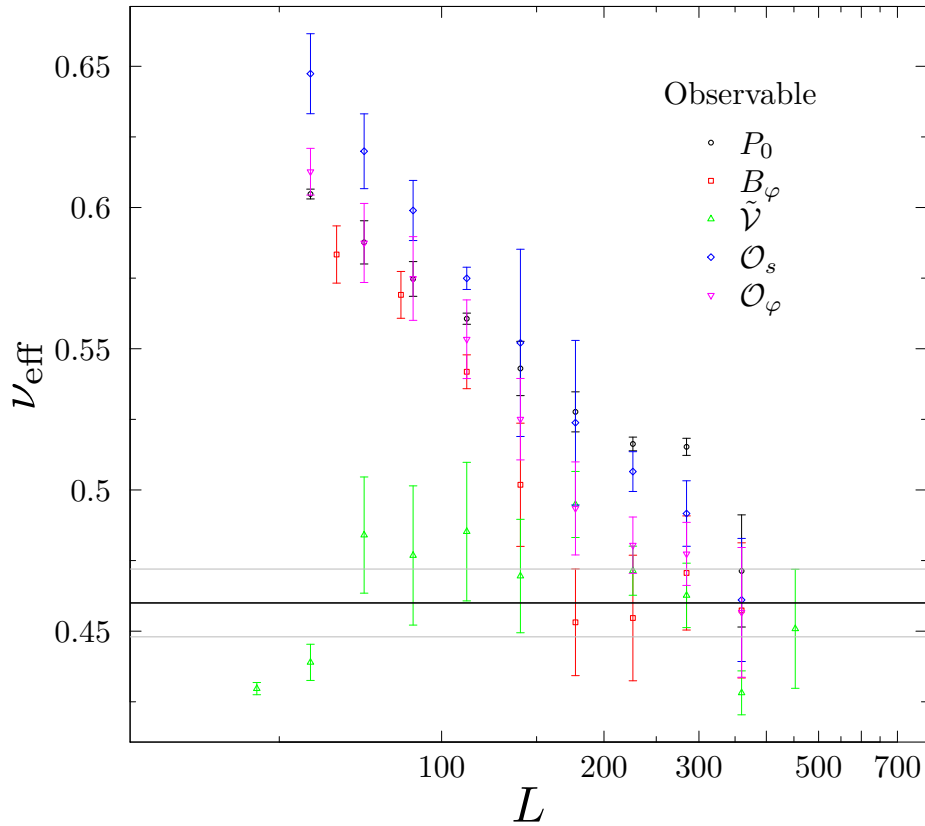


Figura 4.22: Exponente ν_{eff} en función del tamaño en escala semilogarítmica. La línea negra es la media de todas las estimaciones $\nu = 0.560(12)$ y las líneas grises son las barras de error.

4.8. Modelo de loops interactuantes con $n = 1$

Estos resultados tan sorprendentes hacen preguntarse por posibles alternativas que permitan explicar esta fenomenología de forma más sencilla, o por lo menos determinar que no son incorrectos. Con esta intención, estudiamos el caso en el que en la función de partición (4.2) la fugacidad es uno. En este caso, podemos esperar dos transiciones continuas desacopladas. Por una parte, dos transiciones en la clase de universalidad del modelo de Ising, que se produce en cada una de las dos subredes a la vez, de forma desacoplada. Por otra, una transición de loops cortos a loops extendidos, inducida por la magnetización no nula de la red, que

debe compartir clase de universalidad con la clase C de localización de Anderson Ortuño *et al.* (2009).

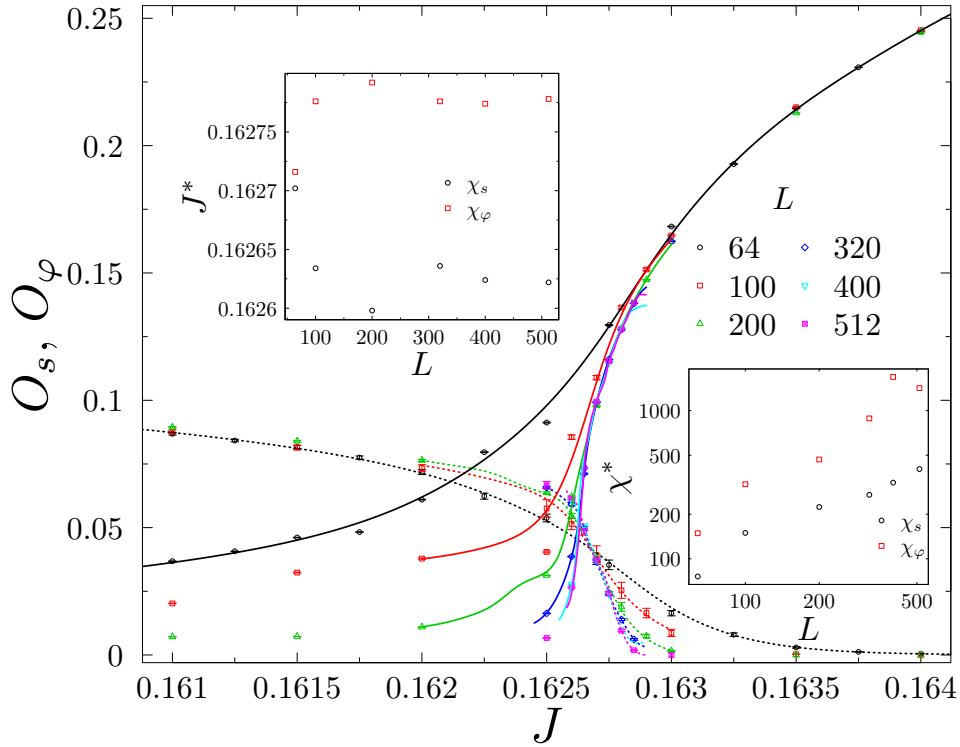


Figura 4.23: \mathcal{O}_s y \mathcal{O}_φ en función de J para $n = 1$ y sistemas con diferentes tamaños. Panel interior izquierdo: valor de J en el que cada susceptibilidad es un extremo relativo. Panel interior derecho: valor de las susceptibilidades en los puntos del panel de la izquierda.

La simulación numérica de este modelo resulta interesante como un caso de prueba para ver si nuestros métodos pueden distinguir dos transiciones separadas. En la figura 4.23 se muestran los datos para los dos parámetros de orden \mathcal{O}_s y \mathcal{O}_φ en función de J para varios tamaños, en un rango de valores similar al del caso $n = 2$. Las líneas continuas son las interpolaciones obtenidas con el método de los múltiples histogramas. En el panel interior izquierdo se representan en función de L , los valores del parámetro J^* en los que las susceptibilidades tiene un máximo. El conjunto de valores menores (negros) se corresponde con la transición de loops,

mientras que los mayores (rojos) son los de la transición tipo Ising. La separación entre estos dos conjuntos de valores es mucho mayor que las barras de error, por lo que queda claro que estamos ante dos transiciones de fase separadas.

Para comprobar el carácter continuo de ambas transiciones y su clase de universalidad, hemos escalado separadamente los dos parámetros de orden usando los valores estándar para los exponentes críticos presentes en la literatura, ajustando el valor crítico J_c . Los resultados para el parámetro de orden Ising se muestran en la Fig. 4.24 donde representamos $\mathcal{O}_\varphi L^{\beta/\nu}$ en función de $(J - J_c)L^\nu$ con $\nu = 0.6301$ y $\beta = 0.3265$, que son las mejores estimaciones que conocemos de los exponentes en la clase de universalidad del modelo de Ising tridimensional (Pelissetto y Vicari, 2002). Obtenemos de aquí el valor de $J_{c,I} = 0.162618(2)$. La superposición de los datos escalados es bastante buena, y más aun si tenemos en cuenta que hemos fijado los exponentes críticos y obviado las correcciones de tamaño finito. La calidad del escalado para el parámetro de orden de los loops (no se muestra) para la otra transición aunque es similar, presenta varios inconvenientes. El valor crítico $J_{c,C}$ en este caso es $0.162777(7)$.

Otra forma de comprobar la pertenencia a la misma clase de universalidad es observando que comparten las mismas funciones de escala, para los mismos observables. Así, mostramos en los paneles interiores de la Fig. 4.24 las probabilidades P_0 y P_1 de no tener trayectorias extendidas o tener sólo una, respectivamente, frente al promedio del n_w para sistemas con diferentes tamaños. La curva continua se corresponde con el caso no interactuante en la red L analizado por Serna (2010), es decir, el modelo de clase C. La superposición de los datos para diferentes tamaños y entre los dos modelos es bastante buena, indicando que se trata de una transición continua en la clase de universalidad del modelo C.

En resumen, estos datos prueban de forma clara la existencia de dos transiciones continuas separadas en el caso $n = 1$. Por otra parte, por comparación, parecen descartar que el caso $n = 2$ se trate de dos transiciones desacopladas. En este último todas las magnitudes dan una dispersión relativa de aproximadamente 3×10^{-5} , mientras que para $n = 1$ la dispersión es cercana a 10^{-3} .

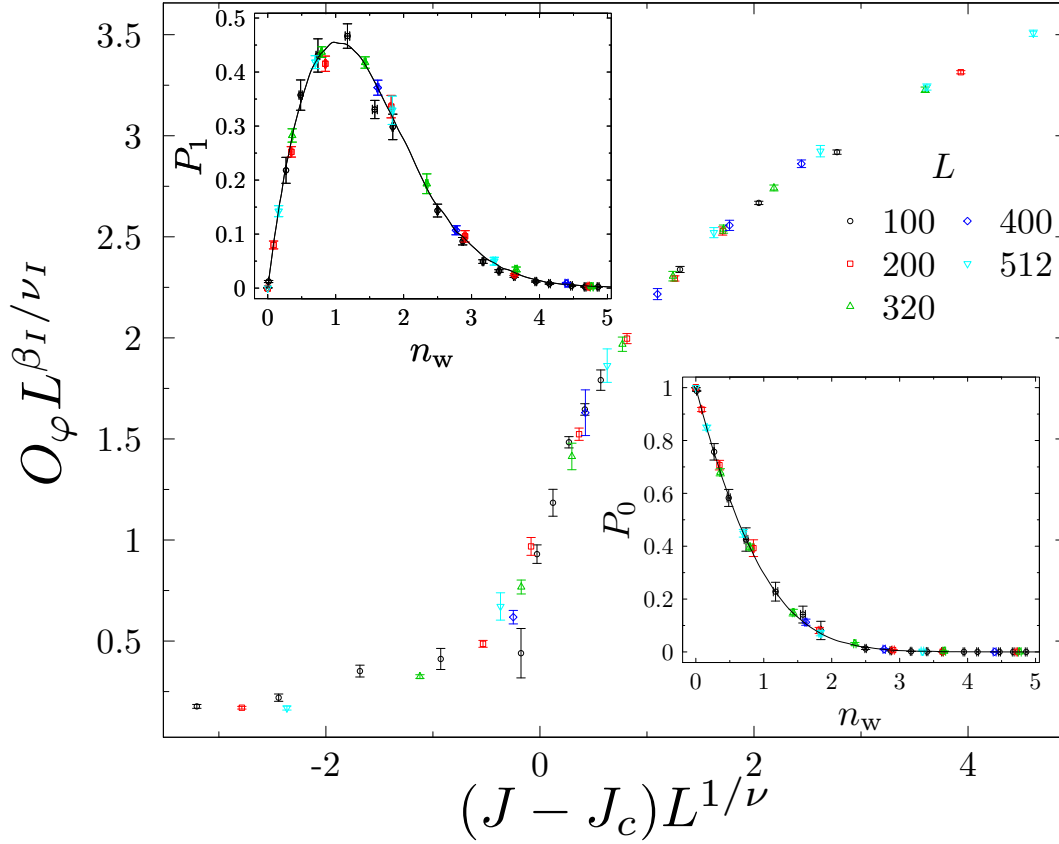


Figura 4.24: Colapso de escala para $O_\varphi L^{\beta/\nu}$ como función de la variable $(J - J_c)L^{1/\nu}$ con los valores de ν y η de la clase de universalidad de Ising tridimensional. Panel interior izquierdo: P_1 en función de n_w para varios tamaños. La línea continua se corresponde con la curva para el modelo de clase C. Panel interior derecha: igual que el panel de la izquierda para P_0 .

4.9. Modelo de loops interactuantes con $n = 3$

Al otro lado del diagrama de fases tenemos los modelos de loops con tres colores, $n = 3$, que también hemos simulado y que en caso de ser una transición de primer orden podríamos esperar que tuviera un carácter más fuerte aquí y fuera más fácil de observar que en el modelo $n = 2$.

En la Fig. 4.25 representamos los dos parámetros de orden \mathcal{O}_s y \mathcal{O}_φ en función de J para $n = 3$ y varios tamaños. Las curvas continuas son interpolaciones hechas

con el método de los múltiples histogramas. En este caso, de forma similar a $n = 2$ tenemos una única transición, como puede observarse en el panel interior de la izquierdaz. Ahí, representamos en función de L en escala semi-logarítmica los valores de J en los extremos relativos de $d\mathcal{O}_{s,\varphi}/dJ$ (puntos negros \mathcal{O}_s y cuadrados rojos \mathcal{O}_φ), junto con el valor en el que los dos parámetros de orden se cruzan (triángulos verdes). Vemos que conforme aumenta L las diferentes estimaciones del valor crítico de J convergen a un único valor.

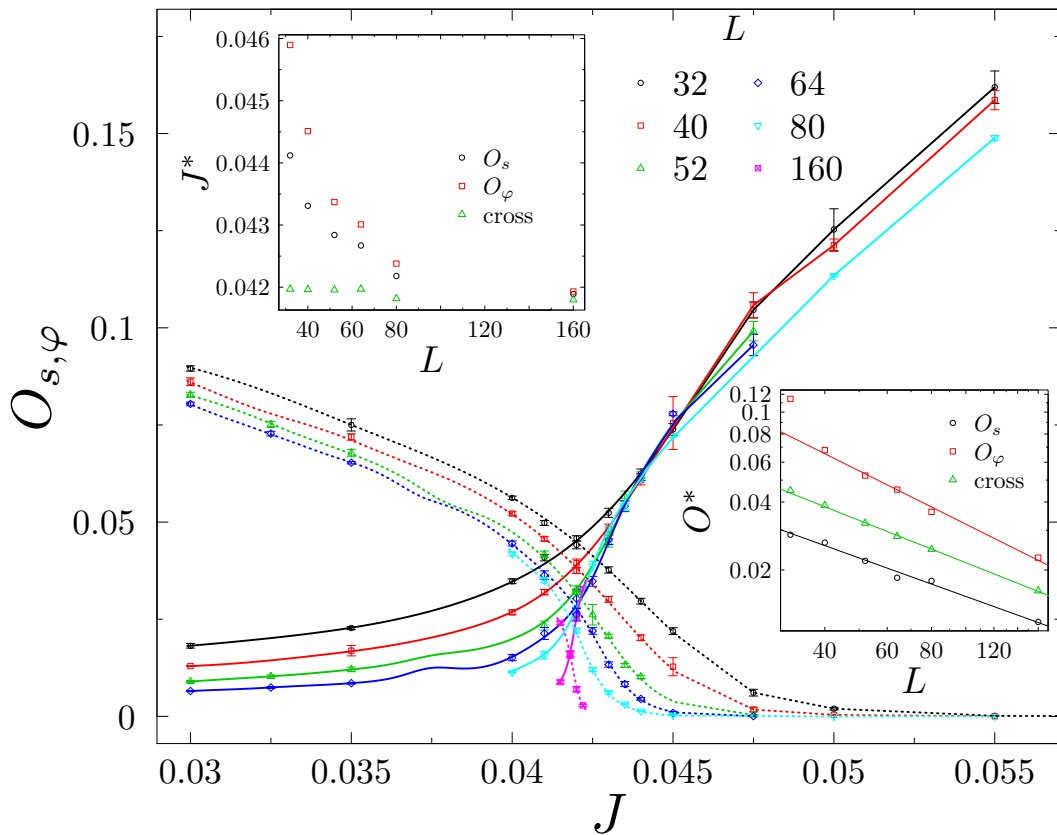


Figura 4.25: \mathcal{O}_s y \mathcal{O}_φ en función de J para $n = 3$ en sistemas de diferentes tamaños. Panel interior izquierdo: valor de J en el que las derivadas de \mathcal{O}_s y \mathcal{O}_φ respecto de J tienen un extremo relativo, y donde \mathcal{O}_s y \mathcal{O}_φ se cruzan frente al tamaño del sistema.

En el panel interior derecho representamos, en doble escala logarítmica, el valor de los parámetros de orden en el extremo relativo de sus derivadas respecto de J .

Estos valores deberían de tender a cero en forma de ley de potencias como $L^{\beta/\nu}$ en una transición continua, aunque se observa una dependencia efectiva con el tamaño, como en el modelo $n = 2$.

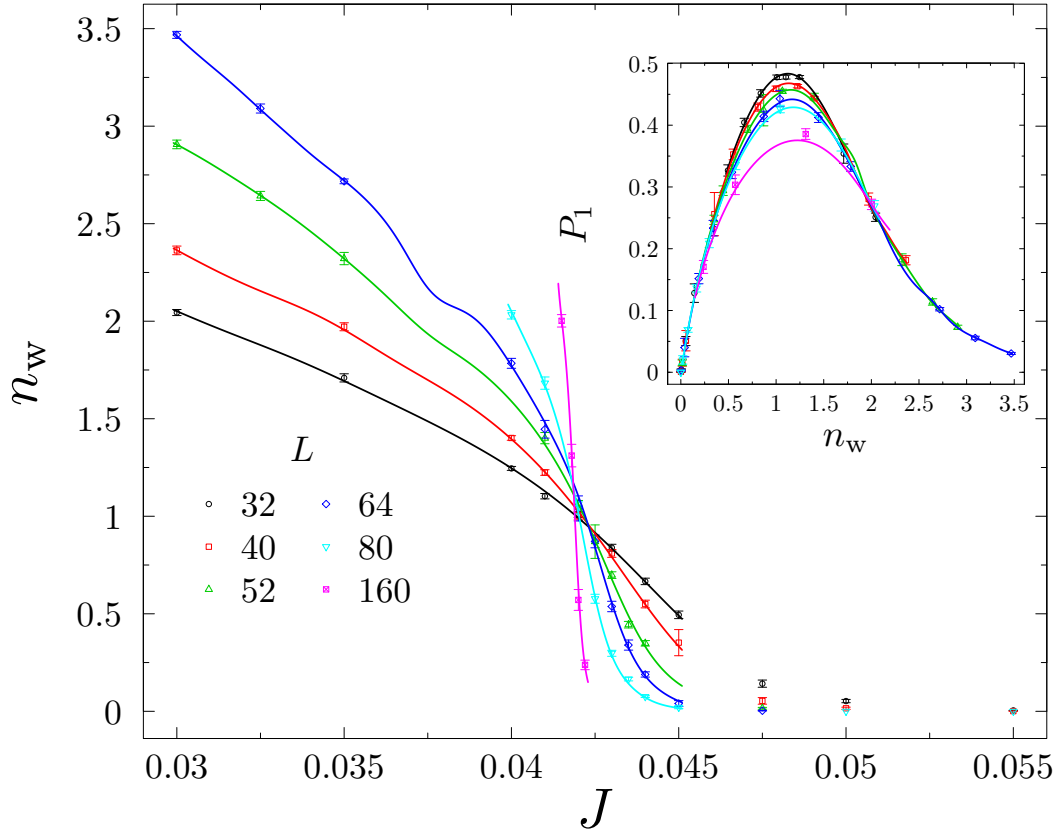


Figura 4.26: WN frente a J para sistemas con diferentes tamaños. Panel interior: probabilidad de tener una única curva extendida P_1 en función del promedio n_w .

En la Fig. 4.26 representamos el WN frente a J para varios valores de L . Como en el caso $n = 2$ vemos que los cruces se desplazan hacia valores menores de J , convergiendo en un punto crítico. No hemos analizado en este caso el valor de la componente vertical, pero parece ser un caso similar al de $n = 2$. En el panel interior, mostramos también la probabilidad de que las muestras tenga una única trayectoria extendida frente al promedio del WN. También, como en el caso $n = 2$ no se produce una buena superposición de los datos cerca del máximo, a diferencia

de lo que ocurre en una transición continua.

Resulta también interesante comparar el comportamiento del máximo del valor del parámetro \mathcal{V} para los tres modelos considerados. En la Fig. 4.27 se representa $[\mathcal{V}]_{\max}$ frente a L en doble escala logarítmica para $n = 1, 2$ y 3 . Los datos para $n = 1$ siguen una buena línea recta, lo cual refleja el carácter continuo de la transición. En cambio, los datos para $n = 3$ son similares a los del caso $n = 2$, pero el rango de tamaños disponible es demasiado corto como para extraer ninguna conclusión útil.

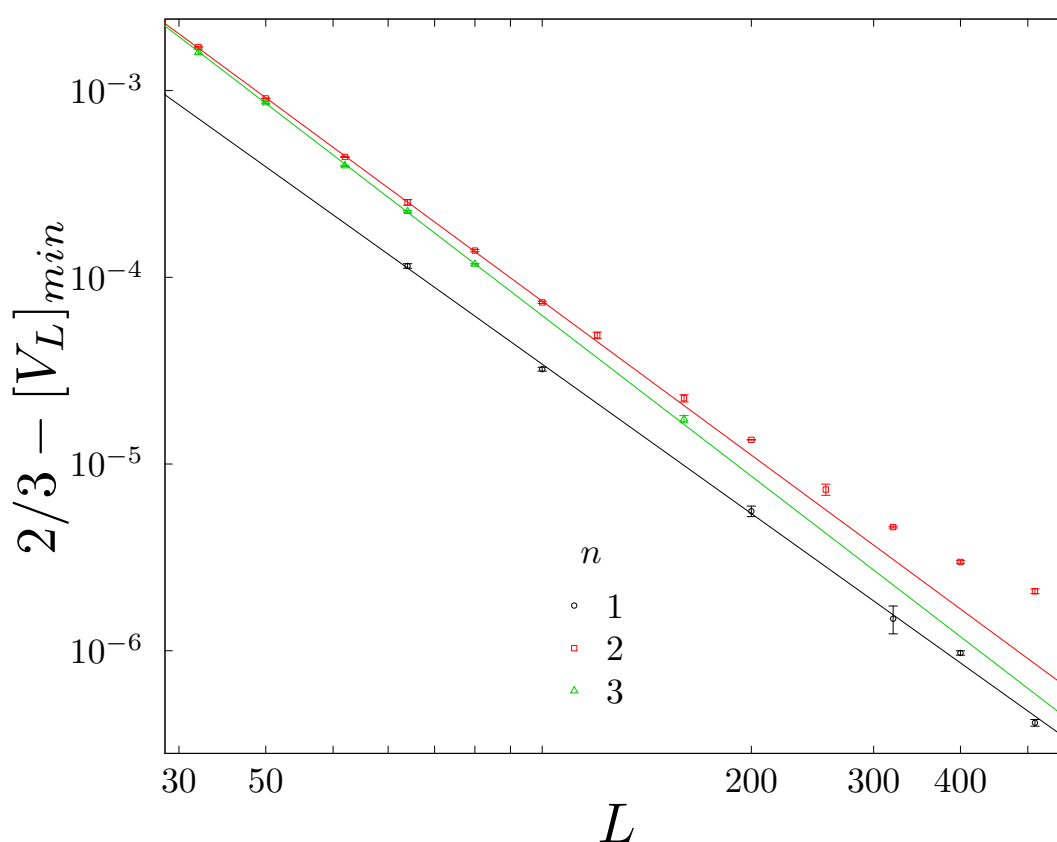


Figura 4.27: $2/3 - [V_L]_{\min}$ en función del tamaño del sistema en doble escala logarítmica para $n = 1$ (círculos negros), $n = 2$ (cuadrados rojos) y $n = 3$ (triángulos verdes).

El modelo de tres colores resulta ser cualitativamente similar al de dos colores, sin embargo su simulación consume más tiempo, por ese motivo y por el interés que despierta el caso $n = 2$ hemos concentrado todo el esfuerzo en este último.

4.10. Conclusiones

Hemos caracterizado una transición de fase en un modelo de loops que consideramos que reúne ciertas condiciones para estar dentro de la clase de universalidad de la criticalidad cuántica de deconfinamiento. Esta transición de fase lleva a los loops extendidos, situados en un punto simétrico $p = 1/2$ donde no están favorecidas ninguna de las cuatro posibles fases de loops cortos, a una fase aislante formada por la combinación de las cuatro (\mathbb{Z}_4). Entre medias observamos la aparición de una fase con simetría $U(1)$ que desaparece mediante un *crossover* hacia la fase aislante \mathbb{Z}_4 .

Los distintos parámetros proporcionan información contradictoria respecto al carácter de la transición. Por una parte, observamos indicios de una transición de fase de primer orden en las siguientes características:

- Dependencia de la mayoría de las estimaciones de los exponentes críticos con el tamaño.
- Divergencia del número de curvas extendidas, que está relacionado con la *rigidez* de la teoría de campos.
- Fallo del colapso de escala. No parece posible conseguir el colapso de escala para la gran mayoría de observables.
- En la distribución de la energía parece intuirse una forma bimodal. La kurtosis es compatible con este escenario, sin embargo el parámetro de binder \mathcal{V} no. Esto también podría ser un producto artificial del ajuste a dos gaussianas, dado que la distribución en el punto crítico siempre es más ancha y no tiene por qué ser la suma de dos distribuciones gaussianas.
- Se produce un fallo en las relaciones de *hyperscaling*. Obtenemos valores diferentes para la dimensión anómala dependiendo de qué observables estudiemos, y algunos de estos valores entran en contradicción con los límites establecidos desde la teoría de campos.

Por otra parte, también tenemos argumentos para pensar que se trata de una transición continua, aunque no estándar. En este caso con continua queremos indicar que no hay salto en los parámetros de orden o la energía tal y como las definimos.

- La divergencia del número de curvas extendidas n_w se produce de forma sublineal con el tamaño, con un exponente aproximadamente igual a 0.42. Esto no implica una divergencia en los parámetros de orden.
- El parámetro de orden \mathcal{O}_s frente al n_w permite un colapso de escala simple, pero el hecho de que el n_w diverja arroja dudas sobre la utilidad de este planteamiento.
- El comportamiento de las correlaciones parece ser el de una ley de potencias, estable, sin una particular dependencia con el tamaño. Las dimensiones anómalas obtenidas aquí están dentro de las predicciones usuales de las transiciones de QDC, positivas y grandes.
- Hemos encontrado una forma equivalente al parámetro de Binder $\tilde{\mathcal{V}}$ en la que no se observa una dependencia sistemática con el tamaño.
- El exponente ν extraído de este parámetro coincide, dentro de las barras de error, con las estimaciones para los tamaños más grandes estudiados del resto de observables. En particular, coincide con la obtenida mediante la longitud de correlación desde el WN.
- Para la dimensión anómala del parámetro de orden de los loops existe una explicación fenomenológica que permite dar valores estadísticamente compatibles a los obtenidos desde la distribución de longitudes o la dimensión fractal. Una generalización naif de esta explicación podría proporcionar una forma de hacer compatibles los obtenidos desde φ con su correlación.
- La longitud de correlación definida mediante el WN parece indicar que en caso de ser una transición de primer orden deberíamos haber visto las señales de este tipo de transición con tamaños menores de los que hemos simulado.

En definitiva, se trata de un caso límite en el que no queda completamente claro si la transición es continua o de primer orden. Por los argumentos dados, lo que queda claro es que no es una transición continua estándar, sino que hay una contribución que modifica los exponentes críticos en caso de haberlos. Con los tamaños simulados no podemos asegurar que el comportamiento observado para los mayores sea el comportamiento macroscópico, y en caso de que lo fuese resulta sorprendentemente inusual.

En caso de ser una transición de primer orden, queda también claro que es tremendamente inusual. El cambio de comportamiento comienza a producirse en tamaños del orden de $L = 100$, y sin embargo en $L = 640$ aún no se observa ningún fenómeno claro del carácter discontinuo. Por otra parte, la extrapolación de los puntos más cercanos al punto crítico de la longitud de correlación obtenida desde el WN, parecería predecir una longitud en $J = 0.08850$ del orden de $\xi \sim 1/0.015 \approx 67$. Evidentemente, estos argumentos hacen pensar que estamos ante un caso bastante atípico y es necesario un nuevo marco teórico que explique las incompatibilidades señaladas.

Modelos de Loops en 2D sin orientación

En los capítulos previos hemos considerado modelos de loops tridimensionales, en los que a los loops se les asocia de forma automática una orientación dada. El hecho de impedir esta orientación, mediante la introducción de cruces, puede llegar a cambiar radicalmente la fenomenología de los modelos. En concreto, el cambio más drástico se produce en el caso bidimensional, en el que llega a aparecer una fase con loops extendidos. Al estudio de esta clase de modelos bidimensionales le dedicamos este capítulo.

En la primera sección (sec. 5.1) discutimos el contexto en el que hemos realizado el estudio de este modelo bidimensional de loops, mostrando los antecedentes en el campo y citando las referencias oportunas para poder seguir en detalle el resto del capítulo. A continuación (sec. 5.2) damos la definición concreta del modelo estudiado, además de presentar su diagrama de fases. En las siguientes secciones caracterizamos en detalle la fase de Goldstone (Sec. 5.3), con el apoyo de cálculos analíticos, y de las líneas críticas (Sec. 5.4). Concluimos con una pequeña sección de conclusiones, donde resumimos las características de estos modelos e indicamos otras posibilidades para futuros trabajos (Sec.5.5)

5.1. Contexto y antecedentes

En dos dimensiones, gracias a la teoría de campos conformes y otras técnicas exactas, puede resultar tentador pensar que la fenomenología crítica está totalmen-

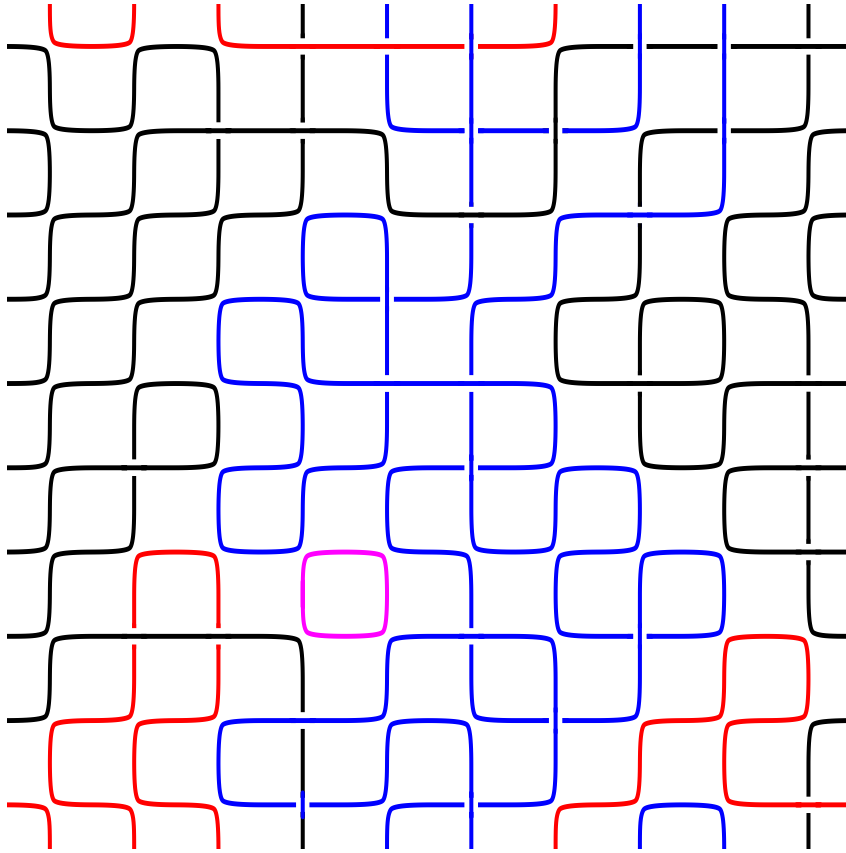


Figura 5.1: Una configuración del modelo loops completamente empaquetados con cruces (CPLC) en una red 10×10 con condiciones periódicas. Se le ha asignado un color diferente a cada loop, con el único propósito de estos colores es el de ayuda visual para diferenciar los loops, no como parte de la configuración.

te clasificada y caracterizada, aunque no es del todo cierto. Una clase de problemas que han permanecido en el misterio es la que contienen modelos clásicos de loops y modelos para polímeros, junto con los modelos para fermiones no-interactuantes sujetos a desorden. Estos sistemas los unen lazos formados por las descripciones de teorías de campos, que dependen de simetrías continuas del tipo *réplica* o alternativamente *supersimetrías globales*. Como ejemplos podemos citar el mapeo a polímeros de deGennes para modelos $O(N)$ en el límite $N \rightarrow 0$, los distintos modelos sigma de réplica para la transición de efecto Hall cuántico entero y otros problemas de localización, o los modelos sigma que describen el contorno de los clusters en

percolación y sopas de loops similares (de Gennes, 1972; Pruisken, 1984; Levine *et al.*, 1983; McKane, 1980; Parisi y Sourlas, 1980; Weidenmüller, 1987; Evers y Mirlin, 2008; Fendley, 2001; Candu *et al.*, 2010; Read y Saleur, 2001; Jacobsen *et al.*, 2003; Nahum y Chalker, 2012; Nahum *et al.*, 2011)

Los modelos clásicos de loops son los ejemplos más simples de esta clase de problemas, pero incluso éstos no están completamente caracterizados. Los casos que han sido mejor estudiados son aquellos en los que los loops no pueden cruzarse. La información que se conoce sobre ellos es bastante amplia debido a la posibilidad de usar teoría de campos conformes, mapeos a modelos de alturas, soluciones exactas, evolución de Schramm-Loewner (SLE) y simulaciones numéricas (Nienhuis, 1987; Cardy, 2005a). Pero al salir de estos modelos, la validez de las técnicas analíticas suele desaparecer y encontramos nuevos tipos de fenomenología crítica que requieren herramientas teóricas diferentes y el uso del cálculo numérico para acceder a los resultados.

En este capítulo consideramos el modelo bidimensional de loops con cruces definido en la sección 1.2.6. Éste revela una nueva clase de universalidad en su comportamiento crítico, y ha dado pie a nuevos mecanismos para su estudio. También proporciona un modelo natural para polímeros y movimiento determinístico en ambientes con desorden (Owczarek y Prellberg, 1995; Foster, 2009; Ziff *et al.*, 1991; Nahum *et al.*, 2013b), sistemas que habían sido estudiados pero que sus diagramas de fase y descripciones continuas, en general, no estaban bien determinados. Finalmente, arrojan luz sobre fenómenos que son importantes de forma general para la criticalidad en modelos sigma de tipo réplica o supersimétricos (Nahum *et al.*, 2013b). En particular, lo hacen sobre el rol de las simetrías gauge y defectos topológicos puntuales. En transiciones de Anderson metal-aislante bidimensionales quedó demostrado su importancia (König *et al.*, 2012; Fu y Kane, 2012) y volveremos a comentar la analogía entre modelos de loops y localización más adelante.

Un resultado clave en trabajos previos en loops con cruces es la existencia de una fase inusual que está ausente para loops sin cruces (Owczarek y Prellberg, 1995; Martins *et al.*, 1998; Ziff *et al.*, 1991; Read y Saleur, 2001; Jacobsen *et al.*,

2003; Kager y Nienhuis, 2006; Ikhlef *et al.*, 2007). Jacobsen, Read y Saleur (2001, 2003) indicaron como ésta se corresponde con la fase de *Goldstone* del modelo sigma $O(n)$ (definida en Sec. 1.3.1), donde n es la fugacidad de los loops. La fase existe para $n < 2$, y para que tenga sentido este régimen, dentro del marco teórico se requiere un límite tipo réplica o una formulación supersimétrica de la teoría de campos (Nahum y Chalker, 2012; Nahum *et al.*, 2013b). Por otra parte, ya se habían encontrado previamente los elementos característicos de la fase de Goldstone en estudios computacionales de polímeros y caminos determinístico en entornos aleatorios (Ziff *et al.*, 1991; Owczarek y Prellberg, 1995), así como en un modelo de loop integrable (Martins *et al.*, 1998; Kager y Nienhuis, 2006; Ikhlef *et al.*, 2007). En la teoría de campos, esta fase aparece de forma genérica cuando los loops sin cruces, en el llamado régimen denso, son perturbados al añadirles la posibilidad de cruzarse, lo cual se corresponde con una ruptura de simetría (Jacobsen *et al.*, 2003; Read y Saleur, 2001; Nahum y Chalker, 2012).

Aquí, estudiamos una clase más general de modelos de loops con cruces. Estos muestran nuevos tipos de transiciones de fase continua que separan la fase de Goldstone de fases con loops cortos. Caracterizaremos, tanto las transiciones de fase como la fase de Goldstone mediante simulaciones Monte Carlo, con el apoyo de cálculos analíticos.

Los modelos que estudiamos en este capítulo son el *modelo de loops completamente empaquetados con cruces* (CPLC) que definimos en la sección 1.2.6, la Fig. 5.1 muestra una configuración de ejemplo. Dentro del espacio de parámetros del CPLC encontramos varios modelos que fueron estudiados previamente como casos especiales: en particular, los modelos de loops completamente empaquetados estándar, sin cruces, y modelos con cruces encontrados en diversos contextos (incluidos los mencionados anteriormente).

Desde un punto de vista teórico dimos argumentos en la sección 1.3.1, siguiendo Nahum *et al.* (2013b), por los que las transiciones de fase en el CPLC no pueden ser descrita por el modelo $O(n)$, sino por un modelo sigma en el espacio real proyectivo \mathbb{RP}^{n-1} . En este modelo, los vórtices puntuales \mathbb{Z}_2 juegan un papel importante. Para

$0 < n < 2$, en la fase de Goldstone estos vórtices quedan suprimidos, lo que significa que ahí el modelo $O(n)$ es una descripción aceptable, a diferencia de la transición de fase a loops finitos donde proliferan.

En general, la introducción de los cruces lleva al fallo a las técnicas teóricas estándares, usadas en modelos de loops sin cruce, por lo que el estudio de los puntos críticos se restringe a cálculos numéricos y tratamientos aproximados de grupo de renormalización (Fu y Kane, 2012). Sin embargo, la fase de Goldstone se puede caracterizar analíticamente, dado que sus propiedades vienen gobernadas por “el flujo marginal en RG a un punto fijo donde el acoplo es débil” (Jacobsen *et al.*, 2003; Read y Saleur, 2001). Esto se traduce en la aparición de logaritmos, por ejemplo, las funciones de correlación decaen con una potencia universal del logaritmo de la distancia. Por lo tanto, se requieren tamaños de sistemas muy grandes para poder confirmar numéricamente las predicciones analíticas (comparables con el tamaño más grande simulado en cualquier problema de mecánica estadística). Dado que las características especiales del caso con fugacidad $n = 1$ permiten alcanzar estos tamaños, hemos concentrado el esfuerzo numérico en este valor.

Para ser capaces de alcanzar este tamaño hemos desarrollado técnicas especiales para la construcción de los sistemas, éstas las explicamos en las secciones 2.2.1 y 2.2.2. La primera de ella sirve para la construcción del sistema. Dado que el tamaño de los sistemas impone limitaciones físicas en su almacenamiento en memoria, usamos la técnica de la matriz de transferencia para construir la muestra capa a capa. En la matriz sólo se guardan las conexiones de los loops que tocan los dos extremos en la dirección de propagación, los loops finitos que están en el interior se almacenan como parte de la estadística del sistema. La segunda técnica permite usar el cálculo hecho para una muestra dada para dar más información acerca de observables no locales, como el número de curvas extendidas o la distribución de longitudes de loops.

Una de las ventajas de la matriz de transferencia es que es fácilmente paralelizable. Aunque para los tamaños más pequeños no es necesario, para el cálculo de los tamaños mayores de $L \geq 10^4$ hemos desarrollado versiones paralelizadas de

este algoritmo. Concretamente, hemos desarrollado versiones tanto para sistemas con memoria compartida (OpenMP) como para procesadores gráficos programables (CUDA/Nvidia). El programa paralelizado para las tarjetas gráficas, por ejemplo, fue usado en una tarjeta Nvidia, modelo TeslaM2070.

Otra característica del CPLC en $n = 1$ es que mientras cada configuración es una sopa de muchos loops, el modelo permite un mapeo a un modelo para un *único* loop con interacciones locales. En un cierto punto del espacio de parámetros, se corresponde con el problema bien conocido del modelo de *camino interactuante y que se auto-evitan* (*interacting self-avoiding trail* o ISAT) para un polímero en su punto de colapso, o punto Θ (Lyklema, 1985; Owczarek y Prellberg, 1995). Las transiciones de colapso de polímeros en dos dimensiones han sido un asunto misterioso que requería clarificación (véase por ejemplo el caso de los exponentes Flory desaparecidos (Cardy, 2001)). Del trabajo realizado aquí se pudo mostrar que el ISAT se puede caracterizar completamente desde la teoría de campos (Nahum *et al.*, 2013b), explicando por ejemplo el diagrama de fases que había sido encontrado numéricamente por Foster (2009).

Volviendo a la analogía con las transiciones de Anderson, para los modelos de loops completamente empaquetados sin cruces hay un mapeo exacto (Gruzberg *et al.*, 1999; Beamond *et al.*, 2002) a un modelo de red para localización de Anderson en la clase de simetría C (Senthil *et al.*, 1998; Bundschuh *et al.*, 1999; Senthil *et al.*, 1999; Evers y Mirlin, 2008). Sin embargo, la analogía es más general. Los trabajos de Fu y Kane (2012) demuestran que la transición metal-aislante en la clase de simetría simpléctica está controlada por la proliferación de vórtices \mathbb{Z}_2 . Esta transición por tanto tiene una estrecha relación con los modelos de loops analizados aquí, a pesar de que el modelo sigma asociado es diferente. En el lenguaje de localización, la fase de Goldstone se corresponde con la fase metálica, y las dos fases de loops cortos, que se distinguen una de otra por la presencia o ausencia de un loop que rodea el contorno, se corresponden con las fases aislante topológica y trivial, respectivamente.

En ambos casos, el modelo de loops y el problema de localización, la fugacidad de los vórtices juega un papel importante. Fu y Kane (2012) introdujeron un trata-

miento aproximado de RG para esta fugacidad, y un tratamiento similar puede dar estimaciones (no particularmente exactas) de los exponentes críticos en los modelos de loops. Queremos destacar que también se demostró que los vórtices, en este caso \mathbb{Z} vórtices, eran responsables de la localización de Anderson en las clases de simetría quirral, y König *et al.* (2012) dieron un tratamiento detallado sobre ello.

5.2. Modelos

5.2.1. Loops completamente-empaquetados con cruces

Definimos otra vez el modelo CPLC, mediante la descripción de una configuración. Aquí, la configuración se genera mediante la asignación a cada nodo de la red cuadrada de uno de los tres posibles emparejamientos mostrados en la figura 5.2. La figura 5.1 muestra un ejemplo de una red pequeña. Nótese que no distinguimos entre cruces por arriba y por abajo, la configuración en un nodo está definido únicamente por las tres forma en las que sus cuatro enlaces pueden ser emparejados.

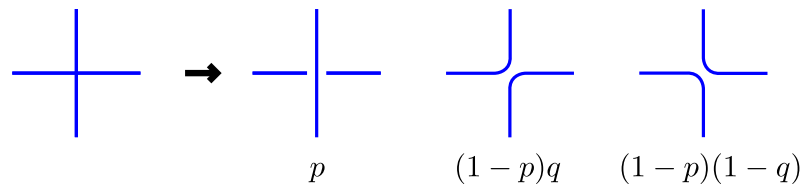


Figura 5.2: Las tres posibles configuraciones de un nodo y su factor de Boltzmann asociado. En la primera de las configuraciones, el link de la izquierda y el de la derecha pertenecen al mismo loop. Los pesos q y $1-q$ se intercambian en las dos subredes de la red cuadrada.

A cada uno de estos tres posibles emparejamiento se le asigna un peso, como muestra la figura 5.2, donde el peso del cruce es p . Los factores $(1-p)q$ y $(1-p)(1-q)$ se alternan en las dos subredes de la red cuadrada, de forma que los estados del sistema para los valores extremos de los parámetros son los mostrados en la figura 5.3. Es decir, un mismo peso $(1-p)q$ en una subred da el segundo emparejamiento de la figura 5.2, mientras que en la otra da el tercero. El factor de Boltzmann para

una configuración viene dado por el producto de los pesos de los nodos, junto con una fugacidad n para el número de loops. Usamos N_p , N_q y N_{1-q} para denotar los números de nodos donde se ha elegido el emparejamiento p , $(1-p)q$ y $(1-p)(1-q)$, respectivamente. Entonces, la función de partición es

$$Z = \sum_{\mathcal{C}} n^{\#\text{ loops}} p^{N_p} [(1-p)q]^{N_q} [(1-p)(1-q)]^{N_{1-q}}, \quad (5.1)$$

donde \mathcal{C} es una configuración con N_p , N_q y N_{1-q} nodos.

El espacio de parámetros de este modelo incluye varios modelos que han sido investigados previamente. En la línea $p = 0$ tenemos el modelo de loops completamente empaquetados *sin* cruces: sus características son bien conocidas, en particular, se encontró un mapeo al modelo de Potts con n^2 estados vía la representación de Fortuin-Kasteleyn de este último (Cardy, 2005b). En la línea $q = 1/2$, Jacobsen *et al.* (2003) relacionó este modelo con la fase de Goldstone de los modelos sigma $O(n)$, y algunos puntos aquí han sido estudiados en diversos contextos. Para un valor dado de n , el punto $q = 1/2$, $p = (2-n)/(10-n)$ es conocido como el modelo de loop de Brauer (Martins *et al.*, 1998; Kager y Nienhuis, 2006; Ikhlef *et al.*, 2007) y es integrable, además, Martins *et al.* (1998) lo relacionó con una cadena de espines *supersimétricos*. Cuando los parámetros en el CPLC hacen que todas las configuraciones tengan el mismo peso, es decir, ($n = 1$, $q = 1/2$, $p = 1/3$), el modelo es equivalente al modelo usual para polímeros en su punto Θ o punto de colapso (Lyklema, 1985; Owczarek y Prellberg, 1995; Foster, 2009). En las líneas $q = 0$ o $q = 1$, bordes izquierdo y derecho del diagrama de fases (Fig. 5.3), el CPLC se reduce al modelo de loops en la red de *Manhattan* analizado por Beamond *et al.* (2002, 2003). Los modelos de loops con cruces en $n = 1$ también aparecieron en estudios de gases de Lorentz en una red, es decir, movimiento determinístico en un ambiente aleatorio (Ziff *et al.*, 1991; Gunn y Ortuño, 1985). Por último, Shtengel y Chayes (2005) analizaron un modelo similar al CPLC en el cual q y $1-q$ no se alternan, y lo usan en $n = 2$ para estudiar los diagramas de fases de los modelos de vértices (*vertex models*).

Un hecho trivial pero importante en el CPLC, al igual que en los modelos de loops estudiados previamente, es que los nodos son completamente independientes

unos de otros cuando $n = 1$. Los pesos p , $(1 - p)q$ y $(1 - p)(1 - q)$ son entonces las probabilidades de las configuraciones de los distintos nodos y la función de partición es igual a la unidad. Una consecuencia de esto es que, por el escalado de tamaño finito de la energía libre, cualquier punto crítico debe tener carga central $c = 0$, véase por ejemplo Gurarie y Ludwig (2004) y las referencias dadas ahí. El modelo con $n = 1$ es entonces análogo a percolación, donde también se puede formular el problema en términos de variables aleatorias descorrelacionadas. En ausencia de cruces, el modelo en $n = 1$ es de hecho equivalente a percolación de enlace en la red dual, con loops que rodean los contornos de clusters (Sec. 1.2.1). Sin embargo, cuando se permiten los cruces, el comportamiento universal deja de ser el de percolación.

Como hemos dicho, en este caso nuestras simulaciones se restringirán al caso $n = 1$, que es el más interesante y el más adecuado para el Monte Carlo, pero algunos resultados podrán ser extrapolados a todo el rango de $0 \leq n < 2$.¹ En las simulaciones usamos sistemas cilíndricos, es decir, con condiciones de contorno periódicas en uno de los ejes. El diagrama de fases obtenido numéricamente en $n = 1$ se muestra en la figura 5.3. Podemos esperar que sea cualitativamente similar para todo el rango $0 < n < 2$, con la fase de Goldstone abarcando cada vez más del espacio de parámetros conforme n tiende a 0. Resumimos sus principales características.

Fases de loops cortos. Las configuraciones en $(p = 0, q = 0)$ y en $(p = 0, q = 1)$ proporcionan una caricatura de cómo son las dos fases de loops cortos o finitos. Con las condiciones de contorno adecuadas, estas dos se distinguen una de otra por la presencia o ausencia de un loop largo que recorre el contorno del sistema, como se puede ver en la figura 5.3. En la analogía con la localización de Anderson mencionada anteriormente, se corresponden con fases aislantes, y el loop del contorno se corresponde con estados de borde presentes en un aislante topológico.

¹El caso $n = 2$ es también interesante, aunque presenta un comportamiento crítico más convencional, relacionado con el del modelo XY.

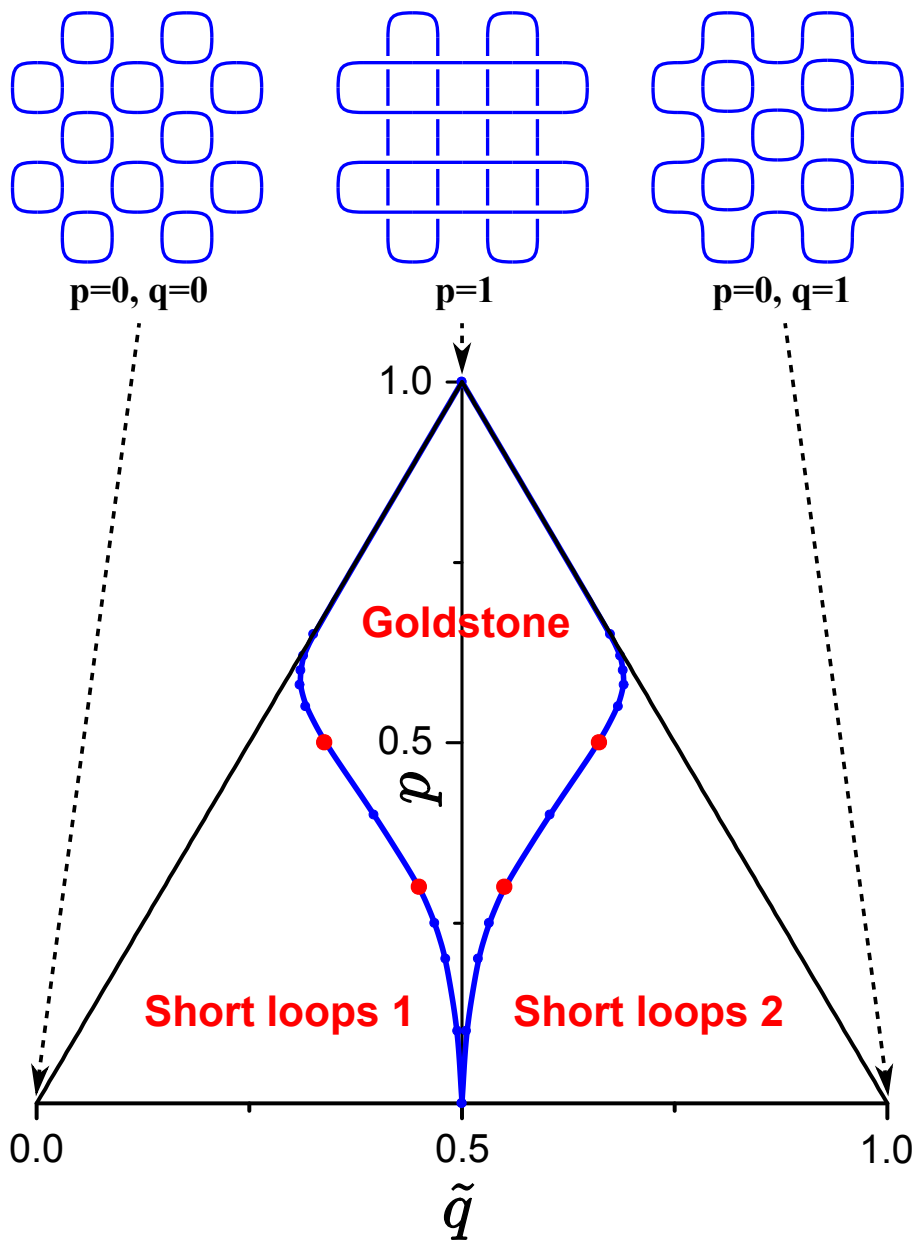


Figura 5.3: Diagrama de fases obtenido numéricamente para el CPLC en $n = 1$. El eje horizontal está nombrado como \tilde{q} , definido como $(\tilde{q} - 1/2) = (q - 1/2)(1 - p)$. Los puntos (rojos) más grandes en línea crítica indican los valores de p en los cuales hemos analizado el comportamiento crítico en detalle. También se muestran esbozos de las configuraciones que se obtienen para una red pequeña en los puntos $p = 1$, $(p = 0, q = 0)$ y $(p = 0, q = 1)$. El punto $(p = 0, q = 1/2)$ es el punto crítico de percolación.

Fase de Goldstone. En la fase de Goldstone los loops son *casi* Brownianos. Sin embargo, las interacciones entre modos de Goldstone en el modelo de sigma son sólo marginalmente irrelevante (Jacobsen *et al.*, 2003), lo que lleva a formas universales logarítmicas de los correladores y otros observables que mostraremos en la sección 5.3. En la analogía a la localización de Anderson esto sería la fase metálica.

Líneas críticas. El comportamiento crítico en las líneas que separan la fase de Goldstone de las fases de loops cortos muestran una nueva clase de universalidad. Ésta está asociada a la transición orden-desorden del modelo sigma \mathbb{RP}^{n-1} , la cual existe sólo en el límite de réplica con $n < 2$ y está controlada por la proliferación de defectos de vórtices \mathbb{Z}_2 , asociados con el primer grupo de homotopía $\pi_1(\mathbb{RP}^{n-1})$ (Nahum *et al.*, 2013b). Numéricamente encontramos que los loops críticos tienen una dimensión fractal $d_f = 1.909(1)$ en $n = 1$, es decir, son ligeramente menos compactos que los caminos Brownianos, y el exponente crítico asociado a la longitud de correlación es grande, $\nu = 2.745(19)$ (Sec. 5.4).

Punto crítico en $p = 0$. El punto crítico del modelo de loop sin cruces, en ($p = 0, q = 1/2$), es un punto crítico que, como hemos dicho, está bien caracterizado y se corresponde con la llamada *fase densa* del modelo de loops $O(n)$, o con SLE_κ con $\kappa > 4$, véase por ejemplo Cardy (2005b). En $n = 1$ este punto mapea a percolación crítica, los loops tienen la estadística de los contornos de los clusters de percolación, con una dimensión fractal $d_f^{\text{perc}} = 7/4$, y el exponente crítico de la longitud de correlación es $\nu^{\text{perc}} = 4/3$. Estos valores de los exponentes críticos los comparten los de la clase C de las transiciones de Anderson (la transición de efecto Hall cuántico de spin), debido a un mapeo exacto (Gruzberg *et al.*, 1999; Beamond *et al.*, 2002; Mirlin *et al.*, 2003; Chalker *et al.*, 2011).

Contornos del diagrama de fases. En cualquier parte del contorno del diagrama de fase (Fig. 5.3), es decir, cuando uno de los pesos de los nodos se anula, los loops pueden ser orientados consistentemente si se asigna una orientación fija (independiente de la configuración) a cada enlace de la red. La elección de las orientaciones difiere en cada uno de las tres partes del contorno. La orientación es la de la red L en la línea $p = 0$, y la de la red de Manhattan en las líneas $q = 0$ y $q = 1$. El

hecho de que los loops vengan automáticamente con una orientación significa que la descripción continua tiene una simetría mayor (Read y Saleur, 2001, 2007; Candu *et al.*, 2010). La teoría de campos que los describe es un modelo sigma en el espacio complejo proyectivo, \mathbb{CP}^{n-1} , en vez de en el real \mathbb{RP}^{n-1} . La descripción \mathbb{CP}^{n-1} implica que las líneas $q = 0$ y $q = 1$ (el modelo de loops en la red de Manhattan) están siempre en la fase de loops cortos, pero con un tamaño típico de loop que diverge exponencialmente conforme $p \rightarrow 1$. Esto está en acuerdo con predicciones previas (Beaumont *et al.*, 2002, 2003), aunque no parezca obvio desde el diagrama de fases numérico, al comprobarse que las líneas críticas se aproximan mucho a los contornos $q = 0$ y $q = 1$, para p cercano a uno.

5.3. Fase de Goldstone

La fase de Goldstone muestra un comportamiento universal sutil, diferente del que se puede ver en el modelo de loops sin cruces, y el cual se puede entender en detalle. Dentro de esta fase, el marco teórico es el del modelo sigma $O(n)$ (Jacobsen *et al.*, 2003), tal y como discutimos en la sección 1.3.

A continuación, presentamos la caracterización de una serie de observables, con el apoyo de los cálculos analíticos que se detallan en Nahum *et al.* (2013b). Una de las razones para hacer una comparación cuidadosa entre los resultados numéricos y la teoría de la fase de Goldstone, es que en el punto $n = 1$, $p = 1/3$ y $q = 1/2$, se habían llegado a poner de manifiesto hipótesis incompatibles sobre su comportamiento universal, debido principalmente a los trabajos en colapso de polímeros.

5.3.1. Funciones de correlación

Para caracterizar las funciones de correlación en la fase de Goldstone, introducimos las funciones de correlación *de sandía* de k patas, G_k . Entre dos sitios x e y , la función de correlación de sandía de k patas es la probabilidad de que estos dos sitios estén unidos por k ramas de loops. En la figura 5.4 se muestra esquemáticamente esta función de correlación para $k = 4$. En estos modelos de loops, como no hay

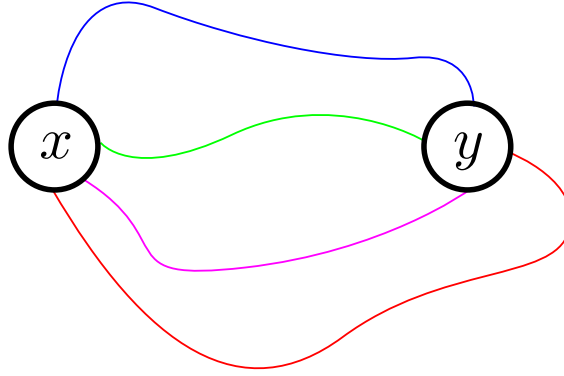


Figura 5.4: Representación gráfica de la función de correlación de *sandía* de cuatro patas entre los puntos x e y .

ramificaciones ni cabos sueltos, sólo son distintos de cero las funciones de correlación de k patas con k par. Para $k = 2$, en el CPLC se corresponde a que los dos sitios estén conectados por un loop, mientras que para $k = 4$ puede estar conectado por uno o por dos loops. Concretamente, redefiniremos $G_4(r)$ como la probabilidad de que dos sitios separados una distancia r estén en dos loops diferentes, cantidad proporcional al correlador original, y que permite un calculo más sencillo de esta correlación.

En la teoría de campos, las funciones de correlación de sandía $G_k(r)$ pueden ser expresadas como la función de dos puntos del operador $s^1 \dots s^k(x)$ (Nahum *et al.*, 2013b). Mediante un procedimiento estándar en RG (Polyakov, 1975), se puede obtener el comportamiento asintótico de la función de correlación de sandía $G_k(r)$, que viene dado por una potencia universal del logaritmo de la distancia $\ln r$ (Nahum *et al.*, 2013b):

$$G_k(r) = \frac{C_k}{(\ln r/r_0)^{\alpha_k}}, \quad r_0 = \Lambda^{-1} e^{-\frac{2\pi K}{2-n}}, \quad (5.2)$$

con C_k , r_0 constantes no universales y donde el exponente en el denominador depende de k y de la fugacidad de los loops n ,

$$\alpha_k = \frac{k(k+n-2)}{2-n}. \quad (5.3)$$

Resulta interesante destacar que a pesar de que la rigidez K fluye a infinito en la fase de Goldstone, Sec. 1.3.1, algo que normalmente se asociaría a un orden

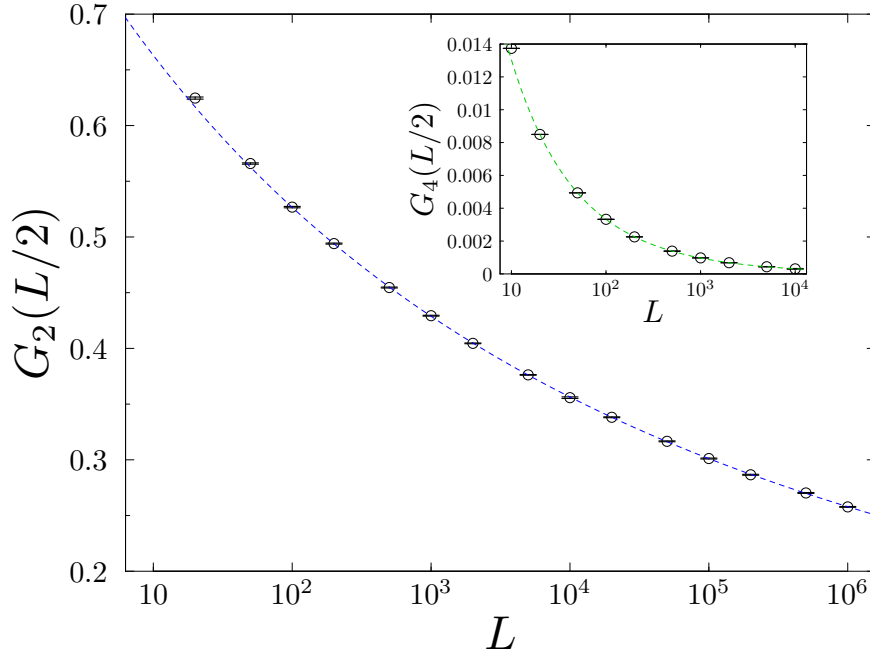


Figura 5.5: Funciones de correlación de *sandía* de dos y cuatro patas G_2 y G_4 en la fase de Goldstone. Los fiteos son de la forma $G_k = \tilde{C}_k(\ln L/r_k)^{\tilde{\alpha}_k}$ ($k = 2, 4$), véase el texto.

de largo alcance, *todas* las funciones de correlación G_{2l} decaen a cero a distancias largas para $n > 0$.

Podemos estudiar las formas logarítmicas de (5.2) numéricamente, observando el comportamiento de las correlaciones a una distancia fija, y comprobar que en efecto estas son las adecuadas y el valor de los exponentes universales α_k coinciden con los predichos. La figura 5.5 muestra $G_2(L/2)$ y $G_4(L/2)$ para sistemas $L \times L$ con condiciones de contorno periódicas, donde L alcanza valores de $L = 10^6$ para G_2 y $L = 10^4$ para G_4 . Las simulaciones son en $p = q = 1/2$. Ajustamos G_2 y G_4 a funciones de la forma $G_k = \tilde{C}_k(\ln L/r_k)^{-\tilde{\alpha}_k}$, lo cual da unos exponentes consistentes con la relación (5.3):

$$\tilde{\alpha}_2 = 1.9(1) \qquad \tilde{\alpha}_4 = 12.5(10). \qquad (5.4)$$

Además, tenemos que $\ln r_2 = -15.4(14)$, $\ln r_4 = -18(2)$, valores consistentes con el hecho de que r_0 es compartido por diferentes G_k en la ecuación (5.2).

5.3.2. Número de curvas extendidas

El observable n_w definido en la Sec. 3.4, como el número de curvas que atraviesan una muestra desde un borde al otro, está directamente relacionado con la rigidez del modelo sigma, K . Así, el comportamiento logarítmico que se sigue de la función beta (1.45) se puede observar empíricamente ahí.

De forma analítica, se puede realizar un calculo del n_w , mediante la correspondencia entre el modelo de loop y la teoría de campos para el modelo de espines (Nahum *et al.*, 2013b), aunque debe ser extendida al caso en el que hay enlaces sueltos en los bordes. Aquí damos un pequeño resumen del procedimiento. Tomamos los espines, que viven en estos enlaces sueltos, con una orientación fija, con

$$\frac{\vec{s}_{\text{top}}}{\sqrt{n}} = (\cos \theta, \sin \theta, 0, \dots, 0), \quad \frac{\vec{s}_{\text{bottom}}}{\sqrt{n}} = (1, 0, \dots, 0) \quad (5.5)$$

en los contornos de arriba y abajo respectivamente (usamos la normalización $\vec{s}^2 = n$). La expansión gráfica de la teoría de campos va otra vez como en la sección 1.3.1, excepto que las curvas que atraviesan el sistema adquieren un peso adicional $\cos \theta$.²

Denotando la función de partición con las condiciones de contorno anteriores como $Z(\theta)$, tenemos entonces que

$$\langle (\cos \theta)^{n_w} \rangle = \frac{Z(\theta)}{Z(0)}. \quad (5.6)$$

Como en la fase de Goldstone la rigidez del modelo sigma fluye a valores grandes, la parte de la derecha puede calcularse sólo con soluciones clásicas y con las apropiadas condiciones de contorno. Si x es la coordenada a lo largo del cilindro, estas soluciones son

$$\vec{s} = \pm(\cos \phi(x), \sin \phi(x), 0, \dots, 0), \quad \phi(x) = \frac{x(\theta + \pi m)}{L}. \quad (5.7)$$

²Los loops en el interior y las curvas cuyos dos cabos están en el mismo borde retienen una fugacidad n . Por ejemplo, una curva cuyos cabos estén en el borde superior pueden bien tener color $a = 1$, en cuyo caso tendrá un peso $n \cos^2 \theta$, o color $a = 2$, cuando el peso sea $n \sin^2 \theta$, y la suma da n . Las curvas que cruzan la muestra en cambio tienen que tener color $a = 1$, y peso $n \cos \theta$.

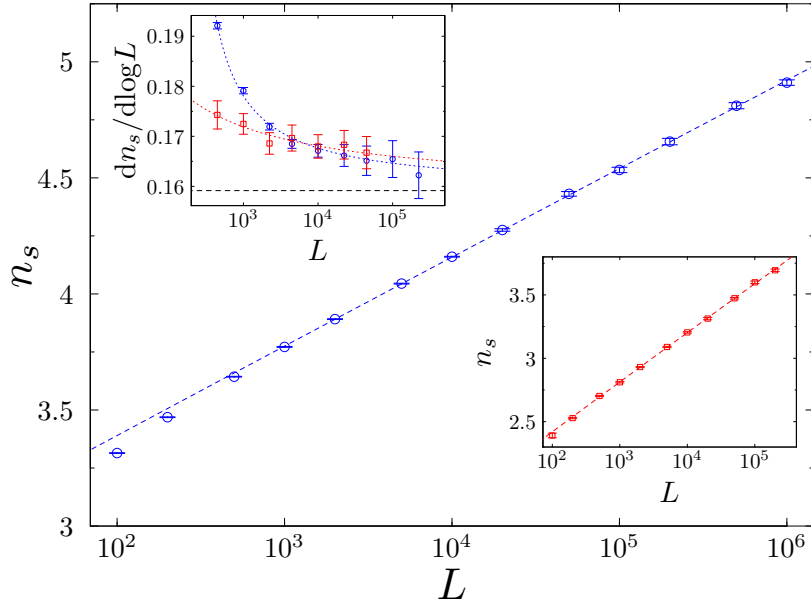


Figura 5.6: El número de curvas extendidas $\langle n_w \rangle$ aumentando logarítmicamente con el tamaño del sistema en la fase de Goldstone. Panel principal: $p = 1/2$, $q = 1/2$; panel inferior: $p = 1/3$, $q = 1/2$. Los ajustes son a $\frac{1}{2\pi}(\ln L/L_0 + \ln \ln L/L_0)$ con $\ln L_0 \simeq -13.78$, -8.06 para $p = 1/2$ y $p = 1/3$ respectivamente. El panel superior muestra las estimaciones numéricas de las pendientes $d\langle n_w \rangle/d \ln L$ representadas frente a $\ln L$. La ecuación de la función beta para la rigidez predice su convergencia a $1/2\pi$ (línea horizontal).

Valores pares e impares de m están permitidos, pero cuando L y m son ambos impares el factor de Boltzmann adquiere un signo menos adicional, como se puede ver en la función de partición discreta.

Estas soluciones clásicas permite calcular la acción y a su vez obtener $\langle (\cos \theta)^{n_w} \rangle$. Fijando $\cos \theta = e^{-x}$, expandiendo en x y quedandonos con el término dominante, podemos obtener todos los momentos del WN. Encontramos entonces que todos los momentos son proporcionales a una rigidez renormalizada \tilde{K} . En particular, el WN promedio viene dado por la relación

$$\langle n_w \rangle \sim \frac{2-n}{2\pi} \ln \frac{L}{L_0}. \quad (5.8)$$

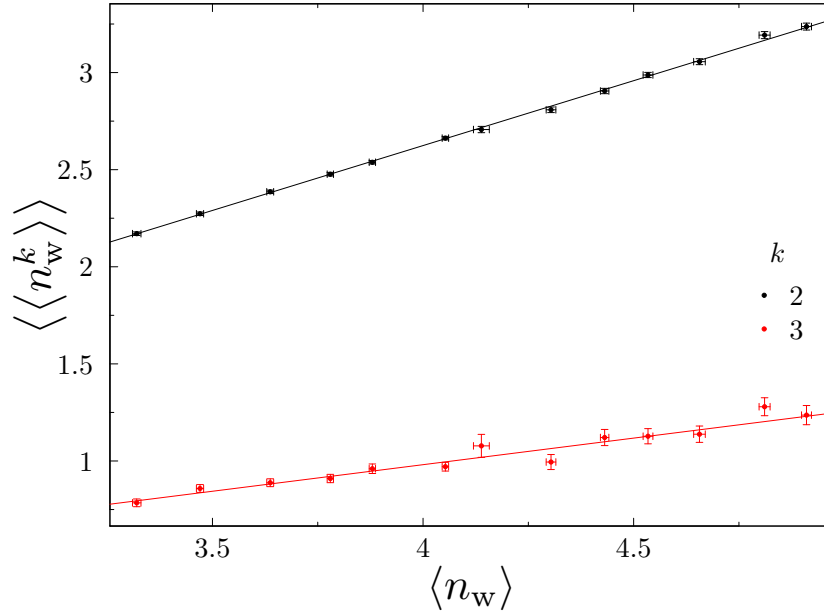


Figura 5.7: Cumulantes del WN frente al promedio del mismo para diferentes tamaños, en $p = 1/2$. Las líneas rectas son ajustes lineales a los datos, con pendientes $0.668(5)$ para $k = 2$ y $0.274(18)$ para $k = 3$.

Este comportamiento logarítmico (para $n = 1$) se ve en la figura 5.6 para dos puntos en la fase de Goldstone. Hemos ajustado los datos para tamaños grandes a una forma ligeramente más precisa $\langle n_w \rangle \simeq \frac{1}{2\pi} (\ln L/L_0 + \ln \ln L/L_0)$, que proviene de incluir el término subdominante $O(1/K)$ en la función beta de la rigidez (1.45). En el inset superior de la figura 5.6 se representa el valor numérico de la pendiente $d\langle n_w \rangle / d \ln L$, la cual parece converger lentamente a $1/2\pi$ para L grandes.

Que todos los momentos sean proporcionales a la misma rigidez renormalizada implica que sus cocientes son números universales y puede ser comparados con los datos:

$$\langle\langle n_w^2 \rangle\rangle = \frac{2}{3} \langle n_w \rangle, \quad \langle\langle n_w^3 \rangle\rangle = \frac{4}{15} \langle n_w \rangle. \quad (5.9)$$

Estas relaciones se verifican con buena precisión. Representamos en la figura 5.7 los dos momentos anteriores frente a $\langle n_w \rangle$ para $p = q = 1/2$ y varios tamaños L . Observamos que producen líneas rectas con pendiente $0.668(5)$ y $0.274(18)$, para el segundo y tercer momento respectivamente en acuerdo con 5.9. Podemos destacar,

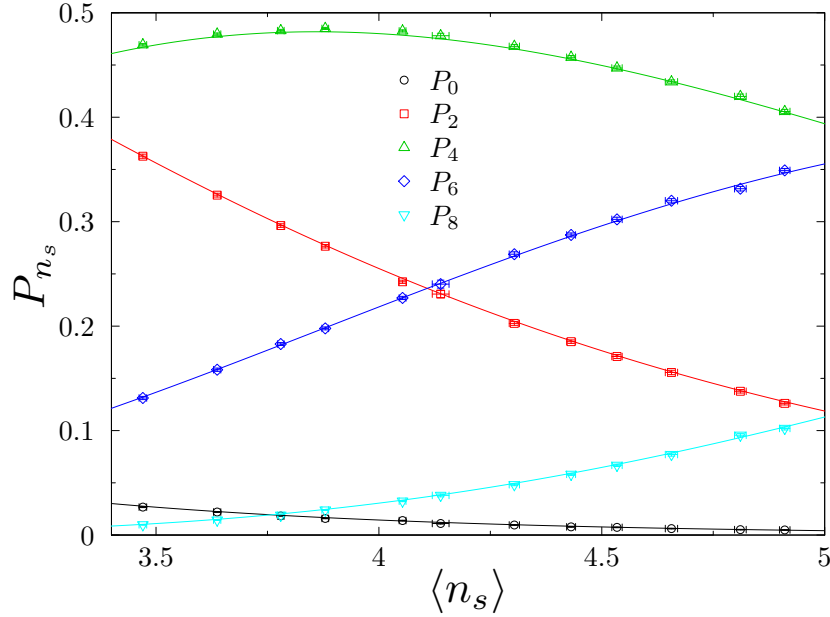


Figura 5.8: Probabilidades P_{n_w} de que haya en el sistema n_w loops que lo abarquen, representadas en función de $\langle n_w \rangle$ (datos para $p = q = 1/2$). Las curvas son expresiones analíticas del tipo (5.10), donde $\widetilde{K} = \langle n_w \rangle$.

que el escalado de los momentos implica que cuando $\langle n_w \rangle$ se hace muy grande, la distribución de probabilidad $P(n_w)$ del WN se hace gaussiana (olvidándonos de las colas).

Por otra parte, también se puede extraer la distribución de probabilidades para n_w enteros y pequeños. Para números pares, por ejemplo, obtenemos

$$P_0 = 2e^{-\pi^2 \langle n_w \rangle / 8}, \quad P_2 = \frac{\pi^2 \langle n_w \rangle^2 - 4 \langle n_w \rangle}{4} e^{-\pi^2 \langle n_w \rangle / 8}. \quad (5.10)$$

En la figura 5.8 las expresiones para P_0, \dots, P_8 se comparan con los datos (en $p = q = 1/2$ y L en el rango $10^2 - 10^6$) mostrando un acuerdo bastante notable. Destacamos que no hay parámetros libres en estas curvas.

5.3.3. Distribución de longitudes

La distribución de longitudes para un loop sirve también para caracterizar la fase de Goldstone. Para $n = 1$, la probabilidad de que un loop elegido aleatoriamente

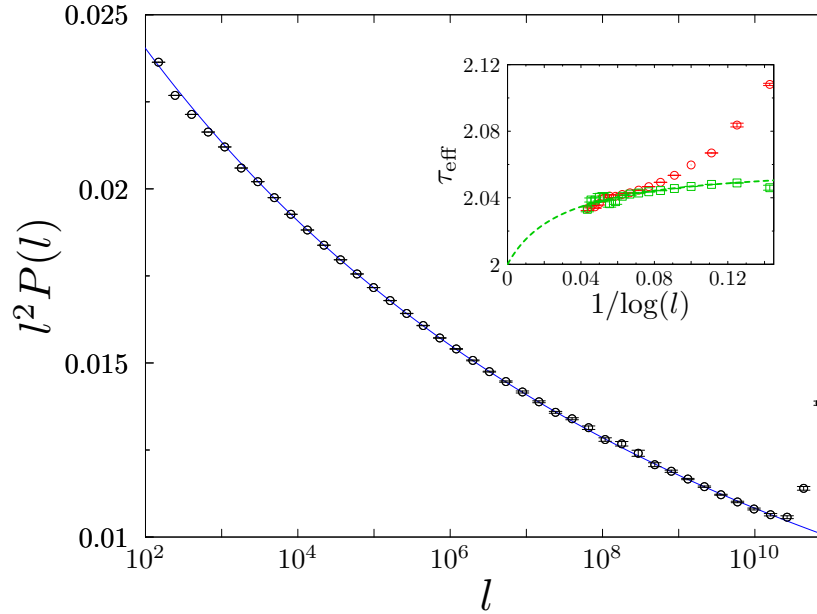


Figura 5.9: Panel principal: La distribución de probabilidades $P(l)$ de la longitud de un loop en la fase de Goldstone. Multiplicada por l^2 para quitar la ley de potencias esperada, dejando sólo la dependencia logarítmica. El ajuste es tal y como se describe en el texto, con $\ln l_0 = -33.7(8)$. Los datos son para $p = q = 1/2$. Inset: dos formas de definir el valor efectivo por tamaño finito del exponente τ_{eff} (véase texto). Cuadrados verdes: datos provenientes de $P(l)$, junto con el ajuste (línea discontinua) proveniente de la ecuación 5.11 ($\ln l_0 = -32.7$). Círculos rojos: datos obtenidos de $\Delta X(l)$.

de una sopa de loops tenga longitud l decae como

$$P(l) \propto \frac{1}{l^2 \ln^2(l/l_0)} \quad (5.11)$$

para l grandes. La forma de esta distribución de longitudes para un loop se puede advertir mediante el comportamiento de RG lejos de la fase de Goldstone, al añadir una perturbación que provoque una ruptura de simetría (Nahum *et al.*, 2013b).

La figura 5.9 muestra la distribución obtenida numéricamente para loops de longitudes hasta $l \sim 10^{10}$. Multiplicamos $P(l)$ por l^2 de forma que quede expuesta la corrección logarítmica, que podemos ajustar con la forma $a(\ln l/l_0)^{-c}$. Así,

obtenemos

$$c = 2.03(3) \quad (5.12)$$

en extraordinario acuerdo con (5.11).

Nótese que $P(l)$ difiere en un factor l de la distribución de longitudes de los loops que pasan por un enlace dado,

$$P_{\text{enlace dado}}(l) \propto l P(l), \quad (5.13)$$

simplemente porque loops más largos visitan más enlaces. Trabajos previos en SAT (*self-avoiding trails*) (Owczarek y Prellberg, 1995; Ziff *et al.*, 1991), que mapean al modelo de loops en $n = 1$, $p = 1/3$ y $q = 1/2$ (Nahum *et al.*, 2013b), consideraron una probabilidad $Q(l)$ que puede ser escrita como

$$Q(l) = \int_l^\infty P_{\text{enlace dado}}(l') dl'. \quad (5.14)$$

Viendo los loops como las trayectorias de los caminantes, $Q(l)$ es la probabilidad de que un caminante no haya vuelto al punto de origen tras l pasos. Las ecuaciones (5.11), (5.13) y (5.14) dan $Q(l) \sim l/\ln l$. Esto concuerda con el escalado encontrado numéricamente en los trabajos de Owczarek y Prellberg (1995); Ziff *et al.* (1991).

Para un colectivo crítico de loops genérico, existe un exponente crítico $\tau \geq 2$ que rige el comportamiento de $P(l) \sim l^{-\tau}$. Por otra parte, el tamaño máximo promedio ΔX en la dirección X de un loop escala con su longitud como $\Delta X \sim l^{1/d_f}$. La dimensión fractal d_f está vinculado a τ por la relación

$$\tau = 2/d_f + 1. \quad (5.15)$$

En la fase de Goldstone, $\tau = d_{\text{eff}} = 2$, más correcciones logarítmicas. Podemos definir las estimaciones de tamaño finito τ de forma efectiva bien usando $d \ln P(l)/d \ln l$ o bien usando $d \ln \Delta X/d \ln l$ y la relación de escala. El modelo sigma implica que estas cantidades, representadas en la figura 5.9, deben converger al valor dos pero con diferentes correcciones logarítmicas. Aunque como se puede observar, para estar cerca de este valor se requieren tamaños enormes.

Aquí, ΔX está definida como la extensión media de un loop en una de las direcciones de coordenadas. Una cantidad similar, la media cuadrática de la distancia de punta a punta de un camino abierto en el modelo ISAT, fue considerado numéricamente por Owczarek y Prellberg (1995), y encontraron también correcciones logarítmicas al escalado browniano. Algo que queda pendiente como problema interesante es el cálculo analítico de esta cantidad.

5.4. Líneas críticas

Las líneas críticas separan la fase de Goldstone de las otras fases con loops cortos. En el lenguaje del modelo \mathbb{RP}^{n-1} , se corresponden con las transiciones orden-desorden en las cuales los vórtices \mathbb{Z}_2 se liberan. En esta sección damos estimaciones numéricas de los exponentes críticos para esta transición en $n = 1$. En Nahum *et al.* (2013b) se considera también un tratamiento aproximado de RG para los vórtices (Fu y Kane, 2012; König *et al.*, 2012), que proporciona estimaciones de los exponentes críticos, aunque estas predicciones no son muy exactas.

5.4.1. WN crítico, ν , y y_{irr}

En un punto crítico, esperamos que la cantidad adimensional n_w (definida en la sección 5.3.2) tome un valor universal. Esto se puede manifestar en los cruces de las diferentes curvas en la figura 5.10, en las cuales se muestra el n_w en función de q para $p = 1/2$ y cilindros de diversos tamaños. La figura 5.11 muestra la misma cantidad, muy cerca del punto crítico e incluye tamaños mucho mayores (hasta $L = 128\,000$). El panel principal de la figura 5.12 muestra datos para $p = 0.3$, aquí los efectos de tamaño finito son mucho mayores y son visibles en la deriva de los cruces.

Recordamos el procedimiento para el colapso de escala. La forma básica de la función de escala para n_w es

$$n_w = h(x), \quad x = L^{1/\nu} \delta q, \quad (5.16)$$

donde $\delta q = q - q_c$. Tenemos en cuenta también la dependencia no-lineal de la

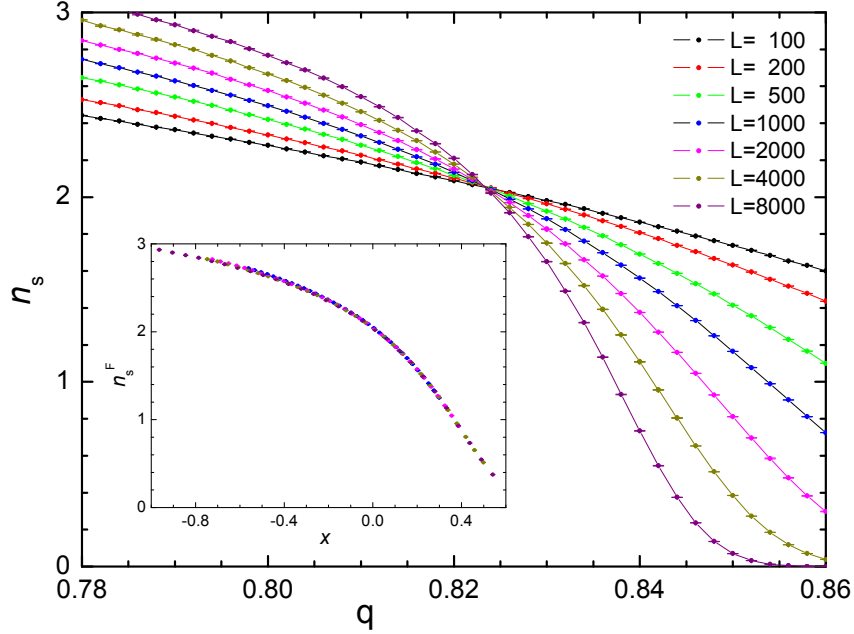


Figura 5.10: Panel principal: la media del n_w en función de q con $p = 1/2$ y para varios tamaños, en el que se muestra un cruce en la transición. Recuadro: Datos colapsados siguiendo las ecuaciones (5.17), (5.18).

variable de escala x con δq , reemplazando la segunda ecuación anterior con

$$x = L^{1/\nu} \delta q \left(1 + \beta_1 \delta q + \beta_2 \delta q^2 \right), \quad (5.17)$$

y correcciones de tamaño finito con un exponente irrelevante (negativo) y_{irr} de la forma:

$$n_w = h(x) \left(1 + L^{y_{\text{irr}}} (\beta_3 + \beta_4 x) \right). \quad (5.18)$$

Un escalado razonable se puede obtener ajustando los valores de q_c , β_i , ν e y_{irr} . Para encontrar estos valores ajustamos n_w a la forma (5.18), construyendo $h(x)$ mediante B-splines cúbicos con 22 puntos de control. El resultado para $p = 1/2$ se muestra en el panel interior de la figura 5.10. Concretamente, lo que se presenta es $n_w^F = n_w / (1 + L^{y_{\text{irr}}} (\beta_3 + \beta_4 x))$, que debería ser igual a la función de escala $h(x)$ dado (5.18).

Las estimaciones del exponente de la longitud de correlación y del WN crítico

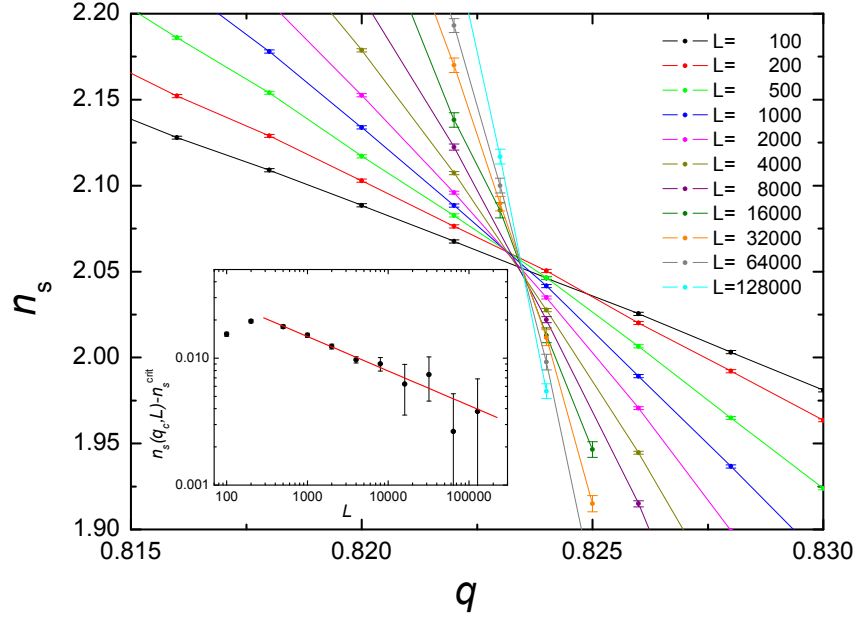


Figura 5.11: Panel principal: comportamiento del WN en $p = 1/2$ muy cerca del punto crítico. Nótese que los tamaños son mucho mayores que los usados en la figura 5.10. Recuadro: correcciones de tamaño finito al WN en el punto crítico (escala logarítmica) y el fito a una ley de potencias proporciona una estimación de y_{irr} .

(universal) obtenidos de los datos en $p = 1/2$ mediante este escalado son:

$$\nu = 2.745(19) \qquad n_w^{\text{crit}} = 2.035(10). \qquad (5.19)$$

Aunque no podemos fijar el valor del exponente irrelevante de manera muy precisa, para el ajuste completo obtenemos

$$y_{\text{irr}} \in -(0.2, 0.35). \qquad (5.20)$$

Una estimación directa de las correcciones de tamaño finito del WN en el punto crítico dan un resultado compatible con esto, el ajuste del recuadro dentro de la figura 5.11 se corresponde con $y_{\text{irr}} = -0.272$.

Los resultados para $p = 0.3$ son consistentes con el argumento de que todos los puntos en las líneas críticas deben estar en la misma clase de universalidad, sin embargo, las barras de error son mayores en parte porque los efectos de tamaño

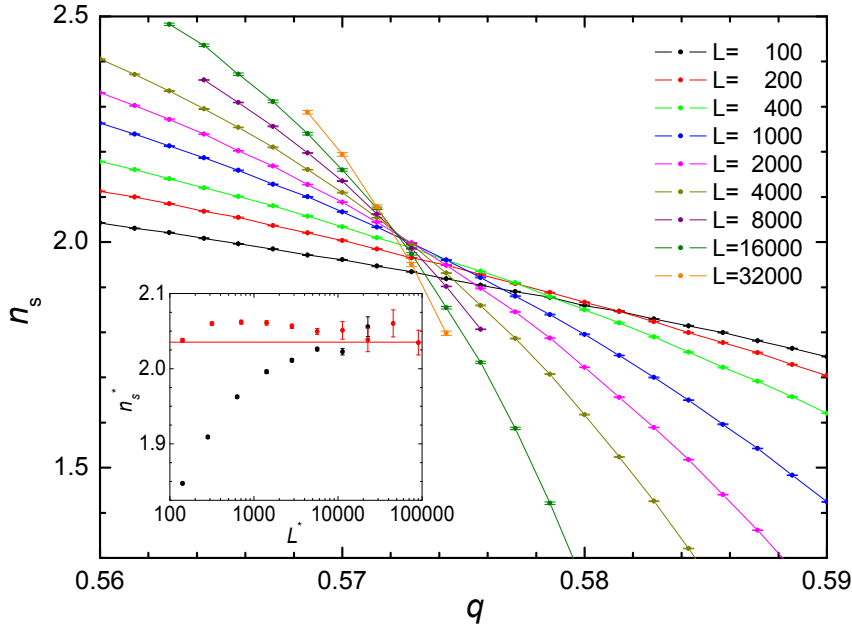


Figura 5.12: Panel principal: WN en $p = 0.3$ (cerca del punto crítico) donde se muestra una mayor deriva de los puntos de cruce que en $p = 1/2$ (sin embargo, la escala es diferente). Recuadro: la coordenada vertical n_w^* es el cruce del WN entre dos tamaños consecutivos y L^* es la media geométrica de los tamaños. Puntos rojos y negros se corresponden con $p = 1/2$ y 0.3 respectivamente. La línea horizontal es el valor asintótico estimado (5.19).

finito son mayores y se han usado tamaños más pequeños. Aquí, encontramos que $\nu = 2.87(10)$ y $n_w^{\text{crit}} = 2.07(3)$. Respecto a la convergencia a un n_w^{crit} común, véase el panel interior dentro de la figura 5.12 que muestra las coordenadas verticales de los cruces entre las curvas de WN para tamaños consecutivos.

5.4.2. G_k , dimension fractal y distribución de longitudes

Ahora, consideramos las funciones de correlación de sandía G_2 y G_4 introducidas en la sección 5.3.1. Evaluamos estos correladores a una distancia $L/2$ para un determinado rango de tamaños L , véase la figura 5.13. Los datos son para el punto crítico en $p = 1/2$.

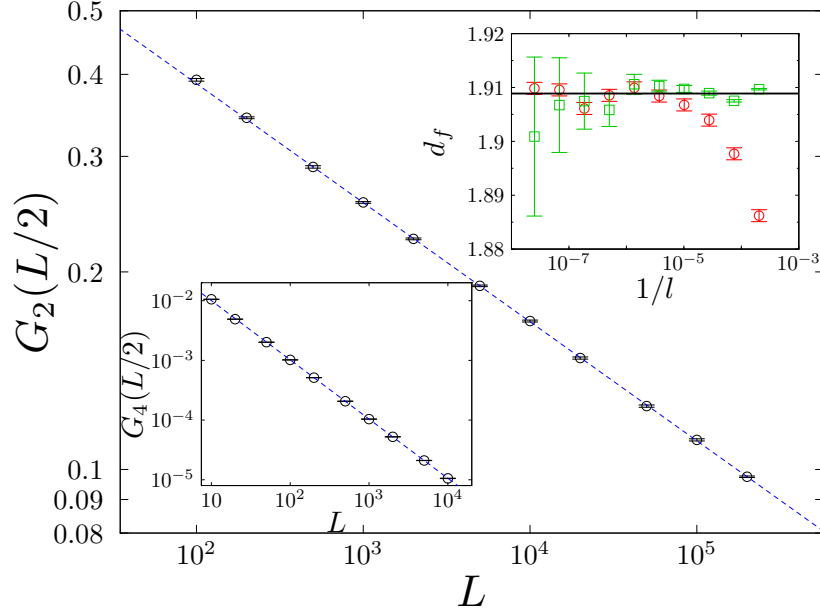


Figura 5.13: Panel principal: el correlador de sandía de dos patas G_2 en el punto crítico. La ley de potencias $G_2 \sim L^{-2x_2}$ da la dimensión fractal d_f vía (5.23). El panel superior compara este valor (indicado con una línea negra horizontal) con las estimaciones de tamaño finito proveniente de ΔX (círculos rojos) y $P(l)$ (cuadrados verdes), véase texto. El panel inferior muestra la correlación de sandía de cuatro patas G_4 .

Ajustando a leyes de potencias de la forma

$$G_k(L/2) \propto L^{-2x_k}, \tag{5.21}$$

obtenemos las dimensiones de escala para los correladores de dos y cuatro patas:

$$x_2 = 0.091(1), \quad x_4 = 0.491(1). \tag{5.22}$$

La relación de escala bidimensional

$$d_f = 2 - x_2 \tag{5.23}$$

da una dimensión fractal de los loops críticos

$$d_f = 1.909(1). \tag{5.24}$$

Podemos obtener estimaciones independientes de d_f mediante $\Delta X(l)$, el tamaño lineal medio de un loop de longitud l , y de la distribución de longitudes loops $P(l)$ y las relaciones de escala (5.15). Las estimaciones de tamaño finito para d_f provenientes de las estimaciones numéricas de $d \ln \Delta X / d \ln l$ y $d \ln P(l) / d \ln l$ se exponen en el panel interior dentro de la figura 5.13. Ambas cantidades son consistentes con (5.24).

5.5. Consecuencias y Conclusiones

Hemos analizado un modelo de loops bidimensionales que presenta una fase con loops extendidos, donde las correlaciones decaen de forma logarítmica. Hemos sido capaces de caracterizar esta fase, determinando las formas de la correlación, la distribución de probabilidades de la longitudes de los loops y el comportamiento del WN. Estas propiedades son compatibles con la descripción por modelos sigma del tipo réplica, familiares en problemas de física en localización de Anderson y polímeros.

También hemos dado una descripción de las transiciones de fase que se producen en la línea crítica del diagrama de fases, obteniendo por primera vez los exponentes críticos, Sec. 5.4. Sería deseable obtener resultados exactos para el comportamiento crítico, pero el desarrollo de aproximaciones analíticas más precisas parece necesario para realizarlo. Desde el punto de vista numérico, el trabajo del modelo de loop crítico puede ser extendido a otros valores de n , bien vía Monte Carlo o bien a través de una matriz de transferencia (Ikhlef *et al.*, 2007), para poder caracterizar las propiedades de toda la familia de puntos críticos para $0 < n < 2$. El IPLC, descrito en 1.2.6, es un candidato para hacer más simulaciones puesto que la fase extendida debe tener las mismas propiedades que las del CPLC, pero no hay ningún trabajo hasta ahora.

La versión tridimensional de estos modelos de loops es un modelo en el que también hemos trabajado y esperamos publicar próximamente. En estos modelos para $n = 1$, se observa una transición de una fase con loops cortos a otra con

loops brownianos en una clase de universalidad diferente a las del modelo C, y por tanto los loops orientados. Estimaciones preliminares de los exponentes críticos proporcionan valores de $\nu \approx 0.91$ y dimensión fractal $d_f \approx 2.54$. Las características de la fase extendida vienen descritas en el capítulo 3, junto a los modelos orientados, y su distribución es una Poisson-Dirichlet con parámetro $\theta = 1/2$.

La conexión entre el CPLC en $n = 1$ y fermiones desordenados permanece como una cuestión abierta. Para empezar, si recordamos la situación del modelo de loops sin cruces ($p = 0$), éste se puede relacionar con localización al menos de dos formas. Primero, como un caso límite del modelo de Chalker-Coddington para el efecto Hall cuántico (Chalker y Coddington, 1988), en el cual las matrices de dispersión en un nodo se hacen *clásicas*, y lleva a un modelo de loop sin cruces, es decir, percolación estándar. Esta es la descripción semiclassical de la transición Hall cuántica (Trugman, 1983), pero dado que el efecto túnel cuántico no se tiene en cuenta ahí, no captura correctamente el comportamiento universal. Sin embargo, el modelo de loops tiene una segunda relación con localización que es menos obvia y que no depende de la supresión del efecto túnel. Ésta viene dada por un mapeo exacto desde un modelo de red para la transición Hall cuántica de espín (un análogo de la transición Hall cuántica, pero en la clase de simetría C en vez de en la A) al modelo de loops (Gruzberg *et al.*, 1999; Beamond *et al.*, 2002; Mirlin *et al.*, 2003; Cardy, 2010).

Para los loops con cruces ($p > 0$) se puede construir también un mapeo del primer tipo tomando el límite *clásico* en un modelo de red. Sin embargo, las consecuencias son bastante triviales y no parecen concluir nada sobre el modelo cuántico. Sería interesante saber si la analogía con localización va más allá de esto, en particular, si el comportamiento crítico del modelo de loops se puede relacionar con el de un problema real de localización. Resulta interesante comprobar que el valor que obtenemos de ν es bastante cercano a las estimaciones de ν para la clase simpléctica (Asada *et al.*, 2002; Markoš y Schweitzer, 2006; Mildenerger y Evers, 2007; Obuse *et al.*, 2010).

Volviendo a los modelos de loops, podemos decir que hay bastante conocimiento sobre la tipología de puntos críticos en los modelos de loops sin cruces, muchos de los

cuales entran dentro de la familia de clases de universalidad de un único parámetro en SLE_κ . En general, los cruces llevan a los modelos fuera de esta familia. Aquí hemos discutido un línea de puntos críticos que los ejemplifica, pero ciertamente no esperamos que esto haya agotado todas las posibilidades de nuevos comportamientos críticos.

Summary

Many problems in statistical mechanics can be framed in terms of random curves and their geometrical properties. These curves when are closed form what we call loops, and they can be considered the degrees of freedom of a particular class of statistical mechanic problems, the so-called loop models. Loops appear in many areas in physics as topological defects, such as domain walls in 2D and vortices in 3D, Anderson localization (Gruzberg *et al.*, 1999; Beamond *et al.*, 2002), polymers (Owczarek y Prellberg, 1995; Foster, 2009), frustated magnetism (Jaubert *et al.*, 2011), turbulence (Bernard *et al.*, 2006), quantum chaos (Bogomolny *et al.*, 2007), cosmology (Vachaspati y Vilenkin, 1984) or optics (O’Holleran *et al.*, 2008). They also appear in many cluster algorithms in Monte Carlo simulations and in Quantum Monte Carlo techniques (Sandvik, 2010a). This work is devoted to the study of loop models involving close-packed loops with fugacity n on three-dimensional lattices (Ch. 3 and 4) and on a two-dimensional lattice (Ch. 5). The models exhibit phases of two types as a coupling constant is varied: in one, all loops are finite, and in the other, some loops are infinitely extended.

Completely-packed three-dimensional loop models with n colors

We have considered first (Ch. 3) a class of three-dimensional loop models that are prototypes for the mentioned ensembles. The loops are defined in a directed lattice of coordination number four that has two links entering each node and two links leaving. In each node the four links can be paired in two ways, α with probability p , and β with probability $1 - p$. The behaviour of the loops is described by the

partition function

$$Z_{\text{CPL}} = \sum_{\mathcal{C}} p^{N_p} (1-p)^{N-N_p} n^{\#\text{ loops}},$$

where \mathcal{C} is a configuration of N_p nodes in the state α . The factor $n^{\#\text{ loops}}$ represents a fugacity associated with the number of loops, bigger values of n favour configurations with more loops. For integer n there is a way to simplify the partition function. We can independently assign one of n possible colors to each loop and sum to all configurations of loops, $Z_{\text{CPL}} = \sum_{\mathcal{C}} \sum_{\text{colors}} p^{N_p} (1-p)^{N-N_p}$. This algorithm greatly improve the performance of the Monte Carlo with respect to the original, as there is no need to count the number of loops in a configuration. We have used this algorithm to simulate the model with integer values of $1 \leq n \leq 10$. These family of loop models exhibit transitions between phases with short loops and phase with at least one extended loop. On large scales, loops are Brownian in the phase with long loops and have a non-trivial fractal dimension at a critical point. We have been able to show that the loop models agree with a discretisation of \mathbb{CP}^{n-1} sigma models: the finite and infinite loop phases represent, respectively, disordered and ordered phases of the sigma model. These results can be found in Nahum *et al.* (2011, 2013c).

We have characterised the phase diagram for these loop models in two lattices, the three dimensional L and K lattices, Fig. 3.1. For the K-lattice there is a line of first-order transitions for values of $n \geq 4 > n_c$, where n_c is the value of n below which the phase transitions become continuous. The lowest estimate we find is $n_c = 3.0(2)$, Fig. 3.16. In the L-lattice, at $p = 1/2$ and $n \geq 5$ there is a line of first-order transitions between two different phases with short loops. We have found that this line should end at some value $4 < n^* < 5$, where it was thought to be a deconfined critical point. For $n = 4$, there is an extended phase near $p = 1/2$ and we do not find clear evidences of a first-order transition, despite what we could expect from universality and the results on the K-lattice. However, the proximity of the two phase transitions p_c and $1 - p_c$ and of the possible critical point n^* makes natural to expect a very long correlation length. We have shown that our simulations are compatibles with continuous transitions for $n = 1, 2$ and 3 . Our best estimates for the critical exponents are summarised in table 5.1.

For $n = 1$, Sec. 3.5.1, these two lattices meet the conditions for the exact mapping between some observables and properties of suitably chosen quantum lattice models (Gruzberg *et al.*, 1999; Beamond *et al.*, 2002). We have studied the phase transition and we have found new estimates of the critical exponents for the class C of three-dimensional Anderson transitions, compatibles with previous reported values (Ortuño *et al.*, 2009).

For $n = 2$, Sec. 3.5.2, we have shown that the phase transitions belong to the universality class of the $O(3)$ sigma models. We did it confronting the data to several procedures to show the complete agreement with the best estimates of the exponents for that universality class (Campostrini *et al.*, 2002). This also validates the lattice field theory description for the loop model, Eq. (1.47), and its long-distance description as a \mathbb{CP}^{n-1} sigma model.

For $n = 3$, Sec. 3.5.4, the behaviour of the observables we measured are compatibles with a continuous transition. We have characterised them near the critical point and we have extracted the critical exponents. As far as we know, the reported values for the critical exponents are the first estimates for the universality class of the \mathbb{CP}^2 sigma model. If this is indeed a new critical point, it implies the possibility of similar behaviour in two-dimensional quantum $SU(3)$ magnets. Recent results (Kaul, 2012) for a bilayer $SU(3)$ magnet are consistent with this.

L-lattice			K-lattice		
n	ν	η	n	ν	η
1	0.997(2)	-0.06(2)	1	0.987(10)	-0.07(3)
2	0.722(10)	0.04(8)	2	0.708(5)	0.04(3)
3	0.54(2)	0.21(4)	3	0.536(13)	0.23(2)

Tabla 5.1: Exponents ν and η in the three-dimensional L and K lattices.

With the appropriate (periodic) boundary conditions, in the extended phase the longest loops fill a finite fraction of the system. In such a phase it is natural to ask about the distribution of loop lengths. Goldschmidt *et al.* (2011) made a striking conjecture with the support of simulations (Grosskinsky *et al.*, 2012), the distri-

bution for long loops in three dimensional systems is Poisson-Dirichlet. We have presented results supporting this conjecture and expanding it with our loop models (Nahum *et al.*, 2013a), Sec. 3.6. Here, we have shown that the resulting joint length distribution for macroscopic loops is Poisson-Dirichlet with a parameter θ fixed by the loop fugacity and by symmetries of the ensemble. Remarkably, two features are sufficient to fix the universal behaviour in these ensembles. One is whether or not the loops are directed. The second is the fugacity associated with loops in the ensemble. By studying the loop models for integer fugacity $1 \leq n \leq 5$, we have been able to access values of the PD integer parameter $1 \leq \theta \leq 5$. We also have studied a slightly different loop model in the three dimensional L-lattice, where the loops are allowed to cross. These loops cannot be oriented consistently, and for $n = 1$ gives access to the value of the PD parameter $\theta = 1/2$. We have also been able to pin down the features of the length distribution for shorter loops. Particularly, we have shown its diffusive behaviour as a random walk.

Deconfined criticality

We have considered another version of these loop models in the L-lattice, Ch. 4. The line $p = 1/2$ in the L-lattice is specially symmetric: none of the four possible states with minimum-length loops is favoured. Adding an interaction that localises the loops but preserves this symmetry drives the system to a new phase transition. The new model is described by assigning the value $\sigma(i) = \alpha = -1$ to the node i in one of the states and $\sigma(i) = \beta = 1$ in the other. The new partition function can be written as

$$Z = \sum_{\{\sigma(i)\}} p^{N_p} (1-p)^{N-N_p} n^{\#\text{ loops}} \exp \left[\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle_2} \sigma(i)\sigma(j) \right], \quad (5.25)$$

where $\langle i,j \rangle_2$ are second nearest neighbours.

We have studied this new phase transitions for $n = 1, 2$ and 3 . For $n = 2$, we have found that the phenomenology of this model as J increases is compatible with the description of a deconfined critical point (Senthil *et al.*, 2004a,b). Moreover, we are able to see similar problems as the paradigmatic system of study in this

universality class, the model $J - Q$ (Sandvik, 2007; Melko y Kaul, 2008; Jiang *et al.*, 2008; Kuklov *et al.*, 2008; Sandvik, 2010b), and several other models related to the $SU(2)$ symmetry (Harada *et al.*, 2013; Pujari *et al.*, 2013). We have used system sizes larger than any other previously reported in the literature for this type of transition.

First, we describe the phase diagram, Fig. 4.4. All of the observables seem to give the same extrapolated value for the critical point at $J_c = 0.088500(2)$. For these finite-size systems, we have shown that there is a phase transition from an extended phase to a localised phase with symmetry $U(1)$. Both phases can be *observed* with their corresponding order parameter, \mathcal{O}_s and φ . Increasing J , the system cross-over to another localised phase with symmetry \mathbb{Z}_4 , Sec. 4.6. We have presented an scaling collapse compatible with the cross-over going toward the critical J_c , i.e., for a macroscopic system the $U(1)$ phase is confined to the critical point. We have characterised this cross-over and we have found the exponent associated $a_4 = 1.01(9)$, estimate that agrees with previous reported values (Lou *et al.*, 2007).

The behaviour of the observables gives contradictory information for the character of the transition, Sec. 4.4 and 4.5. We have found the following facts supporting a first-order transition in this model. First, we have failed to obtain scaling collapses for most observables. On one hand, this can be explained by the strong finite-size dependence of the effective critical exponents. On the other, the winding number (related to the stiffness in the field theory) seems to be diverging at the critical point, although the values are still small. These two reasons can be also thought as grounds for the first-order scenario. Furthermore, we have shown a disagreement between different estimates of the anomalous dimensions and as a result the failure of the hyperscaling relations, at least for the range of system sizes simulated. And last, we have presented the distribution for the energy near the critical value J_c . This distribution is exceptionally wide and the behaviour of the kurtosis could support the scenario of a two-peaks distribution.

From the opposite point of view, we have argued how this transition can be continuous. First, we have proposed three quantities where there are not big finite-

size effects. In particular, the background-subtracted Binder's parameter seems to agree well with a power-law behaviour. If this behaviour remains for larger sizes, the scenario with a two-peaks distribution in the energy would be difficult to explain. The exponent $\nu = 0.466(12)$ obtained from this quantity, for the whole range of sizes, agrees statistically with the estimates of ν from the rest of observables with larger sizes, $L \geq 200$. We have also proposed a phenomenological argument to explain the failure of the hyperscaling relations. For the range of sizes simulated, the winding number seems to be diverging, however it does it sublinearly, which means that the correlation length (or the inverse of the conductivity in Anderson analogy) is still diverging. We have characterised this divergence as a power law $L^{0.42}$ for the larger sizes. If we take into account this divergence in the relations between the critical exponents, we get agreement between the anomalous dimension obtained from β_s and the distribution of loop lengths and the fractal dimension.

The evidence we have presented clearly rules out two scenarios: a standard second order phase transition and a strong first-order phase transition. In case the phase transition was weakly first-order, it would be necessary to explain at least two things. First, why the modified Binder's parameter agrees with a power law, Fig. 4.18. Second, why the correlation length have strange behaviour, Fig. 4.10. In particular, a simple extrapolation of the correlation length to the value of $J_c = 0.08850$ implies a scale length of the order of $\xi_{J_c} \sim 67$, however at a system size of $L = 640$ it does not show any clear evidence of a first-order behaviour. Or similarly, all the effectively defined exponents show a change of behaviour before size $L = 100$ and they remain changing up to the biggest sizes that we have simulated. In the other case, if the phase transition is continuous, it remains to be explained another two points. First, how a diverging winding number fits in a continuous phase transition. Second, why the hyperscaling relations seems to fail and whether is possible to have very small exponent β and such a big anomalous dimension. We have tried to give a phenomenological answer to this second question.

In summary, we have shown that our model presents similar behaviour as other candidate models for this universality class, some of them can be find in Sandvik

(2007); Kaul y Melko (2008); Kaul y Sandvik (2012); Alet *et al.* (2006); Farnell *et al.* (2011); Albuquerque *et al.* (2012); Beach *et al.* (2009); Harada *et al.* (2013); Pujari *et al.* (2013). We have given arguments supporting a scenario with a continuous phase transition between an extended phase, related to a Néel state, and a localised phase with symmetry $U(1)$ which cross-over to another localised phase with symmetry \mathbb{Z}_4 . We believe that with this loop model we have proposed a notable candidate to show a deconfined critical point related to $SU(2)$ magnets. We expect to publish this work soon (Nahum *et al.*, n.d.).

Completely-packed two-dimensional loop models with crossings

In chapter 5, we have studied a different family of two dimensional loop models where the loops are allowed to cross. The loops are defined in the square lattice where in each node the four links are paired in one of three possibilities. We use p as the probability of the pairing being the one with a crossing. The probabilities $(1-p)q$ and $(1-p)(1-q)$ are associated to the other two possibilities and are staggered (swapped) on the two sublattices of the square lattice. The so-called completely-packed loop model with crossings (CPLC) is defined by the partition function

$$Z_{\text{CPLC}} = \sum_{\mathcal{C}} p^{N_p} [(1-p)q]^{N_q} [(1-p)(1-q)]^{N_{1-q}}, \quad (5.26)$$

where \mathcal{C} is a configuration with N_p pairings with crossings and N_q and N_{1-q} pairings of the other two types. At the boundary of the phase diagram, the loops can be consistently oriented, and the model is the standard completely-packed loop model *without crossings* in the L lattice ($p = 0$) and the manhattan lattice ($q = 0$ and $q = 1$). In the rest of the phase diagram, the universal behaviour of the two-dimensional loop model change dramatically from the previous models.

We have characterised the phase diagram of this loop model with extensive Monte Carlo simulations (Nahum *et al.*, 2013b), Fig. 5.3. Instead of a truly extended phase, this model presents a so-called *Goldstone* phase, observed previously in other cases (Ziff *et al.*, 1991; Owczarek y Prellberg, 1995; Martins *et al.*, 1998; Read y Saleur, 2001; Jacobsen *et al.*, 2003; Kager y Nienhuis, 2006; Ikhlef *et al.*, 2007), and

phases with short loops. This Goldstone phase is a very unusual phase, where loops are extended but the correlations decay logarithmically. Here, loops are ‘nearly’ brownian: the fractal dimension tends to two logarithmically. We have characterised the universal properties of this phase in detail, Sec. 5.3, comparing numerical data on systems of size up to $L' \times L = 10^8 \times 10^6$ with renormalisation group calculations. We have shown the logarithmic behaviour of the winding number, the *watermelon* correlation functions, the distribution of loop lengths and the fractal dimension. To reach those system sizes we had to develop new parallelizable techniques based on transfer matrices, Sec. 2.2.1, and to take advantage of the new graphical processor units (Nvidia graphic cards and CUDA language). Very large sizes were necessary because of the logarithmic forms.

We have also studied in detail the phase transitions separating the Goldstone phase and the short loops phases. In Sec. 5.4, we have presented data for two points in these critical lines and they show good agreement with a continuous phase transitions. We have characterised them and we have obtained the critical exponents for this universality class. For instance, in $p = 1/2$ these critical exponents are $\nu = 2.745(19)$ and $x_2 \equiv 2\eta = 0.091(1)$. The critical exponent of the correlation length ν is quite similar to the exponent in the symplectic class of the Anderson transitions in two dimensions (Evers y Mirlin, 2008). Moreover, these loop models can be thought in terms of a network model in a similar way as the Chalker-Coddington model for the Quantum Hall effect (Chalker y Coddington, 1988; Trugman, 1983). However, this idea is not very useful and whether there is or not an exact mapping as for the symmetry class C (Gruzberg *et al.*, 1999; Beamond *et al.*, 2002; Mirlin *et al.*, 2003; Cardy, 2010) remains unanswered. We also expect to publish a three dimensional version of this loop models soon (Serna *et al.*, n.d.).

Conclusions

The work in this thesis is devoted to the study of loop models in two and three dimensions.

- We have characterised the phase diagram of completely-packed loop models in three dimensions with n colors in two different lattices, the three-dimensional L and K lattices. In the K-lattice we have found two different phases, one with only finite loops and the other with at least one extended loop. The character of the phase transition becomes first order for $n \geq 4$. We have presented a lower bound for the critical $n_c \geq 3.0(2)$ above which the transitions are first order. Similarly, we have found three different phases for the L-lattice, one with extended loops and the other two with different kind of finite loops. For $n \geq 5$ there is no extended phase and a first order transition occurs between the localised phases. We present evidences that the extended phase vanishes at a value $4 < n^* < 5$.
- We have studied in detail the phase transitions for values of $n = 1, 2$ and 3 . For $n = 1$ we have found a new estimate for the two independent exponents, ν and η , compatibles with previous values reported in the literature for the class C of the Anderson transitions. For $n = 2$ we have shown that the universality class of the loop models belongs to the $O(3)$ sigma model universality class. In summary, the loop models we study are related to a lattice field theory of the $\mathbb{C}P^{n-1}$ sigma models. For $n = 3$ we have found results compatibles with a continuous phase transition for both lattices, and we have given for the first time values of the critical exponents, $\nu = 0.536(13)$ and $\eta = 0.23(2)$.

- For these loop models, the loop length distribution of the extended phase is found to be the Poisson-Dirichlet distribution with parameter $\theta = n$. We have given strong evidences to support this assert. This also corroborates that the long-distance behaviour of the loop models are described by the $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$ sigma model.
- We have considered another version of these loop models in the L-lattice, adding an extra Ising-like interaction between next-nearest-neighbours. This interaction is designed to preserve the degeneracy of the four states with loops of length 6 in the L-lattice. For $n = 2$ we have been able to describe a phase transition between the extended phase and a localised phase, the so-called $U(1)$ phase, which crossover to a \mathbb{Z}_4 localised phase. We see that this model behaves similarly to the paradigmatic models for the study of the quantum deconfinement criticality and seems to be in that universality class. We have simulated system sizes bigger than what have been published up to date.
- We have proposed several things in this scenario. First, we show the behaviour of several quantities which seem to be unaffected from finite size corrections. Second, we give estimates for the critical exponents from several observables. For the exponent ν all the estimates agree within error bars, in contrast to the anomalous dimensions η_s and η_φ . Third, we are able to explain phenomenologically the failure of the scaling collapse and the hyperscaling relations. In summary, we have proposed a candidate to show a deconfined critical point, related to $SU(2)$ magnets.
- We have also studied completely-packed loop models with crossings in two dimensions. We have been able to pin down the features of the so-called Goldstone phase. Particularly, we have found logarithmic behaviours in the *watermelon* correlation functions, in the winding number and in the loop length distribution. In order to observe these behaviours we have developed a parallelizable transfer matrix technique which has allowed us to reach enormous system sizes.

- We have also studied the phase transition in these models and we have characterised the critical exponents for the first time. We have found that they are quite similar to those of the symplectic class of Anderson transition in two dimensions.

Bibliografía

- AFFLECK, IAN. 1986. Mass generation by merons in quantum spin chains and the $O(3)$ sigma model. *Physical review letters*, **56**, 408–411.
- AIZENMAN, MICHAEL, Y NACHTERGAELE, BRUNO. 1994. Geometric aspects of quantum spin states. *Communications in Mathematical Physics*, **164**(1), 17–63.
- ALBUQUERQUE, A FABRICIO, ALET, FABIEN, Y MOESSNER, RODERICH. 2012. Coexistence of long-range and algebraic correlations for short-range valence-bond wave functions in three dimensions. *Physical review letters*, **109**(14), 147204.
- ALET, FABIEN, MISGUICH, GRÉGOIRE, PASQUIER, VINCENT, MOESSNER, RODERICH, Y JACOBSEN, JESPER LYKKE. 2006. Unconventional Continuous Phase Transition in a Three-Dimensional Dimer Model. *Phys. Rev. Lett.*, **97**(Jul), 030403.
- ALLEN, MICHAEL P, Y TILDESLEY, DOMINIC J. 1989. *Computer simulation of liquids*. Oxford university press.
- ASADA, YOICHI, SLEVIN, KEITH, Y OHTSUKI, TOMI. 2002. Anderson transition in two-dimensional systems with spin-orbit coupling. *Physical review letters*, **89**(25), 256601.
- ASSAAD, FAKHER F, IMADA, MASATOSHI, Y SCALAPINO, DOUGLAS J. 1996. Quantum Transition between an Antiferromagnetic Mott Insulator and $d_{x^2-y^2}$ Superconductor in Two Dimensions. *Physical review letters*, **77**(22), 4592.

- ASSAAD, FAKHER F, IMADA, MASATOSHI, Y SCALAPINO, DOUGLAS J. 1997. Charge and spin structures of a $d_{x^2-y^2}$ superconductor in the proximity of an antiferromagnetic Mott insulator. *Physical Review B*, **56**(23), 15001.
- BEACH, KSD, ALET, FABIEN, MAMBRINI, MATTHIEU, Y CAPPONI, SYLVAIN. 2009. $SU(N)$ Heisenberg model on the square lattice: A continuous-N quantum Monte Carlo study. *Physical Review B*, **80**(18), 184401.
- BEAMOND, EJ, CARDY, JOHN, Y CHALKER, JT. 2002. Quantum and classical localization, the spin quantum Hall effect, and generalizations. *Physical Review B*, **65**(21), 214301.
- BEAMOND, EJ, OWCZAREK, AL, Y CARDY, JOHN. 2003. Quantum and classical localization and the Manhattan lattice. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **36**(41), 10251.
- BERNARD, DENIS, BOFFETTA, GUIDO, CELANI, ANTONIO, Y FALKOVICH, GREGORY. 2006. Conformal invariance in two-dimensional turbulence. *Nature Physics*, **2**(2), 124–128.
- BOGOMOLNY, E, DUBERTRAND, R, Y SCHMIT, C. 2007. SLE description of the nodal lines of random wavefunctions. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **40**(3), 381.
- BRADLEY, R. MARK, DEBIERRE, JEAN-MARC, Y STRENSKI, P. N. 1992a. Anomalous scaling behavior in percolation with three colors. *Phys. Rev. Lett.*, **68**(15), 2332–2335.
- BRADLEY, R MARK, STRENSKI, PN, Y DEBIERRE, JEAN-MARC. 1992b. A growing self-avoiding walk in three dimensions and its relation to percolation. *Physical Review A*, **45**(12), 8513.
- BUNDSCHUH, R, CASSANELLO, C, SERBAN, D, Y ZIRNBAUER, MR. 1999. Weak localization of disordered quasiparticles in the mixed superconducting state. *Physical Review B*, **59**(6), 4382.

-
- CAMPOSTRINI, MASSIMO, HASENBUSCH, MARTIN, PELISSETTO, ANDREA, ROSSI, PAOLO, Y VICARI, ETTORE. 2002. Critical exponents and equation of state of the three-dimensional Heisenberg universality class. *Physical Review B*, **65**(14), 144520.
- CANDU, C, JACOBSEN, JL, READ, N, Y SALEUR, H. 2010. Universality classes of polymer melts and conformal sigma models. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **43**(14), 142001.
- CARDY, J. 2005a. Network models in class C on arbitrary graphs. *Commun. Math. Phys.*, **258**, 87–102.
- CARDY, J. 2010. Quantum network models and classical localization problems. In: ABRAHAMS, E. (ed), *50 Years of Anderson Localization*. World Scientific.
- CARDY, JOHN. 1996. *Scaling and renormalization in statistical physics*. Vol. 5. Cambridge University Press.
- CARDY, JOHN. 2001. Exact scaling functions for self-avoiding loops and branched polymers. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **34**(47), L665.
- CARDY, JOHN. 2005b. SLE for theoretical physicists. *Annals of Physics*, **318**(1), 81–118.
- CHALKER, J. T., Y CODDINGTON, P. D. 1988. Percolation, quantum tunnelling and the integer Hall effect. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **21**, 2665–2679.
- CHALKER, JT, ORTUÑO, M, Y SOMOZA, AM. 2011. Spin quantum Hall effect and plateau transitions in multilayer network models. *Physical Review B*, **83**(11), 115317.
- CHALLA, MURTY SS, LANDAU, DAVID P, Y BINDER, K. 1986. Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions. *Physical Review B*, **34**(3), 1841.

- CHEN, KUN, HUANG, YUAN, DENG, YOUJIN, KUKLOV, AB, PROKOF'EV, NV, Y SVISTUNOV, BV. 2013. Deconfined criticality flow in the Heisenberg model with ring-exchange interactions. *Physical review letters*, **110**(18), 185701.
- COLEMAN, S. 1973. There are no Goldstone bosons in two dimensions. *Communications in Mathematical Physics*, **31**(Dec.), 259–264.
- DE GENNES, PIERRE-GILLES. 1972. Exponents for the excluded volume problem as derived by the Wilson method. *Physics Letters A*, **38**(5), 339–340.
- EVERS, FERDINAND, Y MIRLIN, ALEXANDER D. 2008. Anderson transitions. *Reviews of Modern Physics*, **80**(4), 1355.
- EVERTZ, HANS GERD. 2003. The loop algorithm. *Advances in Physics*, **52**(1), 1–66.
- FARNELL, DJJ, BISHOP, RF, LI, PHY, RICHTER, J, Y CAMPBELL, CE. 2011. Frustrated Heisenberg antiferromagnet on the honeycomb lattice: A candidate for deconfined quantum criticality. *Physical Review B*, **84**(1), 012403.
- FENDLEY, PAUL. 2001. New Theoretical Approaches to Strongly Correlated Systems.
- FERRENBURG, ALAN M., Y SWENDSEN, ROBERT H. 1988. New Monte Carlo technique for studying phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, **61**(23), 2635–2638.
- FERRENBURG, ALAN M., Y SWENDSEN, ROBERT H. 1989. Optimized Monte Carlo data analysis. *Phys. Rev. Lett.*, **63**(12), 1195–1198.
- FEYNMAN, RICHARD P. 1998. Statistical Mechanics: A Set of Lectures.(Advanced Book Classics). *Westview Press, Boulder, USA*, **8**, 6.
- FORTUIN, CORNELIUS MARIUS, Y KASTELEYN, PIET W. 1972. On the random-cluster model: I. Introduction and relation to other models. *Physica*, **57**(4), 536–564.

-
- FOSTER, DP. 2009. Universality of collapsing two-dimensional self-avoiding trails. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **42**(37), 372002.
- FRADKIN, EDUARDO. 2013. Field theories of condensed matter physics.
- FRENKEL, DAAN, Y SMIT, BEREND. 2001. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. Access Online via Elsevier.
- FU, LIANG, Y KANE, CHARLES L. 2012. Topology, Delocalization via Average Symmetry and the Symplectic Anderson Transition. *Physical review letters*, **109**(24), 246605.
- GOLDSCHMIDT, CHRISTINA, UELTSCHI, DANIEL, Y WINDRIDGE, PETER. 2011. Quantum Heisenberg models and their probabilistic representations. *Entropy and the Quantum II. Contemporary Mathematics (AMS)*, **552**, 177–224.
- GRIMMETT, G. R., Y STIRZAKER, D. R. 1982. *Probability and Random processes*. Oxford Science Publications. Oxford.
- GROSSKINSKY, STEFAN, LOVISOLO, ALEXANDER A, Y UELTSCHI, DANIEL. 2012. Lattice permutations and Poisson-Dirichlet distribution of cycle lengths. *Journal of Statistical Physics*, **146**(6), 1105–1121.
- GRUZBERG, ILYA A., LUDWIG, ANDREAS W. W., Y READ, N. 1999. Exact exponents for the Spin Quantum Hall Transition. *Phys. Rev. Lett.*, **82**(22), 4524–4527.
- GUNN, JMF, Y ORTUÑO, M. 1985. Percolation and motion in a simple random environment. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **18**(17), L1095.
- GURARIE, V, Y LUDWIG, AWW. 2004. Conformal field theory at central charge $c=0$ and two-dimensional critical systems with quenched disorder. *arXiv preprint hep-th/0409105*.

- HALDANE, F. D. M. 1982. Spontaneous dimerization in the $S = 1/2$ Heisenberg antiferromagnetic chain with competing interactions. *Phys. Rev. B*, **25**(Apr), 4925–4928.
- HALDANE, FDM. 1988. $O(3)$ nonlinear σ model and the topological distinction between integer-and half-integer-spin antiferromagnets in two dimensions. *Physical review letters*, **61**(8), 1029.
- HARADA, KENJI, KAWASHIMA, NAOKI, Y TROYER, MATTHIAS. 2003. Néel and spin-Peierls ground states of two-dimensional $SU(N)$ quantum antiferromagnets. *Physical review letters*, **90**(11), 117203.
- HARADA, KENJI, SUZUKI, TAKAFUMI, OKUBO, TSUYOSHI, MATSUO, HARUHIKO, LOU, JIE, WATANABE, HIROSHI, TODO, SYNGE, Y KAWASHIMA, NAOKI. 2013. Possibility of deconfined criticality in $SU(N)$ Heisenberg models at small N . *Phys. Rev. B*, **88**(Dec), 220408.
- HATCHER, ALLEN. 2002. *Algebraic Topology*. Cambridge University Press.
- HIKAMI, S. 1981. Three-loop β -functions of non-linear σ models on symmetric spaces. *Physics Letters B*, **98**(3), 208–210.
- IKHLEF, YACINE, JACOBSEN, JESPER, Y SALEUR, HUBERT. 2007. Non-intersection exponents of fully packed trails on the square lattice. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2007**(05), P05005.
- JACOBSEN, JESPER-LYKKE, READ, NICHOLAS, Y SALEUR, HUBERT. 2003. Dense loops, supersymmetry, and Goldstone phases in two dimensions. *Physical review letters*, **90**(9), 090601.
- JAUBERT, LDC, HAQUE, M, Y MOESSNER, R. 2011. Analysis of a fully packed loop model arising in a magnetic Coulomb phase. *Physical Review Letters*, **107**(17), 177202.
- JAUBERT, LDC, PIATECKI, SWANN, HAQUE, MASUDUL, Y MOESSNER, R. 2012. Itinerant electrons in the Coulomb phase. *Physical Review B*, **85**(5), 054425.

-
- JIANG, F-J, NYFELER, M, CHANDRASEKHARAN, S, Y WIESE, U-J. 2008. From an antiferromagnet to a valence bond solid: evidence for a first-order phase transition. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2008**(02), P02009.
- KAGER, WOUTER, Y NIENHUIS, BERNARD. 2006. Monte Carlo study of the hull distribution for the $q = 1$ Brauer model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2006**(08), P08004.
- KAMAL, MICHAEL, Y MURTHY, GANPATHY. 1993. New $O(3)$ transition in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **71**(Sep), 1911–1914.
- KAUL, RIBHU K. 2011. Quantum criticality in $SU(3)$ and $SU(4)$ antiferromagnets. *Physical Review B*, **84**(5), 054407.
- KAUL, RIBHU K. 2012. Quantum phase transitions in bilayer $SU(N)$ antiferromagnets. *Physical Review B*, **85**(18), 180411.
- KAUL, RIBHU K, Y MELKO, ROGER G. 2008. Large- N estimates of universal amplitudes of the CP^{N-1} theory and comparison with a $S = 1/2$ square-lattice model with competing four-spin interactions. *Physical Review B*, **78**(1), 014417.
- KAUL, RIBHU K, Y SANDVIK, ANDERS W. 2012. Lattice Model for the $SU(N)$ Néel to Valence-Bond Solid Quantum Phase Transition at Large N . *Physical review letters*, **108**(13), 137201.
- KAUL, RIBHU K, MELKO, ROGER G, Y SANDVIK, ANDERS W. 2012. Bridging lattice-scale physics and continuum field theory with quantum Monte Carlo simulations. *arXiv preprint arXiv:1204.5405*.
- KHEMANI, V, MOESSNER, R, PARAMESWARAN, SA, Y SONDHI, SL. 2012. Bionic Coulomb phase on the pyrochlore lattice. *Physical Review B*, **86**(5), 054411.
- KINGMAN, JFC. 1975. Random discrete distributions. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, 1–22.

- KNOTT, G.D. 2000. *Interpolating Cubic Splines*. Interpolating Cubic Splines. Springer.
- KONDEV, JANÉ, Y HENLEY, CHRISTOPHER L. 1995. Geometrical exponents of contour loops on random Gaussian surfaces. *Physical review letters*, **74**(23), 4580.
- KÖNIG, E. J., OSTROVSKY, P. M., PROTOPOPOV, I. V., Y MIRLIN, A. D. 2012. Metal-insulator transition in two-dimensional random fermion systems of chiral symmetry classes. *Phys. Rev. B*, **85**(May), 195130.
- KRAGSET, S, SMØRGRAV, E, HOVE, J, NOGUEIRA, FS, Y SUDBØ, A. 2006. First-order phase transition in easy-plane quantum antiferromagnets. *Physical review letters*, **97**(24), 247201.
- KUKLOV, A. B., MATSUMOTO, M., PROKOF'EV, N. V., SVISTUNOV, B. V., Y TROYER, M. 2008. Deconfined Criticality: Generic First-Order Transition in the SU(2) Symmetry Case. *Phys. Rev. Lett.*, **101**(Aug), 050405.
- KUKLOV, A.B., PROKOF'EV, N.V., SVISTUNOV, B.V., Y TROYER, M. 2006. Deconfined criticality, runaway flow in the two-component scalar electrodynamics and weak first-order superfluid-solid transitions. *Annals of Physics*, **321**(7), 1602 – 1621.
- LANDAU, LD, Y LIFSHITZ, EM. 1980. *Statistical Physics, Vol. 1*. Vol. 24.
- LEVIN, MICHAEL, Y SENTHIL, T. 2004. Deconfined quantum criticality and Néel order via dimer disorder. *Phys. Rev. B*, **70**(Dec), 220403.
- LEVINE, HERBERT, PRUISKEN, ADRIANUS MM, Y LIBBY, SB. 1983. Electron delocalization by a magnetic field in two dimensions. *Physical review letters*, **51**, 1915–1918.
- LOU, JIE, SANDVIK, ANDERS W, Y BALENTS, LEON. 2007. Emergence of U (1) Symmetry in the 3D X Y Model with Z q Anisotropy. *Physical review letters*, **99**(20), 207203.

-
- LYKLEMA, JW. 1985. The growing self-avoiding trail. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **18**(10), L617.
- MARKOŠ, PETER, Y SCHWEITZER, L. 2006. Critical regime of two-dimensional Ando model: relation between critical conductance and fractal dimension of electronic eigenstates. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **39**(13), 3221.
- MARTINS, MJ, NIENHUIS, B, Y RIETMAN, R. 1998. Intersecting loop model as a solvable super spin chain. *Physical review letters*, **81**(3), 504.
- MCKANE, AJ. 1980. Reformulation of $n \rightarrow 0$ models using anticommuting scalar fields. *Physics Letters A*, **76**(1), 22–24.
- MELKO, ROGER G., Y KAUL, RIBHU K. 2008. Scaling in the Fan of an Unconventional Quantum Critical Point. *Phys. Rev. Lett.*, **100**(Jan), 017203.
- MERMIN, N. D., Y WAGNER, H. 1966. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. *Phys. Rev. Lett.*, **17**(Nov), 1133–1136.
- MERMIN, N DAVID. 1979. The topological theory of defects in ordered media. *Reviews of Modern Physics*, **51**(3), 591.
- METROPOLIS, NICHOLAS, ROSENBLUTH, ARIANNA W, ROSENBLUTH, MARSHALL N, TELLER, AUGUSTA H, Y TELLER, EDWARD. 1953. Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, **21**, 1087.
- MILDENBERGER, A, Y EVERS, F. 2007. Wave function statistics at the symplectic two-dimensional Anderson transition: Bulk properties. *Physical Review B*, **75**(4), 041303.
- MIRLIN, AD, EVERS, F, Y MILDENBERGER, A. 2003. Wavefunction statistics and multifractality at the spin quantum Hall transition. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **36**(12), 3255.

- MOTRUNICH, OLEXEI I, Y VISHWANATH, ASHVIN. 2004. Emergent photons and transitions in the $O(3)$ sigma model with hedgehog suppression. *Physical Review B*, **70**(7), 075104.
- MÜLLER-KRUMBHAAR, H., Y BINDER, K. 1973. Dynamic properties of the Monte Carlo method in statistical mechanics. *Journal of Statistical Physics*, **8**(1), 1–24.
- NAHUM, ADAM, Y CHALKER, JT. 2012. Universal statistics of vortex lines. *Physical Review E*, **85**(3), 031141.
- NAHUM, ADAM, CHALKER, J. T., SERNA, P., ORTUÑO, M., Y SOMOZA, A. M. En preparación.
- NAHUM, ADAM, CHALKER, J. T., SERNA, P., ORTUÑO, M., Y SOMOZA, A. M. 2011. 3D Loop Models and the CP^{n-1} Sigma Model. *Phys. Rev. Lett.*, **107**(Sep), 110601.
- NAHUM, ADAM, CHALKER, J. T., SERNA, P., ORTUÑO, M., Y SOMOZA, A. M. 2013a. Length Distributions in Loop Soups. *Phys. Rev. Lett.*, **111**(Sep), 100601.
- NAHUM, ADAM, SERNA, P., SOMOZA, A. M., Y ORTUÑO, M. 2013b. Loop models with crossings. *Phys. Rev. B*, **87**(May), 184204.
- NAHUM, ADAM, CHALKER, J. T., SERNA, P., ORTUÑO, M., Y SOMOZA, A. M. 2013c. Phase transitions in three-dimensional loop models and the CP^{n-1} sigma model. *Phys. Rev. B*, **88**(Oct), 134411.
- NEWMAN, M.E.J., Y BARKEMA, G.T. 2001. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press.
- NIENHUIS, BERNARD. 1987. Coulomb gas formulation of two-dimensional phase transitions. *Phase transitions and critical phenomena*, **11**, 1–53.
- NOGUEIRA, FLAVIO S, Y SUDBØ, ASLE. 2013. Deconfined quantum criticality and conformal phase transition in two-dimensional antiferromagnets. *EPL (Europhysics Letters)*, **104**(5), 56004.

-
- OBUSE, HIDEAKI, SUBRAMANIAM, ARVIND R, FURUSAKI, AKIRA, GRUZBERG, ILYA A, Y LUDWIG, ANDREAS WW. 2010. Conformal invariance, multifractality, and finite-size scaling at Anderson localization transitions in two dimensions. *Physical Review B*, **82**(3), 035309.
- ONSAGER, L. 1944. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. *Physical Review*, **65**(Feb.), 117–149.
- ORTUÑO, M., SOMOZA, A. M., Y CHALKER, J. T. 2009. Random walks and Anderson localization in a three-dimensional class C network model. *PRL*, **102**(070603).
- OWCZAREK, ALEKSANDER LUKE, Y PRELLBERG, THOMAS. 1995. The collapse point of interacting trails in two dimensions from kinetic growth simulations. *Journal of statistical physics*, **79**(5-6), 951–967.
- O’HOLLERAN, KEVIN, DENNIS, MARK R, FLOSSMANN, FLORIAN, Y PADGETT, MILES J. 2008. Fractality of light’s darkness. *Physical review letters*, **100**(5), 053902.
- PARISI, G, Y SOURLAS, N. 1980. Self avoiding walk and supersymmetry. *Journal de Physique Lettres*, **41**(17), 403–405.
- PELISSETTO, ANDREA, Y VICARI, ETTORE. 2002. Critical phenomena and renormalization-group theory. *Physics Reports*, **368**(6), 549 – 727.
- POLYAKOV, ALEXANDER M. 1975. Interaction of Goldstone particles in two dimensions. Applications to ferromagnets and massive Yang-Mills fields. *Physics Letters B*, **59**(1), 79–81.
- POLYAKOV, ALEXANDER M. 1977. Quark confinement and topology of gauge theories. *Nuclear Physics B*, **120**(3), 429–458.
- PRUISKEN, A MAM. 1984. On localization in the theory of the quantized hall effect: A two-dimensional realization of the θ -vacuum. *Nuclear Physics B*, **235**(2), 277–298.

- PUJARI, SUMIRAN, DAMLE, KEDAR, Y ALET, FABIEN. 2013. Néel-State to Valence-Bond-Solid Transition on the Honeycomb Lattice: Evidence for Deconfined Criticality. *Physical review letters*, **111**(8), 087203.
- READ, N, Y SACHDEV, SUBIR. 1989a. Valence-bond and spin-Peierls ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets. *Physical review letters*, **62**(14), 1694.
- READ, N., Y SACHDEV, SUBIR. 1989b. Valence-bond and spin-Peierls ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, **62**(Apr), 1694–1697.
- READ, N., Y SALEUR, H. 2007. Enlarged symmetry algebras of spin chains, loop models, and S-matrices. *Nuclear Physics B*, **777**(3), 263 – 315.
- READ, NICK, Y SALEUR, HUBERT. 2001. Exact spectra of conformal supersymmetric nonlinear sigma models in two dimensions. *Nuclear Physics B*, **613**(3), 409–444.
- ROBERT, CHRISTIAN P, Y CASELLA, GEORGE. 1999. *Monte Carlo statistical methods*. Springer.
- SALEUR, HUBERT, Y DUPLANTIER, BERTRAND. 1987. Exact determination of the percolation hull exponent in two dimensions. *Physical review letters*, **58**(22), 2325.
- SANDVIK, ANDERS W. 2007. Evidence for deconfined quantum criticality in a two-dimensional Heisenberg model with four-spin interactions. *Physical review letters*, **98**(22), 227202.
- SANDVIK, ANDERS W. 2010a. Computational Studies of Quantum Spin Systems. *AIP Conference Proceedings*, **1297**(1), 135–338.
- SANDVIK, ANDERS W. 2010b. Continuous Quantum Phase Transition between an Antiferromagnet and a Valence-Bond Solid in Two Dimensions: Evidence for Logarithmic Corrections to Scaling. *Physical review letters*, **104**(17), 177201.

-
- SANDVIK, A.W., Y MELKO, R.G. 2006. Ground-state phases and quantum phase transitions in a two-dimensional spin-1/2 {XY} model with four-spin interactions. *Annals of Physics*, **321**(7), 1651 – 1668. July 2006 Special Issue.
- SANDVIK, AW, DAUL, S, SINGH, RRP, Y SCALAPINO, DJ. 2002. Striped phase in a quantum xy model with ring exchange. *Physical review letters*, **89**(24), 247201.
- SCHRAMM, ODED. 2005. Compositions of random transpositions. *Israel J. Math.*, **147**, 221–243.
- SENTHIL, T, Y FISHER, MATTHEW PA. 2006. Competing orders, nonlinear sigma models, and topological terms in quantum magnets. *Physical Review B*, **74**(6), 064405.
- SENTHIL, T, FISHER, MATTHEW PA, BALENTS, LEON, Y NAYAK, CHETAN. 1998. Quasiparticle Transport and Localization in High-T_c Superconductors. *Physical review letters*, **81**(21), 4704.
- SENTHIL, T., MARSTON, J. B., Y FISHER, MATTHEW P. A. 1999. Spin quantum Hall effect in unconventional superconductors. *Phys. Rev. B*, **60**(Aug), 4245–4254.
- SENTHIL, T, VISHWANATH, ASHVIN, BALENTS, LEON, SACHDEV, SUBIR, Y FISHER, MATTHEW PA. 2004a. Deconfined quantum critical points. *Science*, **303**(5663), 1490–1494.
- SENTHIL, T, BALENTS, LEON, SACHDEV, SUBIR, VISHWANATH, ASHVIN, Y FISHER, MATTHEW PA. 2004b. Quantum criticality beyond the Landau-Ginzburg-Wilson paradigm. *Physical Review B*, **70**(14), 144407.
- SENTHIL, TODADRI, BALENTS, LEON, SACHDEV, SUBIR, VISHWANATH, ASHVIN, Y PA FISHER, MATTHEW. 2005. Deconfined criticality critically defined. *Journal of the Physical Society of Japan*, **74**(Suppl), 1–9.
- SERNA, P., ORTUÑO, M., SOMOZA, A. M., NAHUM, ADAM, Y CHALKER, J. T. En preparación.

- SERNA, PABLO. 2010. *Conductividad en modelos de clase C*. Universidad de Murcia.
- SHTENGEL, KIRILL, Y CHAYES, L P. 2005. Vertex models and random labyrinths: phase diagrams for ice-type vertex models. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2005**(07), P07006.
- STAUFFER, DIETRICH, Y AHARONY, AMMON. 1994. *Introduction to percolation theory*. CRC press.
- TRUGMAN, SA. 1983. Localization, percolation, and the quantum Hall effect. *Physical Review B*, **27**(12), 7539.
- VACHASPATI, TAMMAY, Y VILENKIN, ALEXANDER. 1984. Formation and evolution of cosmic strings. *Physical Review D*, **30**(10), 2036.
- VDOVICHENKO, NV. 1965. A calculation of the partition function for a plane dipole lattice. *Soviet Physics JETP*, **20**(2), 477–479.
- WEIDENMÜLLER, HANS A. 1987. Single electron in a random potential and a strong magnetic field. *Nuclear Physics B*, **290**, 87–110.
- WENZEL, SANDRO, BOGACZ, LESZEK, Y JANKE, WOLFHARD. 2008. Evidence for an Unconventional Universality Class from a Two-Dimensional Dimerized Quantum Heisenberg Model. *Physical review letters*, **101**(12), 127202.
- WOLFF, ULLI. 2010. Simulating the all-order strong coupling expansion IV: CP (N- 1) as a loop model. *Nuclear Physics B*, **832**(3), 520–537.
- ZIFF, ROBERT M, KONG, XP, Y COHEN, EGD. 1991. Lorentz lattice-gas and kinetic-walk model. *Physical Review A*, **44**(4), 2410.