



FORMACIÓN DE DOMINIOS EN UNA CADENA DE ESPINES ISING EN LA DINÁMICA DE GLAUBER

**DOMAIN FORMATION IN AN ISING SPIN CHAIN WITH
GLAUBER DYNAMICS**

OSCAR RICARDO MEJÍA PARRA

Director de Trabajo de Grado:
PhD. Diego Luis González

**UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y
EXACTAS
PROGRAMA ACADÉMICO DE FÍSICA
SANTIAGO DE CALI**

Septiembre 2022

Índice general

Resumen	3
Dedicatoria	4
1 Introducción	5
2 Dinámica de Glauber	7
2.1 Modelo de Ising-Glauber	7
2.1.1 Tasas de transición	7
2.2 Dinámica de Glauber en una dimensión	8
2.2.1 Magnetización y funciones de correlación en ausencia de campo magnético . . .	9
2.2.2 Cadena Ising en presencia de un campo magnético	15
2.2.3 Evolución temporal de la distribución de tamaños de dominios	19
3 Análisis de resultados computacionales y numéricos	27
3.1 Formación de dominios en ausencia de campo magnético	27
3.2 Formación de dominios a temperatura cero en presencia de un campo magnético . . .	33
4 Conclusiones	37
A Modelo de Ising	39
A.1 Modelo de Ising en una dimensión	40
B Ecuación maestra y balance detallado	43
C Métodos computacionales	44
C.1 Método de Monte Carlo Cinético (kMC)	44
C.2 Algoritmo de Glauber a $T = 0$ y $H = 0$	45
C.3 Cálculo computacional de la distribución de tamaños de dominios, la densidad de paredes de dominio y la magnetización por partícula	45
Bibliografía	46

Resumen

Se estudia el proceso de formación de dominios en una red unidimensional de espines Ising a temperatura T en presencia de un campo magnético externo H . La interacción ferromagnética entre espines adyacentes se caracteriza por medio de una constante de acople $J > 0$. El sistema evoluciona siguiendo la dinámica de Glauber, que considera tasas de transición que dependen únicamente del cambio en la energía producido por el cambio en la orientación de un espín. Esta dinámica permite cambiar el estado de un solo espín en cada paso de tiempo. El comportamiento del sistema se estudia analíticamente mediante el cálculo de diversas cantidades, una de ellas es la distribución de dominios de tamaño n , P_n . La ecuación maestra para la evolución temporal de P_n considera tres procesos fundamentales: difusión de paredes de dominio, coalescencia y fragmentación de dominios. Para obtener una expresión analítica para la ecuación maestra de P_n se usa la aproximación de intervalos independientes, que asume que los dominios vecinos no están correlacionados. Las expresiones reportadas en este trabajo para la ecuación maestra son más generales que las reportadas en la bibliografía. La distribución P_n se obtuvo para espines $+1$ ($\uparrow$) y -1 ($\downarrow$) considerando valores arbitrarios de J , T y H . Los resultados teóricos se contrastan con los obtenidos mediante simulaciones computacionales basadas en el método de Monte Carlo cinético (kMC). Se encuentra un buen acuerdo entre los resultados teóricos y los computacionales, para todas las temperaturas y campos magnéticos considerados. Para un campo magnético nulo, se encuentra que el sistema es simétrico bajo el intercambio de espines $+1$ y -1 . En ausencia de fluctuaciones térmicas el sistema evoluciona mediante formación de dominios de espines, y la distribución de tamaños de dominios presenta escalamiento dinámico. Los resultados encontrados para P_n con $T = 0$ sugieren la existencia de una fuerza de repulsión entrópica entre las paredes de dominios, y en contraposición, una fuerza entrópica de atracción entre las paredes de dominios grandes. La fuerza repulsiva hace que sea poco probable encontrar dominios pequeños, mientras que la segunda fuerza no permite que un dominio crezca indefinidamente, y es debida a los dominios adyacentes. La fuerza de repulsión entrópica desaparece para temperaturas mayores a cero debido a las fluctuaciones térmicas. Adicionalmente, los resultados obtenidos para $T = 0$ y $H = 0$ coinciden con los reportados en la literatura correspondiente a Marcha Aleatoria con Aniquilación (ARW), por lo que existe una equivalencia entre los sistemas. En contraste, en presencia de un campo magnético se rompe la simetría entre espines $+1$ y -1 . Si el campo magnético es fuerte ($H > 2J$), entonces el sistema tiende rápidamente a orientarse en dirección del campo. Mientras que, con un campo magnético débil ($H < 2J$) el comportamiento del sistema depende fuertemente de la condición inicial y se forman dominios de espines conforme este evoluciona. Para un campo magnético orientado positivamente, los dominios de espines -1 desaparecen sistemáticamente.

Palabras clave:

Modelo de Ising, Dinámica de Glauber, Modelo de Ising-Glauber, Formación de Dominios, Distribución de Dominios.

Dedicatoria

Este proyecto, que significa la culminación de una etapa de gran importancia en mi vida, va dedicado a mi padre, que me enseñó la importancia del pensamiento crítico y me motivó a siempre querer aprender, a quien extraño cada día desde su partida y que espero se sienta orgulloso desde donde se encuentre. Va dedicado a mi madre, una mujer fuerte y perseverante, que me sacó adelante y me apoyó a pesar de las dificultades. Y a mi hermano, quien me ha acompañado siempre.

También me gustaría agradecer a todos aquellos que me apoyaron y me ayudaron a crecer en cada etapa de mi formación. Especialmente a mi director de proyecto Diego Luis González, quien siempre estuvo presente para guiarme y contribuyó enormemente en mi formación personal y profesional. Y a Laura, mi pareja, quien siempre me brindó su apoyo incondicional y me dio ánimo para superarme y seguir adelante.

Por último, agradezco a todos mis profesores y a la Universidad del Valle, por haberme brindado la oportunidad de seguir la profesión que siempre soñé.

1 Introducción

La evolución temporal de los sistemas de muchos cuerpos es de gran interés en física, particularmente en el campo de la mecánica estadística debido a la existencia de fenómenos colectivos como auto ordenamiento, transiciones de fase, etc [1]. Uno de los sistemas más estudiados es el conformado por espines en una red discreta con interacciones a primeros vecinos. Esto se debe a la gran cantidad de comportamientos y propiedades que presentan los sistemas de espines así como también por su amplia variedad de aplicaciones [2, 3]. Uno de los fenómenos de interés en los sistemas de espines es la formación de dominios [4, 5, 6, 7]. Por definición, en una dimensión un dominio consiste en un cierto número de espines consecutivos alineados y acotados por espines alineados en dirección opuesta [8].

Uno de los modelos más extendidos para el estudio de redes de espines es el modelo de Ising, puesto que, debido a su simplicidad permite el calculo analítico de muchas cantidades [3, 9]. En el modelo clásico, los espines ocupan un sitio de red y pueden tener una de dos orientaciones posibles, las cuales, usualmente se representan por -1 ($\downarrow$) y $+1$ ($\uparrow$) (Apéndice A). A pesar de su sencillez, el modelo de Ising puede explicar fenómenos como el ferromagnetismo y el antiferromagnetismo. En el primero, los espines se orientan en la misma dirección y se produce un ordenamiento magnético, mientras que en el segundo, se favorece la configuración en la cual los espines se orientan en direcciones opuestas [1]. En este trabajo consideramos el hamiltoniano de Ising ferromagnético que evoluciona con la dinámica de Glauber. En esta dinámica, los espines son seleccionados uno a la vez de forma aleatoria y su estado (orientación) es cambiado de acuerdo a una tasa de transición que depende del cambio en la energía asociado al respectivo cambio de orientación [8, 10]. El principio usado para fijar las tasas de transición en esta dinámica es el balance detallado [11, 12, 13], el cual impone que el flujo entre dos estados cualesquiera se equilibre (Apéndice B). Una ventaja de esta dinámica es que permite obtener algunos resultados analíticos exactos [14, 15].

Una de las formas de estudiar la formación de dominios en este sistema, es analizando la distribución de tamaños de dominios, es decir, la probabilidad P_n de encontrar un dominio de tamaño n [6, 8]. A pesar de que no se conoce la solución exacta para esta distribución, es posible encontrar una expresión utilizando la aproximación de intervalos independientes, la cual asume que dominios vecinos no están correlacionados [6, 7, 10, 16].

El Cap. 2 está dedicado al estudio de la formación de dominios desde un marco teórico. En la primera sección, se discute el modelo de Ising-Glauber y se muestra cómo la condición de balance detallado nos conduce a una expresión para las tasas de transición del sistema. Las secciones posteriores se centran en la dinámica de Glauber en una dimensión, donde se obtienen cantidades como la magnetización, las funciones de correlación de orden más bajo y la densidad de paredes de dominio, en ausencia de campo magnético. En las secciones finales, se estudia la formación de dominios en presencia de un campo magnético. Recurriendo al formalismo de la ecuación maestra y a la aproximación de intervalos independientes, se obtiene una expresión general para la ecuación que describe la evolución temporal de la distribución de tamaños de dominios, P_n , la cual es válida para dominios de espines $+1$ ($\uparrow$) y -1 ($\downarrow$), considerando valores arbitrarios de J , T y H .

En el Cap. 3 se muestran los resultados obtenidos a partir de simulaciones computacionales basadas en el método de Monte Carlo cinético, así como también, las gráficas correspondientes a los resultados analíticos y a la solución numérica de la ecuación maestra de P_n . En la primera sección, se presentan los resultados para campo magnético cero, donde la distribución de tamaños de dominios se obtuvo

1 Introducción

para temperatura cero y temperatura finita. También se midió la magnetización, las funciones de correlación de orden más bajo y la densidad de paredes de dominio. La siguiente sección presenta los resultados obtenidos para un campo magnético diferente de cero, donde se estudia por separado el sistema en presencia de un campo fuerte ($H > 2J$) y un campo débil ($H < 2J$).

2 Dinámica de Glauber

2.1. Modelo de Ising-Glauber

En el modelo de Ising clásico se considera un sistema de N espines, cada uno de los cuales ocupa un sitio de red. Los espines pueden tener dos valores posibles, $s_i = \pm 1$, donde el subíndice i hace referencia al sitio de red que ocupa (Apéndice A). Se considera el hamiltoniano Ising ferromagnético, puesto que se desea estudiar la formación de dominios de espines. De esta manera, el hamiltoniano del sistema está dado por [8, 9, 15]

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad (2.1)$$

donde la suma se hace sobre primeros vecinos $\langle i, j \rangle$, J_{ij} es la constante de acoplamiento entre espines y H es un campo magnético uniforme. Las propiedades termodinámicas del sistema en el equilibrio se pueden obtener a partir de la función de partición $Z_N(\beta) = \sum \exp(-\beta \mathcal{H})$ con $\beta = 1/(k_B T)$ [9]. La suma se realiza sobre todas las configuraciones de espín $\mathcal{S}$, es decir, sobre todos los 2^N posibles estados del sistema. Para $J_{ij} > 0$ y $H = 0$, el ferromagnetismo surge espontáneamente cuando la temperatura T es menor que una temperatura crítica T_c , siempre que la dimensión espacial satisfaga $d \geq 2$. En este estado ordenado, la magnetización es diferente de cero y los espines están fuertemente correlacionados. Por encima de T_c , los espines están desordenados espacialmente, de modo que la magnetización es cero. Además, las correlaciones espaciales entre espines decaen exponencialmente con su separación [1, 3, 8].

Por otro lado, las propiedades fuera del equilibrio dependen de la naturaleza dinámica del sistema. Dependiendo de la dinámica elegida para evolucionar el sistema, los espines pueden cambiar de estado uno a la vez o en bloques correlacionados, y la magnetización, puede o no, ser una cantidad conservada [5, 6, 17, 18, 19]. Esta falta de unicidad de las reglas dinámicas abunda en la física estadística fuera del equilibrio y refleja la ausencia de principios universales para la evolución de los sistemas [1, 8, 12]. En este trabajo, el sistema en estudio evoluciona bajo la dinámica de Glauber, la cual está totalmente definida por la condición de balance detallado [11, 12, 13], que requiere que el flujo entre dos estados cualesquiera se equilibre.

2.1.1. Tasas de transición

En la dinámica de Glauber, los espines son seleccionados uno a la vez de forma aleatoria y su estado cambia de acuerdo a $s_j \rightarrow -s_j$, con una tasa de transición que depende del cambio en la energía asociado a la respectiva transición [8, 14, 15]. Las transiciones se pueden dividir en tres tipos diferentes dependiendo del efecto en la energía del sistema cuando un espín cambia su estado: aquellas que disminuyen la energía, las que aumentan la energía y aquellas donde la energía se conserva. Una disminución de energía ocurre cuando el espín está en dirección opuesta a sus vecinos y cambia su orientación, la energía aumenta cuando cambia el estado de un espín que está alineado con la mayoría de sus vecinos, y finalmente, la energía se conserva cuando la magnetización local es cero, como lo muestra la Fig. 2.1.

Como se ha mencionado antes, la condición usada para fijar las tasas de transición es el balance detallado (Apéndice B)

$$P_{eq}(\mathcal{S}) \omega_j(\mathcal{S}) = P_{eq}(\mathcal{S}^j) \omega_j(\mathcal{S}^j), \quad (2.2)$$

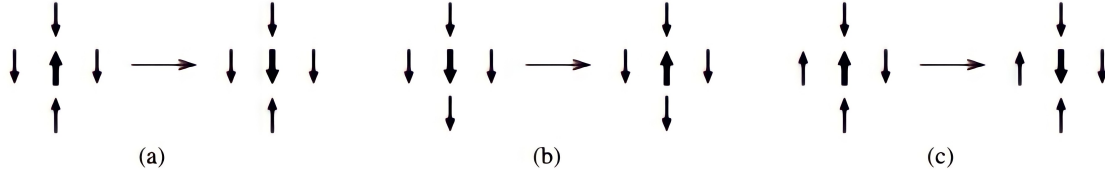


Figura 2.1: Tipos de transiciones en una red cuadrada al cambiar el estado de un espín: (a) disminución de energía, (b) aumento de energía, y (c) conservación de energía. Tomado de la Ref. [8].

donde $\mathcal{S}$ denota cualquiera de los 2^N estados del conjunto de N espines del sistema, $\mathcal{S}^j$ es el estado final derivado del estado $\mathcal{S}$ en donde la orientación del espín en j es cambiada. Por su parte, $\omega_j(\mathcal{S})$ es la tasa de transición del estado $\mathcal{S}$ a $\mathcal{S}^j$, y $P_{eq}(\mathcal{S})$ es la distribución de Boltzmann en el equilibrio, dada por [12]

$$P_{eq}(\mathcal{S}) = \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}(\mathcal{S}))}{Z_N(\beta)}. \quad (2.3)$$

La condición de balance detallado puede satisfacerse eligiendo apropiadamente las tasas de transición [20]. Por ejemplo, si se considera el hamiltoniano (2.1) con $H = 0$ en conjunto con la Ec. (2.2), se obtiene

$$\frac{\omega_i(\mathcal{S})}{\omega_i(\mathcal{S}^i)} = \frac{P_{eq}(\mathcal{S}^i)}{P_{eq}(\mathcal{S})} = \frac{e^{-\beta s_i \sum J_{ij} s_j}}{e^{\beta s_i \sum J_{ij} s_j}} = \frac{1 - s_i \tanh(\beta \sum_{j \in \langle i \rangle} J_{ij} s_j)}{1 + s_i \tanh(\beta \sum_{j \in \langle i \rangle} J_{ij} s_j)}. \quad (2.4)$$

En la última igualdad, por conveniencia, se ha usado la identidad

$$e^{As} = \cosh A + s \sinh A = \cosh A(1 + s \tanh A), \quad (2.5)$$

válida para $s = \pm 1$. Es importante notar que hay infinitas tasas de transición que satisfacen la Ec. (2.4) [5, 6, 17, 18, 19]. Sin embargo, la tasa de transición más simple y natural que puede elegirse está dada por

$$\omega_i(\mathcal{S}) = \frac{1}{2} \left[1 - s_i \tanh \left(\beta \sum_{j \in \langle i \rangle} J_{ij} s_j \right) \right]. \quad (2.6)$$

La ecuación anterior es válida para cualquier dimensión d . Sin embargo, en este trabajo nos limitamos a $d = 1$. Cabe mencionar que la tasa de transición (2.6) no está en unidades de inverso de tiempo establecidas, por lo que, de ahora en adelante el tiempo está en unidades arbitrarias.

2.2. Dinámica de Glauber en una dimensión

En el caso particular de una dimensión la suma sobre primeros vecinos $\langle i, j \rangle$ se reduce a considerar los vecinos a izquierda y derecha de un espín dado. Por simplicidad, se asume que todos los primeros vecinos tienen la misma magnitud de interacción, esto es, $J_{ij} = J$. De esta forma, usando la identidad $\tanh \epsilon x = \epsilon \tanh x$ válida cuando $\epsilon = 0, \pm 1$, la tasa de transición (2.6) se reduce a

$$\omega_i(\mathcal{S}) = \frac{1}{2} \left[1 - s_i \tanh \left(2\beta J \frac{s_{i-1} + s_{i+1}}{2} \right) \right] = \frac{1}{2} \left[1 - \gamma s_i \frac{s_{i-1} + s_{i+1}}{2} \right], \quad (2.7)$$

donde $\gamma = \tanh(2\beta J)$. Es importante notar que en la dinámica de Glauber, en el límite $T \rightarrow \infty$, $\gamma \rightarrow 0$ y $\omega_i(\mathcal{S}) = \frac{1}{2}$. Por lo tanto, todos los eventos donde cambia el estado de un espín son igualmente probables, esto es, las tasas de transición no dependen del estado inicial $\mathcal{S}$.

2.2.1. Magnetización y funciones de correlación en ausencia de campo magnético

De ahora en adelante se denota el valor medio del espín i como $S_i = \langle s_i \rangle$, mientras que, la correlación de pares dada por el valor medio del producto de los espines i y j se escribe como $S_{i,j} = \langle s_i s_j \rangle$ [14, 21]. Siguiendo la definición de valor medio, se tiene que

$$S_j = \sum_{|s_j|} s_j P_j(s_j) = P_j(+1) - P_j(-1), \quad (2.8)$$

donde $P_j(s_j)$ es la probabilidad de encontrar al espín j en el estado $s_j = \pm 1$. Por otro lado, se tiene que la ecuación maestra para la evolución de $P_j(s_j)$ está dada por

$$\frac{dP_j(+1)}{dt} = -\omega_j(+1)P_j(+1) + \omega_j(-1)P_j(-1), \quad (2.9)$$

si $s_j = +1$, y por

$$\frac{dP_j(-1)}{dt} = \omega_j(+1)P_j(+1) - \omega_j(-1)P_j(-1), \quad (2.10)$$

si $s_j = -1$. Para más información acerca de la ecuación maestra ver Apéndice B. Se puede notar que las Ecs. (2.9) y (2.10) satisfacen $dP_j(+1)/dt + dP_j(-1)/dt = 0$, puesto que $P_j(+1) + P_j(-1) = 1$.

Usando las Ecs. (2.8) a (2.10), se encuentra que la evolución temporal de S_j satisface

$$\begin{aligned} \frac{dS_j}{dt} &= \frac{d}{dt}[P_j(+1) - P_j(-1)] \\ &= -2\omega_j(+1)P_j(+1) + 2\omega_j(-1)P_j(-1) \\ &= -2 \sum_{|s_j|} s_j \omega_j(s_j) P_j(s_j) \\ &= -2 \langle s_j \omega_j(s_j) \rangle. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Para hallar la ecuación que describe la evolución temporal de la correlación de pares de espines, $S_{i,j}$, se sigue un procedimiento análogo al usado para escribir la Ec. (2.11). De esta forma se encuentra

$$S_{i,j} = \sum_{\substack{|s_i| \\ |s_j|}} s_i s_j P_{ij}(s_i, s_j) = P_{ij}(+1, +1) + P_{ij}(-1, -1) - P_{ij}(+1, -1) - P_{ij}(-1, +1), \quad (2.12)$$

donde $P_{ij}(s_i, s_j)$ es la probabilidad de encontrar a los espines i y j en los estados $s_i = \pm 1$ y $s_j = \pm 1$, respectivamente. Las ecuaciones maestras asociadas a los cuatro estados posibles del par de espines i y j son:

$$\begin{aligned} \frac{dP_{ij}(+1, +1)}{dt} &= \omega_i(-1)P_{ij}(-1, +1) + \omega_j(-1)P_{ij}(+1, -1) \\ &\quad - \omega_i(+1)P_{ij}(+1, +1) - \omega_j(+1)P_{ij}(+1, +1), \end{aligned} \quad (2.13)$$

si $s_i = +1$ y $s_j = +1$. Por su parte, si $s_i = +1$ y $s_j = -1$ se tiene

$$\begin{aligned} \frac{dP_{ij}(+1, -1)}{dt} &= \omega_i(-1)P_{ij}(-1, -1) + \omega_j(+1)P_{ij}(+1, +1) \\ &\quad - \omega_i(+1)P_{ij}(+1, -1) - \omega_j(-1)P_{ij}(+1, -1), \end{aligned} \quad (2.14)$$

mientras que, con $s_i = -1$ y $s_j = +1$ se encuentra

$$\begin{aligned} \frac{dP_{ij}(-1, +1)}{dt} &= \omega_i(+1)P_{ij}(+1, +1) + \omega_j(-1)P_{ij}(-1, -1) \\ &\quad - \omega_i(-1)P_{ij}(-1, +1) - \omega_j(+1)P_{ij}(-1, +1), \end{aligned} \quad (2.15)$$

y finalmente, para $s_i = -1$ y $s_j = -1$ es

$$\begin{aligned} \frac{dP_{ij}(-1, -1)}{dt} &= \omega_i(+1)P_{ij}(+1, -1) + \omega_j(+1)P_{ij}(-1, +1) \\ &- \omega_i(-1)P_{ij}(-1, -1) - \omega_j(-1)P_{ij}(-1, -1). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Derivando con respecto al tiempo la Ec. (2.12) y usando las Ecs. (2.13) a (2.16), se encuentra que la evolución temporal de $S_{i,j}$ satisface

$$\begin{aligned} \frac{dS_{i,j}}{dt} &= \frac{d}{dt}[P_{ij}(+1, +1) + P_{ij}(-1, -1) - P_{ij}(+1, -1) - P_{ij}(-1, +1)] \\ &= 2\omega_i(-1)P_{ij}(-1, +1) + 2\omega_j(+1)P_{ij}(-1, +1) + 2\omega_i(+1)P_{ij}(+1, -1) \\ &+ 2\omega_j(-1)P_{ij}(+1, -1) - 2\omega_i(+1)P_{ij}(+1, +1) - 2\omega_j(+1)P_{ij}(+1, +1) \\ &- 2\omega_i(-1)P_{ij}(-1, -1) - 2\omega_j(-1)P_{ij}(-1, -1). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Reorganizando la expresión anterior se encuentra que

$$\begin{aligned} \frac{dS_{i,j}}{dt} &= -2\{[\omega_i(+1) + \omega_j(+1)]P_{ij}(+1, +1) + [\omega_i(-1) + \omega_j(-1)]P_{ij}(-1, -1) \\ &- [\omega_i(+1) + \omega_j(-1)]P_{ij}(+1, -1) - [\omega_i(-1) + \omega_j(+1)]P_{ij}(-1, +1)\} \\ &= -2\langle s_i s_j [\omega_i(s_i) + \omega_j(s_j)] \rangle. \end{aligned} \quad (2.18)$$

De este modo, la evolución temporal de las funciones de correlación de primer y segundo orden están dadas por las Ecs. (2.11) y (2.18), respectivamente.

Usando la tasa de transición (2.7) y teniendo en cuenta que $s_j^2 = 1$, la Ec. (2.11) toma la forma

$$\begin{aligned} \frac{dS_j}{dt} &= -2\left\langle s_j \frac{1}{2} \left(1 - \gamma s_j \frac{s_{j-1} + s_{j+1}}{2} \right) \right\rangle \\ &= -\langle s_j \rangle + \frac{\gamma}{2} \langle s_{j-1} + s_{j+1} \rangle \\ &= -S_j + \frac{\gamma}{2} (S_{j-1} + S_{j+1}). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Para integrar con respecto al tiempo la Ec. (2.19), introducimos la transformada de Fourier discreta

$$S(k, t) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} S_j(t) e^{ikj}. \quad (2.20)$$

Derivando respecto al tiempo la Ec. (2.20) y usando la Ec. (2.19), se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{dS(k, t)}{dt} &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{dS_j}{dt} e^{ikj} \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left[\frac{\gamma}{2} \left(S_{j-1} e^{ikj} + S_{j+1} e^{ikj} \right) - S_j e^{ikj} \right] \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left[\frac{\gamma}{2} \left(S_j e^{ik(j+1)} + S_j e^{ik(j-1)} \right) - S_j e^{ikj} \right] \\ &= \left[\frac{\gamma}{2} \left(e^{ik} + e^{-ik} \right) - 1 \right] S(k, t) \\ &= (\gamma \cos k - 1) S(k, t). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Por simplicidad, se supone que la condición inicial es $S_j(0) = \delta_{j,0}$, lo que implica que únicamente el espín $j = 0$ tiene un estado promedio diferente de cero. Teniendo en cuenta que la transformada de Fourier de la condición inicial es $S(k, 0) = 1$, la solución de la Ec. (2.21) es

$$S(k, t) = e^{(\gamma \cos k - 1)t}. \quad (2.22)$$

La función $S_j(t)$ puede obtenerse calculando la transformada inversa de la Ec. (2.22). Sin embargo, es más conveniente recordar que la función generadora de la función modificada de Bessel de orden n , I_n , tiene la representación compacta $e^{z \cos k} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ikn} I_n(z)$ [22], entonces

$$\begin{aligned} S(k, t) &= e^{\gamma t \cos k} e^{-t} \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ikj} I_j(\gamma t) e^{-t}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Comparando la Ec. (2.23) con la transformada de Fourier (2.20), se concluye que

$$S_j(t) = I_j(\gamma t) e^{-t}. \quad (2.24)$$

El factor γ depende de la temperatura y caracteriza el tiempo de relajación del sistema en el modelo de Ising-Glauber. Teniendo en cuenta la expansión asintótica de la función modificada de Bessel para $z \gg 1$, donde $I_j(z) \simeq (2\pi z)^{-1/2} e^z$ [22], se obtiene que para tiempos grandes el valor medio de espín decae asintóticamente de acuerdo a

$$S_j(t) \simeq (2\pi\gamma t)^{-1/2} e^{-(1-\gamma)t}, \quad (2.25)$$

con un tiempo típico de relajación $\tau = (1 - \gamma)^{-1}$. Para $T = 0$ se tiene que $\gamma = 1$, y por lo tanto se presenta un decaimiento algebraico y no exponencial, esto es, $S_j(t) \sim t^{-1/2}$.

Por su parte, la magnetización total del sistema, M , se define como [3]

$$M = \sum_{j=1}^N S_j. \quad (2.26)$$

Debido a que el sistema es traslacionalmente invariante, la magnetización por partícula es simplemente

$$m = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N S_j. \quad (2.27)$$

La magnetización por partícula satisface

$$\begin{aligned} \frac{dm}{dt} &= \frac{1}{N} \sum_j \frac{dS_j}{dt} \\ &= \frac{1}{N} \sum_j \left[-S_j + \frac{\gamma}{2} (S_{j-1} + S_{j+1}) \right] \\ &= -m + \gamma m \\ &= -(1 - \gamma)m, \end{aligned} \quad (2.28)$$

de tal forma que m decae exponencialmente con el tiempo,

$$m(t) = m(0) e^{-(1-\gamma)t}, \quad (2.29)$$

con excepción del caso especial $T = 0$ en donde $\gamma = 1$, y por ende la dependencia temporal desaparece, implicando que m se conserva.

De forma análoga, es posible resolver la Ec. (2.19) para una condición inicial general $S_j(0)$, donde se obtiene

$$\begin{aligned} S(k, t) &= S(k, 0)e^{\gamma t \cos k} e^{-t} \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ikj} S(k, 0) I_j(\gamma t) e^{-t}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

donde $S(k, 0) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} S_j(0) e^{ikj}$. Teniendo en cuenta la transformada de Fourier inversa $S_j(t) = \int_{-\infty}^{\infty} S(k, t) e^{-ikj} dk / (2\pi)$ y la Ec. (2.30), se obtiene la solución general

$$\begin{aligned} S_l(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} S(k, t) e^{-ikl} dk \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} I_j(\gamma t) e^{-t} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} S(k, 0) e^{ikj} e^{-ikl} dk \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} I_j(\gamma t) e^{-t} S_{l-j}(0). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Realizando la traslación $n = l - j$, se encuentra

$$S_l(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} S_n(0) I_{l-n}(\gamma t) e^{-t}. \quad (2.32)$$

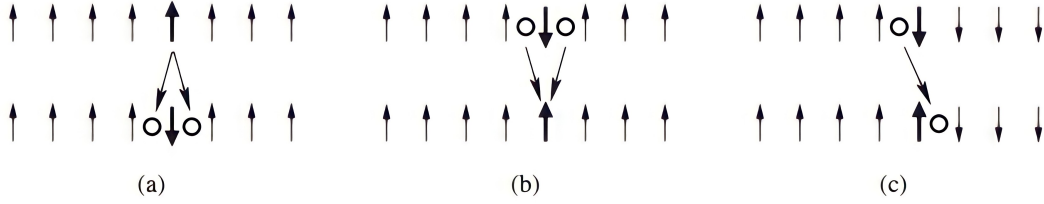


Figura 2.2: (a) Creación de un par de paredes de dominio (fragmentación de un dominio), (b) aniquilación de paredes de dominio (coalescencia de dos dominios), y (c) difusión de una pared de dominio. Tomado de la Ref. [8].

Consideremos ahora la función de correlación de pares $S_{i,j}$. El caso particular de primeros vecinos, $i = k$ y $j = k + 1$, tiene una interpretación geométrica simple en términos de paredes de dominio (Fig. 2.2). Una pared de dominio es la conformada por una pareja de espines vecinos antiparalelos, $(k, k + 1)$, que cumple la condición

$$\frac{1}{2}(1 - s_k s_{k+1}) = 1. \quad (2.33)$$

De esta manera, la densidad de paredes de dominio en la posición k está dada por

$$\begin{aligned} \rho_k &= \left\langle \frac{1}{2}(1 - s_k s_{k+1}) \right\rangle \\ &= \frac{1}{2}(1 - S_{k,k+1}). \end{aligned} \quad (2.34)$$

Para sistemas traslacionalmente invariantes se cumple $\rho = \frac{1}{N} \sum_k \rho_k = \rho_k$. Además, debido a que la función de correlación depende solo de la separación entre los espines, se puede definir $G_k \equiv S_{i,i+k}$. Así, la Ec. (2.34) se puede expresar como

$$\rho = \frac{1}{2}(1 - G_1). \quad (2.35)$$

Por otro lado, usando la tasa de transición (2.7) y la identidad $s_j^2 = 1$, la Ec. (2.18) adquiere la forma

$$\begin{aligned} \frac{dS_{i,j}}{dt} &= -2 \left\langle s_i s_j \left[\frac{1}{2} \left(1 - \gamma s_i \frac{s_{i-1} + s_{i+1}}{2} \right) + \frac{1}{2} \left(1 - \gamma s_j \frac{s_{j-1} + s_{j+1}}{2} \right) \right] \right\rangle \\ &= -2 \langle s_i s_j \rangle + \frac{\gamma}{2} \langle s_{i-1} s_j + s_{i+1} s_j \rangle + \frac{\gamma}{2} \langle s_i s_{j-1} + s_i s_{j+1} \rangle \\ &= -2 S_{i,j} + \frac{\gamma}{2} (S_{i-1,j} + S_{i+1,j}) + \frac{\gamma}{2} (S_{i,j-1} + S_{i,j+1}). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Si el sistema es traslacionalmente invariante se puede realizar el cambio $k = i - j$ y se obtiene

$$\frac{dG_k}{dt} = -2 G_k + \gamma (G_{k-1} + G_{k+1}), \quad (2.37)$$

válida para $k > 0$ y sujeta a la condición $G_0(t) = \langle s_i^2 \rangle = 1$. En estado estacionario la ecuación anterior se reduce a

$$0 = -2 G_k + \gamma (G_{k-1} + G_{k+1}). \quad (2.38)$$

Para resolver esta ecuación es conveniente asumir la forma funcional $G_k(t \rightarrow \infty) \sim \eta^k$, de tal forma que se obtiene la relación

$$\begin{aligned} 0 &= -2 \eta^k + \gamma (\eta^{k-1} + \eta^{k+1}) \\ &= -2 + \gamma (\eta^{-1} + \eta) \\ &= \gamma \eta^2 - 2 \eta + \gamma, \end{aligned} \quad (2.39)$$

cuya solución es $\eta = (1 \pm \sqrt{1 - \gamma^2})/\gamma$. Naturalmente, es de esperar que G_k decaiga a medida que k aumenta. Además, para un valor de k dado y valores grandes de β ($T \rightarrow 0$), η debe aumentar, indicando que la correlación aumenta. Mientras que, para β pequeño ($T \rightarrow \infty$) la correlación disminuye, por lo que η debe disminuir. Por consiguiente, se escoge $\eta = (1 - \sqrt{1 - \gamma^2})/\gamma$. Recordando que $\gamma = \tanh(2\beta J)$, se obtiene

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{1 - \sqrt{1 - \tanh^2(2\beta J)}}{\tanh(2\beta J)} \\ &= \frac{e^{2\beta J} + e^{-2\beta J} - 2}{e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}} \\ &= \tanh(\beta J). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Así, la solución en el equilibrio es $G_k(t \rightarrow \infty) \equiv G_k(\infty) = \eta^k$

$$\begin{aligned} G_k(\infty) &= \tanh(\beta J)^k \\ &= e^{-k \ln(\coth \beta J)} \\ &= e^{-k/\xi}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

con $\xi = [\ln(\coth(\beta J))]^{-1}$, lo que coincide con los resultados encontrados por medio de la función de partición para el estado de equilibrio del sistema [3] (Apéndice A.1). Es importante notar que la longitud de correlación ξ diverge cuando $T \rightarrow 0$, indicando la existencia de una transición de fase. Además, ξ es nula cuando $T \rightarrow \infty$.

Para encontrar la dependencia temporal de la función de correlación de pares de espines, es importante notar que la Ec. (2.37) tiene la misma forma que la Ec. (2.19), salvo un factor de 2. De esta manera, la solución se debe poder escribir como la suma de dos partes, la primera semejante a la Ec. (2.32), y la segunda la solución en el equilibrio $G_k(\infty) = \eta^k$. Por lo tanto, la solución general de la Ec. (2.37) para $k > 0$ tiene la forma

$$G_k(t) = \eta^k + e^{-2t} \sum_{l=-\infty}^{\infty} A_l I_{k-l}(2\gamma t). \quad (2.42)$$

Sin embargo, la solución también debe satisfacer la condición inicial especificada $G_k(t=0)$, por ende

$$\begin{aligned} G_k(0) &= \eta^k + \sum_{l=-\infty}^{\infty} A_l I_{k-l}(0) \\ &= \eta^k + \sum_{l=-\infty}^{\infty} A_l \delta_{kl} \\ &= \eta^k + A_k, \end{aligned} \quad (2.43)$$

donde se usó $\lim_{z \rightarrow 0} I_n(z) = \delta_{n0}$ [22]. De esta manera, se obtiene $A_l = G_l(0) - \eta^l$, válido para $l > 0$. Para hallar los coeficientes con $l < 0$, se usa el método de imágenes:

$$\begin{aligned} G_k(t) &= \eta^k + e^{-2t} \sum_{l \geq 1} A_l I_{k-l}(2\gamma t) + e^{-2t} \sum_{l \leq -1} B_l I_{k-l}(2\gamma t) \\ &= \eta^k + e^{-2t} \sum_{l \geq 1} [A_l I_{k-l}(2\gamma t) + B_{-l} I_{k+l}(2\gamma t)], \end{aligned} \quad (2.44)$$

y se tiene en cuenta la condición de frontera $G_0(t) = 1$. Así,

$$\begin{aligned} G_0(t) &= 1 + e^{-2t} \sum_{l \geq 1} [A_l I_{-l}(2\gamma t) + B_{-l} I_l(2\gamma t)] \\ 0 &= e^{-2t} \sum_{l \geq 1} [A_l + B_{-l}] I_l(2\gamma t), \end{aligned} \quad (2.45)$$

donde se usó la propiedad $I_{-n}(z) = I_n(z)$ [22]. Se concluye entonces, que los coeficientes cumplen $B_{-l} = -A_l = -[G_l(0) - \eta^l]$. De este modo, la ecuación general que describe la dependencia temporal de la función de correlación de pares de espines toma la forma

$$\begin{aligned} G_k(t) &= \eta^k + e^{-2t} \sum_{l \geq 1} [[G_l(0) - \eta^l] I_{k-l}(2\gamma t) - [G_l(0) - \eta^l] I_{k+l}(2\gamma t)] \\ &= \eta^k + e^{-2t} \sum_{l \geq 1} [G_l(0) - \eta^l] [I_{k-l}(2\gamma t) - I_{k+l}(2\gamma t)] \\ &= e^{-k/\xi} + e^{-2t} \sum_{l \geq 1} [G_l(0) - e^{-l/\xi}] [I_{k-l}(2\gamma t) - I_{k+l}(2\gamma t)], \end{aligned} \quad (2.46)$$

donde en la última igualdad se tuvo en cuenta la Ec. (2.41) .

Nuevamente, el comportamiento más interesante surge cuando la temperatura es igual a cero ($\gamma, \eta \rightarrow 1$). Para la condición inicial aleatoria $G_l(0) = m(0)^2$, donde $m(0)$ es la magnetización inicial, la Ec. (2.46) se reduce a

$$G_k(t) = 1 + e^{-2t} (m(0)^2 - 1) \sum_{l \geq 1} [I_{k-l}(2t) - I_{k+l}(2t)]. \quad (2.47)$$

En la sumatoria, por la propiedad $I_{-n}(z) = I_n(z)$ [22], a partir de $l = 2k + 1$ todos los términos correspondientes a $I_{k+l}(2t)$ se anulan con los términos correspondientes a $I_{k-l}(2t)$, por lo tanto, los términos que contribuyen en la sumatoria son los proporcionales a $I_{k-l}(2t)$ con $l \in [1, 2k]$. De este modo, teniendo en cuenta la propiedad mencionada, la Ec. (2.47) se puede expresar de la forma

$$G_k(t) = 1 + e^{-2t} (m(0)^2 - 1) \left[I_0(2t) + I_k(2t) + 2 \sum_{j=1}^{k-1} I_j(2t) \right], \quad (2.48)$$

donde el primer y segundo término dentro de los corchetes corresponden a $l = k$ y $l = 2k$, respectivamente. En la sumatoria se tiene en cuenta que el máximo índice puede ser k (cuando $l = 2k$), y se agrega un

factor de 2 por el hecho de que hay igual número de subíndices positivos y negativos para $I_{k-l}(2t)$, pues en $l = k$ se tiene $k - l = 0$.

De las expresiones (2.35) y (2.48), la densidad de paredes de dominio es simplemente

$$\rho(t) = \frac{1}{2}e^{-2t}(1 - m(0)^2)[I_0(2t) + I_1(2t)]. \quad (2.49)$$

Teniendo en cuenta que $I_j(z) \simeq (2\pi z)^{-1/2}e^z$, para $z \gg 1$ [22], el comportamiento asintótico de $\rho(t)$ es

$$\rho(t) \simeq (1 - m(0)^2)(4\pi t)^{-1/2}. \quad (2.50)$$

Si la magnetización inicial es cero, la densidad de paredes de dominio decae asintóticamente como

$$\rho(t) \simeq (4\pi t)^{-1/2}. \quad (2.51)$$

Otro caso particular de interés, está dado por la condición inicial antiferromagnética, en donde $G_l(0) = (-1)^l$. Usando la Ec. (2.46), la función de correlación toma la forma

$$G_k(t) = 1 + e^{-2t} \sum_{l \geq 1} [(-1)^l - 1][I_{k-l}(2t) - I_{k+l}(2t)]. \quad (2.52)$$

Realizando un proceso análogo al del caso anterior, se obtiene

$$G_k(t) = \begin{cases} 1 - 4e^{-2t} \sum_{\substack{j=1 \\ j \text{ impar}}}^{k-1} I_j(2t), & \text{si } k \text{ es par,} \\ 1 - 2e^{-2t} \left[I_0(2t) + 2 \sum_{\substack{j=2 \\ j \text{ par}}}^{k-1} I_j(2t) \right], & \text{si } k \text{ es impar.} \end{cases} \quad (2.53)$$

Ahora, de las Ecs. (2.35) y (2.53) la densidad de paredes de dominio está dada por

$$\rho(t) = e^{-2t} I_0(2t), \quad (2.54)$$

cuyo comportamiento asintótico es el mismo que para el caso de la condición inicial aleatoria con magnetización inicial $m(0) = 0$ dado por la Ec. (2.51).

Generalmente, para una dinámica dada el comportamiento de la densidad de paredes de dominios depende fuertemente de la magnetización inicial [8], como se puede ver en las Ecs. (2.49), (2.50), (2.51) y (2.54). Finalmente, se debe mencionar que para $T = 0$ y $m(0) = 0$ la dinámica de las paredes de dominio coincide con *Marcha Aleatoria con Aniquilación* (ARW por sus siglas en inglés) [23]. En la ARW, las partículas inicialmente colocadas de forma aleatoria en una red unidimensional, realizan una marcha aleatoria simétrica y están sometidas a la reacción $A + A \rightarrow 0$. Esto es, siempre que una partícula intenta saltar a un sitio de red ocupado, este par de partículas se eliminan del sistema, es decir, se aniquilan. La densidad de partículas de este sistema, $\rho_A(t)$, decae de acuerdo a [23, 24]: $\rho_A(t) = (4\pi t)^{-1/2}$, para $t \gg 1$. Las paredes de dominio también ejecutan una marcha aleatoria, y se aniquilan tal y como lo hacen las partículas A (Fig. 2.3), obedeciendo la ley de decaimiento anterior.

2.2.2. Cadena Ising en presencia de un campo magnético

En presencia de un campo magnético H distinto de cero, el segundo término del hamiltoniano de la cadena de espines Ising ferromagnética dado por la Ec. (2.1) deja de ser nulo. Debido a esto se pierde una simetría, puesto que las dos direcciones posibles de los espines ya no son equivalentes. Al igual que antes, por simplicidad tomamos la misma constante de acoplamiento para todos los pares de espines, esto es $J_{ij} = J$.

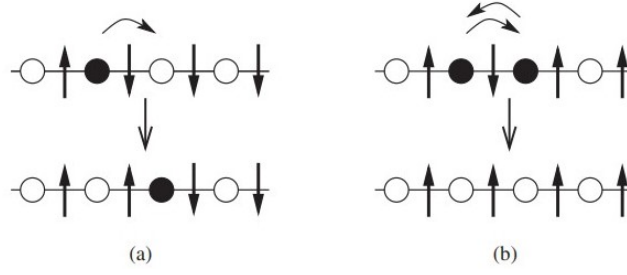


Figura 2.3: Aniquilación en una dimensión: (a) salto de una partícula a un sitio vacío y (b) aniquilación de partículas. También se muestra una representación equivalente en términos de espines, donde una partícula es equivalente a una pared de dominio. Tomado de la Ref. [8].

Usando la condición de balance detallado (2.2) para el caso de campo no nulo, se obtiene que las tasas de transición satisfacen

$$\begin{aligned}
 \frac{\omega_i(\mathcal{S})}{\omega_i(\mathcal{S}^i)} &= \frac{P_{eq}(\mathcal{S}^i)}{P_{eq}(\mathcal{S})} \\
 &= \frac{e^{-\beta J s_i(s_{i-1} + s_{i+1})} e^{-\beta H s_i}}{e^{\beta J s_i(s_{i-1} + s_{i+1})} e^{\beta H s_i}} \\
 &= \frac{1 - \frac{1}{2}\gamma s_i(s_{i-1} + s_{i+1})}{1 + \frac{1}{2}\gamma s_i(s_{i-1} + s_{i+1})} \frac{1 - h s_i}{1 + h s_i},
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

donde $\gamma = \tanh(2\beta J)$ y $h = \tanh(\beta H)$. Note que para escribir la Ec. (2.55) se usó la identidad (2.5) y la relación $\tanh(\epsilon x) = \epsilon \tanh x$, válida cuando $\epsilon = 0, \pm 1$. De ahora en adelante y sin pérdida de generalidad, se toma el campo magnético positivo, esto es $H > 0$. Una escogencia natural de la tasa de transición es, por lo tanto,

$$\omega_i(\mathcal{S}) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\gamma}{2} s_i(s_{i-1} + s_{i+1}) - h s_i + \frac{\gamma}{2} h(s_{i-1} + s_{i+1}) \right]. \tag{2.56}$$

En este caso, el campo magnético da origen a términos lineales en las variables de espín. Siguiendo un desarrollo análogo al de la Ec. (2.19), reemplazando la tasa de transición (2.56) en la Ec. (2.11), se llega a que el valor promedio S_i satisface

$$\frac{dS_i}{dt} = -S_i + \frac{\gamma}{2}(S_{i-1} + S_{i+1}) + h - \frac{\gamma}{2}h(S_{i-1,i} + S_{i,i+1}). \tag{2.57}$$

Es importante resaltar que la Ec. (2.57) involucra no solo valores medios de la forma S_j , sino que también aparece la función de correlación de pares de espines adyacentes. Similarmente, reemplazando la tasa de transición (2.56) en la Ec. (2.18), se encuentra que la ecuación que describe la evolución de la función de correlación de pares contiene correlaciones de tres espines, esto es

$$\begin{aligned}
 \frac{dS_{i,j}}{dt} &= h(S_i + S_j) - 2S_{i,j} + \frac{\gamma}{2}(S_{i-1,j} + S_{i+1,j}) + \frac{\gamma}{2}(S_{i,j-1} + S_{i,j+1}) \\
 &+ \frac{\gamma}{2}h(S_{i-1,i,j} + S_{i,i+1,j}) + \frac{\gamma}{2}h(S_{i,j-1,j} + S_{i,j,j+1}).
 \end{aligned} \tag{2.58}$$

Las dos últimas ecuaciones sugieren que existe un patrón jerárquico que procede hasta infinito. En este patrón, la ecuación que describe la evolución temporal de la función de correlación de un cierto orden contendrá siempre términos correspondientes a la función de correlación del orden siguiente. Por este motivo, la dinámica del sistema en presencia de un campo magnético no nulo no puede obtenerse analíticamente de forma exacta.

Si bien, el comportamiento a temperatura finita es analíticamente intratable, el caso de $T = 0$ es más simple y aún interesante. Para determinar las tasas de transición a $T = 0$, es conveniente utilizar una dinámica simplificada en donde solo se permiten cambios de espín que involucran disminución en la energía [25, 26, 27]. Para entender esta elección, se debe recordar que el estado de equilibrio del sistema a $T = 0$ está dado por el mínimo de energía, pues no hay fluctuaciones térmicas. Usando el hamiltoniano dado por la Ec. (2.1) y tomando por simplicidad $J_{ij} = J$, se obtiene que la contribución del espín i a la energía está dada por

$$h_i = -Js_i(s_{i-1} + s_{i+1}) - Hs_i, \quad (2.59)$$

y por tanto, el cambio en la energía del sistema al cambiar su orientación es

$$\Delta E = 2[Js_i(s_{i-1} + s_{i+1}) + Hs_i]. \quad (2.60)$$

Así, el cambio en la energía para las 8 configuraciones posibles de 3 espines consecutivos está dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_1 : \uparrow\uparrow\uparrow \rightarrow \Delta E_1 &= 2(2J + H) & \mathcal{C}_2 : \uparrow\downarrow\uparrow \rightarrow \Delta E_2 &= -2(2J + H) \\ \mathcal{C}_3 : \uparrow\uparrow\downarrow \rightarrow \Delta E_3 &= 2H & \mathcal{C}_4 : \uparrow\downarrow\downarrow \rightarrow \Delta E_4 &= -2H \\ \mathcal{C}_5 : \downarrow\uparrow\uparrow \rightarrow \Delta E_5 &= 2H & \mathcal{C}_6 : \downarrow\downarrow\uparrow \rightarrow \Delta E_6 &= -2H \\ \mathcal{C}_7 : \downarrow\uparrow\downarrow \rightarrow \Delta E_7 &= 2(-2J + H) & \mathcal{C}_8 : \downarrow\downarrow\downarrow \rightarrow \Delta E_8 &= 2(2J - H) \end{aligned}$$

Se observa que en la configuración $\mathcal{C}_7$ se debe cumplir que $H < 2J$ para que la energía disminuya debido al cambio de orientación del espín central. Por su parte, en la configuración $\mathcal{C}_8$ se necesita que $H > 2J$ para que el espín central cambie su estado y haya una disminución en la energía. Este hecho, conduce a que en $T = 0$ existan dos regímenes con dinámicas diferentes. El régimen de campo fuerte en donde $H > 2J$ y el régimen de campo débil dado por $H < 2J$.

Régimen de campo fuerte ($H > 2J$)

Debido a que el campo magnético se toma positivo, las tasas de transición asociadas a las configuraciones $\mathcal{C}_1$, $\mathcal{C}_3$, $\mathcal{C}_5$ y $\mathcal{C}_7$ son nulas, porque implican incrementos de energía, mientras que, las asociadas a las configuraciones $\mathcal{C}_2$, $\mathcal{C}_4$, $\mathcal{C}_6$ y $\mathcal{C}_8$ valen uno, puesto que estos procesos disminuyen la energía. Entonces, los espines $+1$ ($\uparrow$) no evolucionan, mientras que, los espines -1 ($\downarrow$) cambian con una tasa igual a uno, independientemente del estado de los espines vecinos. Además, si analizamos $\gamma = \tanh(2\beta J)$ y $h = \tanh(\beta H)$ cuando $T \rightarrow 0$, se llega a que h tiende a uno mucho más rápido que γ . Por lo tanto, la tasa de transición y el espín promedio dados por (2.56) y (2.57) se reducen a

$$\omega_i(\mathcal{S}) = \frac{1}{2}(1 - s_i), \quad (2.61)$$

y

$$\frac{dS_i}{dt} = 1 - S_i, \quad (2.62)$$

respectivamente. Integrando la Ec. (2.62) con respecto al tiempo, se obtiene

$$S_i = 1 + [S_i(0) - 1]e^{-t}. \quad (2.63)$$

Se observa que el estado donde los espines están completamente alineados con el campo se alcanza exponencialmente rápido. Partiendo de una condición inicial no correlacionada con magnetización cero, esto es $S_i(0) = 0$, la Ec. (2.63) toma la forma

$$S_i = 1 - e^{-t}. \quad (2.64)$$

Ya que los espines no están correlacionados, todas las funciones de correlación se factorizan. Esto es, se pueden escribir como productos de S_i ,

$$S_{i_1, \dots, i_n} = (1 + [S_i(0) - 1]e^{-t})^n. \quad (2.65)$$

Régimen de campo débil ($H < 2J$)

En este caso, después de analizar las 8 configuraciones posibles de 3 espines consecutivos, se llega a que los únicos casos en los cuales el espín central puede cambiar son

$$\mathcal{C}_2 : \uparrow \downarrow \uparrow \Rightarrow \uparrow \uparrow \uparrow \quad \mathcal{C}_4 : \uparrow \downarrow \downarrow \Rightarrow \uparrow \uparrow \downarrow \quad \mathcal{C}_6 : \downarrow \downarrow \uparrow \Rightarrow \downarrow \uparrow \uparrow \quad \mathcal{C}_7 : \downarrow \uparrow \downarrow \Rightarrow \downarrow \downarrow \downarrow$$

Con esta dinámica, el tamaño de los dominios de espines -1 ($\downarrow$) se reduce sistemáticamente. Para hallar la ecuación maestra para la probabilidad de encontrar un dominio de espines -1 de tamaño n , $P_n^\downarrow$, se deben tener en cuenta los procesos discutidos a continuación: Reducción de dominios de tamaño $n + 1$ por difusión de una de las paredes del dominio:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_1 : \cdots \uparrow \underbrace{\downarrow \downarrow \cdots \downarrow}_{n+1} \uparrow \cdots &\xrightarrow{\omega_1 = 1} \cdots \uparrow \underbrace{\uparrow \downarrow \cdots \downarrow}_n \uparrow \cdots \\ \mathcal{E}'_1 : \cdots \uparrow \underbrace{\downarrow \cdots \downarrow \downarrow}_{n+1} \uparrow \cdots &\xrightarrow{\omega'_1 = 1} \cdots \uparrow \underbrace{\downarrow \cdots \downarrow \uparrow}_n \uparrow \cdots \end{aligned}$$

Reducción de dominios de tamaño n por difusión de una de las paredes del dominio:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_2 : \cdots \uparrow \underbrace{\downarrow \downarrow \cdots \downarrow}_n \uparrow \cdots &\xrightarrow{\omega_2 = 1} \cdots \uparrow \underbrace{\uparrow \downarrow \cdots \downarrow}_{n-1} \uparrow \cdots \\ \mathcal{E}'_2 : \cdots \uparrow \underbrace{\downarrow \cdots \downarrow \downarrow}_n \uparrow \cdots &\xrightarrow{\omega'_2 = 1} \cdots \uparrow \underbrace{\downarrow \cdots \downarrow \uparrow}_{n-1} \uparrow \cdots \end{aligned}$$

El cambio de orientación del espín central de las configuraciones $(\downarrow \uparrow \downarrow)$ y $(\uparrow \downarrow \uparrow)$, da lugar a procesos de coalescencia de dominios. De esta forma, el dominio más corto posible de longitud $n = 1$, tiene un rol importante en el proceso de coalescencia y por lo tanto es un proceso fundamental en la dinámica del sistema a $T = 0$ con $H < 2J$. Cuando un dominio de un solo espín cambia su estado, tres dominios se fusionan en un solo dominio más grande, como se muestra a continuación:

$$\cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow \uparrow}_i \downarrow \underbrace{\uparrow \uparrow \cdots \uparrow}_j \downarrow \cdots \xrightarrow{\omega} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow}_{i+j+1} \downarrow \cdots$$

Para que los procesos que involucran $(\downarrow \uparrow \downarrow)$ ocurran, se necesita un dominio de espines $+1$ ($\uparrow$) de tamaño $n = 1$ entre dos dominios de espines -1 de tamaños i y j . En la aproximación de intervalos independientes, los términos en la ecuación maestra correspondientes a coalescencia son proporcionales a la probabilidad de tener un dominio de espines $+1$ de tamaño $n = 1$, $P_1^\uparrow$ [7, 10]. En $T = 0$ no se tienen fluctuaciones térmicas y el sistema tiende a ordenarse, es decir, los espines tienden a alinearse con el campo, por lo cual, los dominios de espines $+1$ de tamaño $n = 1$ desaparecerán eventualmente para dar lugar a dominios de mayor tamaño, y $P_1^\uparrow \approx 0$. Por esta razón, para tiempos grandes estos procesos de coalescencia de dominios pueden considerarse despreciables. Así, la ecuación que describe la evolución temporal de $P_n^\downarrow$, para $n \geq 2$, está dada por

$$\begin{aligned} \frac{dP_n^\downarrow}{dt} &= \omega_1 P(\mathcal{E}_1) + \omega'_1 P(\mathcal{E}'_1) - \omega_2 P(\mathcal{E}_2) - \omega'_2 P(\mathcal{E}'_2) \\ &= (\omega_1 + \omega'_1) P_{n+1}^\downarrow - (\omega_2 + \omega'_2) P_n^\downarrow \\ &= 2(P_{n+1}^\downarrow - P_n^\downarrow), \end{aligned} \tag{2.66}$$

donde $P(\mathcal{E}_i)$ es la probabilidad de tener la configuración $\mathcal{E}_i$, y se usó las identidades $P(\mathcal{E}_i) = P(\mathcal{E}'_i)$, $P(\mathcal{E}_1) = P_{n+1}^\downarrow$ y $P(\mathcal{E}_2) = P_n^\downarrow$. El caso $n = 1$ es un poco diferente. Para ello, se tiene en cuenta el proceso

$$\mathcal{E}_3 : \cdots \uparrow \downarrow \uparrow \cdots \xrightarrow{\omega_3 = 1} \cdots \uparrow \uparrow \uparrow \cdots$$

El término de ganancia es igual al de la Ec. (2.66) tomando $n = 1$. De esta manera, la ecuación que describe la evolución de $P_1^\downarrow$ es

$$\begin{aligned}\frac{dP_1^\downarrow}{dt} &= (\omega_1 + \omega'_1)P_2^\downarrow - \omega_3 P(\mathcal{E}_3) \\ &= (\omega_1 + \omega'_1)P_2^\downarrow - \omega_3 P_1^\downarrow \\ &= 2P_2^\downarrow - P_1^\downarrow,\end{aligned}\tag{2.67}$$

donde se tuvo en cuenta que $P(\mathcal{E}_3) = P_1^\downarrow$. La Ec. (2.66) para $n = N$ puede ser resuelta fácilmente tomando la condición de frontera $P_{N+1}^\downarrow = 0$, donde N es el tamaño del sistema. Así, $P_N^\downarrow(t) = P_N^\downarrow(0)e^{-2t}$, lo cual permite hallar una expresión para $P_{N-1}^\downarrow(t)$. Sustituyendo recursivamente en las ecuaciones correspondientes a $n < N - 1$, y usando el método del factor integrante para resolver la ecuación diferencial resultante, se obtiene

$$P_{N-n}^\downarrow(t) = \left[\sum_{j=0}^n \frac{(2t)^j}{j!} P_{N-n+j}^\downarrow(0) \right] e^{-2t},\tag{2.68}$$

para $N - n \geq 2$. Realizando la sustitución $N - n \leftrightarrow n$, se encuentra

$$P_n^\downarrow(t) = \left[\sum_{j=0}^{N-n} \frac{(2t)^j}{j!} P_{n+j}^\downarrow(0) \right] e^{-2t}.\tag{2.69}$$

La solución explícita para $P_1^\downarrow(t)$ se obtiene como se indica a continuación. Primero se especifica una condición inicial, $P_j^\downarrow(0)$, y se determina explícitamente $P_2^\downarrow(t)$ por medio de la Ec. (2.69). Finalmente se usa el resultado obtenido para $P_2^\downarrow(t)$ en la Ec. (2.67) para integrar y determinar $P_1^\downarrow(t)$. Una condición inicial habitual establece que todos los dominios de espines -1 son de longitud L , esto es, $P_j^\downarrow(0) = \delta_{jL}$. Si se reemplaza la condición inicial anterior en la Ec. (2.69), se puede observar que no se forman dominios de tamaño mayor a L , es decir, la probabilidad $P_n^\downarrow(t)$ de que se forme un dominio de espines -1 de tamaño $n > L$ es cero, lo cual es acorde a lo dicho previamente en esta sección. Para esta condición inicial es sencillo encontrar una expresión para $P_1^\downarrow(t)$, para ello, se debe resolver la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{dP_1^\downarrow}{dt} + P_1^\downarrow = \frac{2^{L-1}}{(L-2)!} t^{L-2} e^{-2t}.\tag{2.70}$$

Usando el método del factor integrante para resolver la Ec. (2.70) se obtiene

$$\begin{aligned}P_1^\downarrow(t) &= \frac{2^{L-1}}{(L-2)!} \left[\int t^{L-2} e^{-t} dt \right] e^{-t} + c e^{-t} \\ &= c e^{-t} - \frac{2^{L-1}}{(L-2)!} \Gamma(L-1, t) e^{-t}\end{aligned}\tag{2.71}$$

con $\Gamma(L-1, t)$ la función gamma incompleta [22] y $c = P_1^\downarrow(0) + \frac{2^{L-1}}{(L-2)!} \Gamma(L-1, 0)$ una constante. Es importante resaltar que las Ecs. (2.69) y (2.71) suponen que $P_1^\uparrow \approx 0$, por lo tanto no son válidas para condiciones iniciales en donde existan dominios de espines $+1$ de tamaño uno.

2.2.3. Evolución temporal de la distribución de tamaños de dominios

Como se muestra en la Fig. 2.2, la creación, difusión y aniquilación de paredes de dominios son los procesos fundamentales con los cuales evoluciona la cadena de Ising en la dinámica de Glauber [4, 5, 23]. Una forma de describir esta evolución es por medio de la distancia media entre paredes de dominio

o su inverso, la densidad de paredes de dominio, la cual decrece como $(1 - m(0)^2)(4\pi t)^{-1/2}$ a $T = 0$, donde $m(0)$ es la magnetización inicial (ver Ec. (2.50)). Una cantidad que contiene más información es la distribución de tamaños de dominios, es decir, la probabilidad P_n de encontrar un dominio de tamaño n .

Para describir la evolución temporal de P_n para valores arbitrarios de J , β y H , se recurre al formalismo de la ecuación maestra (Apéndice B), y a la aproximación de intervalos independientes, en la cual se asume que dominios vecinos no están correlacionados [6, 7, 10, 16]. Con esta aproximación, se puede escribir la probabilidad de encontrar varios dominios adyacentes de longitud especificada como el producto de distribuciones de un solo dominio. Además, se consideran los tres procesos fundamentales mencionados al inicio de esta sección: difusión de paredes de dominio, fragmentación y coalescencia de dominios.

Usando la Ec. (2.56), se calculan las tasas de transición para el espín central de una configuración de tres espines consecutivos. Las ocho configuraciones posibles y sus respectivas tasas se muestran a continuación:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_1 : \uparrow \uparrow \uparrow \rightarrow \omega_1 &= \frac{1}{2}[1 - \gamma - h(1 - \gamma)] & \mathcal{C}_2 : \uparrow \downarrow \uparrow \rightarrow \omega_2 &= \frac{1}{2}[1 + \gamma + h(1 + \gamma)] \\ \mathcal{C}_3 : \uparrow \uparrow \downarrow \rightarrow \omega_3 &= \frac{1}{2}(1 - h) & \mathcal{C}_4 : \uparrow \downarrow \downarrow \rightarrow \omega_4 &= \frac{1}{2}(1 + h) \\ \mathcal{C}_5 : \downarrow \uparrow \uparrow \rightarrow \omega_5 &= \frac{1}{2}(1 - h) & \mathcal{C}_6 : \downarrow \downarrow \uparrow \rightarrow \omega_6 &= \frac{1}{2}(1 + h) \\ \mathcal{C}_7 : \downarrow \uparrow \downarrow \rightarrow \omega_7 &= \frac{1}{2}[1 + \gamma - h(1 + \gamma)] & \mathcal{C}_8 : \downarrow \downarrow \downarrow \rightarrow \omega_8 &= \frac{1}{2}[1 - \gamma + h(1 - \gamma)] \end{aligned}$$

Las tasas de transición anteriores, son la información de entrada que se necesita para determinar las contribuciones a la ecuación maestra de los procesos que tienen lugar en la formación de dominios. Debido a que en presencia de un campo magnético las distribuciones de dominios de espines $+1$ ($\uparrow$) y -1 ($\downarrow$) son diferentes, es conveniente tratar primero el caso de dominios de espines $+1$, así como también estudiar por separado los procesos de difusión de paredes de dominio, coalescencia y fragmentación de dominios.

Difusión de paredes de dominio: Para hallar las contribuciones a la ecuación maestra correspondientes a difusión de paredes de dominio se analizan los siguientes eventos: Difusión de paredes en dominios de tamaño n :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_1 : \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots &\xrightarrow{\omega_6} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \uparrow \cdots \uparrow}_{n+1} \downarrow \cdots & \mathcal{E}'_1 : \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots &\xrightarrow{\omega_4} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_{n+1} \downarrow \cdots \\ \mathcal{E}_2 : \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots &\xrightarrow{\omega_5} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \uparrow \cdots \uparrow}_{n-1} \downarrow \cdots & \mathcal{E}'_2 : \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots &\xrightarrow{\omega_3} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_{n-1} \downarrow \cdots \end{aligned}$$

Por su parte, para dominios de tamaño $n + 1$ y $n - 1$ se tiene:

$$\mathcal{E}_3 : \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \uparrow \cdots \uparrow}_{n+1} \downarrow \cdots \xrightarrow{\omega_5} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots \quad \mathcal{E}'_3 : \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_{n+1} \downarrow \cdots \xrightarrow{\omega_3} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots ,$$

y

$$\mathcal{E}_4 : \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \uparrow \cdots \uparrow}_{n-1} \downarrow \cdots \xrightarrow{\omega_6} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots \quad \mathcal{E}'_4 : \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_{n-1} \downarrow \cdots \xrightarrow{\omega_4} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots ,$$

respectivamente. De esta manera, el término que da cuenta de las contribuciones de la difusión de

paredes de dominio está dado por

$$\begin{aligned}
 \frac{dP_n^\uparrow}{dt} &= -\omega_6 P(\mathcal{E}_1) - \omega_4 P(\mathcal{E}'_1) - \omega_5 P(\mathcal{E}_2) - \omega_3 P(\mathcal{E}'_2) + \omega_5 P(\mathcal{E}_3) + \omega_3 P(\mathcal{E}'_3) \\
 &\quad + \omega_6 P(\mathcal{E}_4) + \omega_4 P(\mathcal{E}'_4) \\
 &= -2\omega_4 P(\mathcal{E}_1) - 2\omega_3 P_n^\uparrow + 2\omega_3 P_{n+1}^\uparrow + 2\omega_4 P(\mathcal{E}_4),
 \end{aligned} \tag{2.72}$$

donde $P(\mathcal{E}_i)$ es la probabilidad de tener la configuración $\mathcal{E}_i$, y se usaron las identidades $\omega_4 = \omega_6$, $\omega_3 = \omega_5$, $P(\mathcal{E}_i) = P(\mathcal{E}'_i)$, $P(\mathcal{E}_2) = P_n^\uparrow$, y $P(\mathcal{E}_3) = P_{n+1}^\uparrow$. Las probabilidades $P(\mathcal{E}_1)$ y $P(\mathcal{E}_4)$ se pueden escribir en términos de P_n y P_{n-1} , respectivamente. Para ello, se tiene en cuenta que

$$P(\mathcal{E}_1) + P(\mathcal{E}_5) = P_n^\uparrow, \tag{2.73}$$

$$P(\mathcal{E}_4) + P(\mathcal{E}_6) = P_{n-1}^\uparrow, \tag{2.74}$$

donde

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}_5 : & \cdots \uparrow \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots \\
 \mathcal{E}_6 : & \cdots \uparrow \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_{n-1} \downarrow \cdots
 \end{aligned}$$

Cabe mencionar que los eventos anteriores dan cuenta de la coalescencia de un dominio de tamaño n y $n-1$ con un dominio de cualquier tamaño. Las probabilidades $P(\mathcal{E}_5)$ y $P(\mathcal{E}_6)$ se pueden aproximar usando la aproximación de intervalos independientes. Así,

$$P(\mathcal{E}_5) \approx \frac{P(\uparrow \downarrow \uparrow)}{\rho^\uparrow} P(\downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow) = \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow} P_n^\uparrow, \tag{2.75}$$

$$P(\mathcal{E}_6) \approx \frac{P(\uparrow \downarrow \uparrow)}{\rho^\uparrow} P(\downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_{n-1} \downarrow) = \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow} P_{n-1}^\uparrow, \tag{2.76}$$

donde el factor $\rho^\uparrow$ es la densidad de dominios de espines $+1$ y da cuenta de la probabilidad de tener un dominio de tamaño 1 junto a un dominio de espines $+1$ de cualquier tamaño. Usando las Ecs. (2.75) y (2.76) en (2.73) y (2.74), respectivamente, se obtiene

$$P(\mathcal{E}_1) \approx P_n^\uparrow - \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow} P_n^\uparrow, \tag{2.77}$$

$$P(\mathcal{E}_4) \approx P_{n-1}^\uparrow - \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow} P_{n-1}^\uparrow, \tag{2.78}$$

donde el segundo término resta la contribución de la coalescencia del dominio considerado con un dominio de cualquier tamaño. Usando las Ecs. (2.77) y (2.78), la Ec. (2.72) toma la forma

$$\frac{dP_n^\uparrow}{dt} = -2\omega_4 P_n^\uparrow \left(1 - \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow}\right) - 2\omega_3 P_n^\uparrow + 2\omega_3 P_{n+1}^\uparrow + 2\omega_4 P_{n-1}^\uparrow \left(1 - \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow}\right). \tag{2.79}$$

Como la Ec. (2.79) es independiente de J , se concluye que las contribuciones a la ecuación maestra debidas a la difusión de paredes de dominio no se ven afectadas por la interacción entre los espines. Por otro lado, existe una dependencia del campo magnético aplicado y de la temperatura.

Coalescencia de dominios: Para encontrar las contribuciones de la coalescencia de dominios a la ecuación maestra se analizan los siguientes eventos:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}_5 : & \quad \cdots \uparrow \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots \xrightarrow{\omega_2} \cdots \uparrow \uparrow \cdots \uparrow \downarrow \cdots \\
 \mathcal{E}'_5 : & \quad \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \uparrow \cdots \xrightarrow{\omega_2} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_{n+1+\cdots} \uparrow \cdots \\
 \mathcal{E}_7 : & \quad \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_i \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_j \downarrow \cdots \xrightarrow{\omega_2} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow \uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots
 \end{aligned}$$

Los dominios de tamaño i , 1 y j , coalescen dando como resultado un dominio de tamaño n , donde $i+1+j = n$. Los términos de pérdida dan cuenta de la coalescencia de un dominio de tamaño n con un dominio de cualquier tamaño. De esta manera, las contribuciones a la ecuación maestra corresponden a

$$\begin{aligned}
 \frac{dP_n^\uparrow}{dt} \text{coalescencia} &= -\omega_2 P(\mathcal{E}_5) - \omega_2 P(\mathcal{E}'_5) + \omega_2 \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P(\mathcal{E}_7) \\
 &= -2\omega_2 P(\mathcal{E}_5) + \omega_2 \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P(\mathcal{E}_7),
 \end{aligned} \tag{2.80}$$

donde se usó la identidad $P(\mathcal{E}_i) = P(\mathcal{E}'_i)$. Mediante la aproximación de intervalos independientes se puede escribir $P(\mathcal{E}_7)$ en términos de P_i y P_j . Así,

$$P(\mathcal{E}_7) \approx \frac{P(\uparrow \downarrow \uparrow)}{(\rho^\uparrow)^2} P(\downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_i \downarrow) P(\downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_j \downarrow) = \frac{P_1^\downarrow}{(\rho^\uparrow)^2} P_i^\uparrow P_j^\uparrow. \tag{2.81}$$

El factor $\rho^\uparrow$ está elevado al cuadrado debido a que el dominio de tamaño 1 debe estar junto a dos dominios de espines $+1$. Reemplazando las Ecs. (2.75) y (2.81) en (2.80) se obtiene

$$\frac{dP_n^\uparrow}{dt} \text{coalescencia} = -2\omega_2 \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow} P_n^\uparrow + \omega_2 \frac{P_1^\downarrow}{(\rho^\uparrow)^2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P_i^\uparrow P_j^\uparrow. \tag{2.82}$$

Fragmentación de dominios: Para el caso de fragmentación de dominios, se analiza el siguiente evento:

$$\mathcal{E}_8 : \quad \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow \uparrow \cdots \uparrow}_n \downarrow \cdots \xrightarrow{\omega_1} \cdots \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_i \downarrow \underbrace{\uparrow \cdots \uparrow}_j \downarrow \cdots$$

En la configuración $\mathcal{E}_8$ hay $n+2$ espines, sin embargo, el número de espines que pueden cambiar su estado con una tasa de transición ω_1 es $n-2$. Note que se han descontado los espines de los extremos, ya que conforman las paredes del dominio. Estos espines de los extremos se excluyen debido a que su cambio de estado corresponde a un caso diferente al que se está considerando. Por lo tanto, el término que da cuenta de la contribución de la fragmentación de dominios a la ecuación maestra está dado por

$$\begin{aligned}
 \frac{dP_n^\uparrow}{dt} \text{fragmentación} &= -\omega_1 (n-2) P(\mathcal{E}_8) \\
 &= -\omega_1 (n-2) P_n^\uparrow,
 \end{aligned}$$

válido para $n \geq 2$. Para $n = 1$ se tiene que $\frac{dP_1^\uparrow}{dt} \text{fragmentación} = 0$.

Los procesos de coalescencia y fragmentación de dominios se ven afectados tanto por las fluctuaciones térmicas del sistema como por la interacción entre los espines y el campo magnético externo. Teniendo en cuenta las contribuciones de los tres procesos fundamentales, la ecuación que describe la evolución temporal de la distribución de tamaños de dominios de espines +1 es

$$\begin{aligned}
 \frac{dP_n^\uparrow}{dt} &= \frac{dP_n^\uparrow}{dt}^{\text{difusión}} + \frac{dP_n^\uparrow}{dt}^{\text{coalescencia}} + \frac{dP_n^\uparrow}{dt}^{\text{fragmentación}} \\
 &= -2(\omega_4 + \omega_3)P_n^\uparrow + 2\omega_3P_{n+1}^\uparrow + 2\omega_4P_{n-1}^\uparrow \left(1 - \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow}\right) \\
 &+ \omega_2 \frac{P_1^\downarrow}{(\rho^\uparrow)^2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P_i^\uparrow P_j^\uparrow - 2(\omega_2 - \omega_4) \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow} P_n^\uparrow - \omega_1(n-2)P_n^\uparrow \\
 &= -2P_n^\uparrow + (1-h)P_{n+1}^\uparrow + (1+h)P_{n-1}^\uparrow \left(1 - \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow}\right) \\
 &+ \frac{1}{2}[1 + \gamma + h(1 + \gamma)] \frac{P_1^\downarrow}{(\rho^\uparrow)^2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P_i^\uparrow P_j^\uparrow - \gamma(1+h) \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow} P_n^\uparrow \\
 &- \frac{1}{2}[1 - \gamma - h(1 - \gamma)](n-2)P_n^\uparrow,
 \end{aligned} \tag{2.83}$$

válida para $n \geq 2$. Para el caso $n = 1$ se debe establecer $P_0^\uparrow = 0$, y tener en cuenta que los eventos $\mathcal{E}_2$ y $\mathcal{E}_2'$ son iguales y corresponden a

$$\mathcal{E}_2 : \cdots \downarrow \uparrow \downarrow \cdots \xrightarrow{\omega_7} \cdots \downarrow \downarrow \downarrow \cdots$$

Además, se debe considerar el siguiente evento:

$$\mathcal{E}_9 : \cdots \downarrow \downarrow \downarrow \cdots \xrightarrow{\omega_8} \cdots \downarrow \uparrow \downarrow \cdots,$$

correspondiente a la fragmentación de un dominio de espines -1. La probabilidad $P(\mathcal{E}_9)$ de tener 3 espines -1 consecutivos, se puede aproximar como $(\lambda^\downarrow)^3$, donde $\lambda^\downarrow$ es la densidad de espines -1. De este modo

$$\begin{aligned}
 \frac{dP_1^\uparrow}{dt} &= -(2\omega_4 + \omega_7)P_1^\uparrow + 2\omega_3P_2^\uparrow - 2(\omega_2 - \omega_4) \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow} P_1^\uparrow + \omega_8(\lambda^\downarrow)^3 \\
 &= -\frac{1}{2}[3 + \gamma + h(1 - \gamma)]P_1^\uparrow + (1-h)P_2^\uparrow - \gamma(1+h) \frac{P_1^\downarrow}{\rho^\uparrow} P_1^\uparrow \\
 &+ \frac{1}{2}[1 - \gamma + h(1 - \gamma)](\lambda^\downarrow)^3.
 \end{aligned} \tag{2.84}$$

El análisis para dominios de espines -1 es análogo al del caso anterior. La diferencia en las distribuciones de tamaños de dominios radica en el factor proporcional a h , debido a que los espines se comportan diferente en presencia de un campo magnético según su orientación. Cuando el campo externo es cero el modelo es simétrico al cambiar el valor del espín en todos los sitios de la red; un campo distinto de cero rompe esta simetría (Apéndice A). Por lo tanto, para obtener la ecuación que describe la evolución temporal de la distribución de tamaños de dominios de espines -1 se realiza la

sustitución $h \rightarrow -h$ en las Ecs. (2.83) y (2.84). Así, para $n \geq 2$

$$\begin{aligned}
 \frac{dP_n^\downarrow}{dt} &= -2(\omega_5 + \omega_6)P_n^\downarrow + 2\omega_6P_{n+1}^\downarrow + 2\omega_5P_{n-1}^\downarrow \left(1 - \frac{P_1^\uparrow}{\rho^\downarrow}\right) \\
 &+ \omega_7 \frac{P_1^\uparrow}{(\rho^\downarrow)^2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P_i^\downarrow P_j^\downarrow - 2(\omega_7 - \omega_5) \frac{P_1^\uparrow}{\rho^\downarrow} P_n^\downarrow - \omega_8(n-2)P_n^\downarrow \\
 &= -2P_n^\downarrow + (1+h)P_{n+1}^\downarrow + (1-h)P_{n-1}^\downarrow \left(1 - \frac{P_1^\uparrow}{\rho^\downarrow}\right) \\
 &+ \frac{1}{2}[1+\gamma-h(1+\gamma)] \frac{P_1^\uparrow}{(\rho^\downarrow)^2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P_i^\downarrow P_j^\downarrow - \gamma(1-h) \frac{P_1^\uparrow}{\rho^\downarrow} P_n^\downarrow \\
 &- \frac{1}{2}[1-\gamma+h(1-\gamma)](n-2)P_n^\downarrow,
 \end{aligned} \tag{2.85}$$

y para $n = 1$

$$\begin{aligned}
 \frac{dP_1^\downarrow}{dt} &= -(2\omega_5 + \omega_2)P_1^\downarrow + 2\omega_6P_2^\downarrow - 2(\omega_7 - \omega_5) \frac{P_1^\uparrow}{\rho^\downarrow} P_1^\downarrow + \omega_1(\lambda^\uparrow)^3 \\
 &= -\frac{1}{2}[3+\gamma-h(1-\gamma)]P_1^\downarrow + (1+h)P_2^\downarrow - \gamma(1-h) \frac{P_1^\uparrow}{\rho^\downarrow} P_1^\downarrow \\
 &+ \frac{1}{2}[1-\gamma-h(1-\gamma)](\lambda^\uparrow)^3.
 \end{aligned} \tag{2.86}$$

donde el factor $\rho^\downarrow$ es la densidad de dominios de espines -1 y da cuenta de la probabilidad de tener un dominio de tamaño 1 junto a un dominio de espines -1 de cualquier tamaño, $\lambda^\uparrow$ es la densidad de espines $+1$, y $(\lambda^\uparrow)^3$ es una aproximación para la probabilidad de tener tres espines $+1$ consecutivos. Las expresiones (2.83) a (2.86) son más generales que aquellas que se tienen reportadas en la literatura [8, 10], puesto que distinguen entre dominios de espines $+1$ y -1 , y son válidas para valores arbitrarios de J , T y H . Cabe mencionar que la magnetización inicial está determinada por las distribuciones iniciales de los tamaños de los dominios de espines $+1$ y -1 . Una magnetización inicial nula, $m(0) = 0$, corresponde a distribuciones iniciales iguales. Mientras que, para $m(0) > 0$ los valores máximos de la distribución correspondiente a espines $+1$ serán mayores a los de la correspondiente a espines -1 , y ocurrirá lo opuesto para $m(0) < 0$.

Ahora, que se ha obtenido la ecuación maestra para la distribución de tamaños de dominios de espines $+1$ y -1 , es de interés estudiar los casos límite. En el caso $H = 0$ ($h = 0$) se obtiene para $n \geq 2$

$$\begin{aligned}
 \frac{dP_n}{dt} &= -2P_n + P_{n+1} + P_{n-1} \left(1 - \frac{P_1}{\rho}\right) + \frac{1}{2}(1+\gamma) \frac{P_1}{\rho^2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P_i P_j \\
 &- \gamma \frac{P_1}{\rho} P_n - \frac{1}{2}(1-\gamma)(n-2)P_n,
 \end{aligned} \tag{2.87}$$

y para $n = 1$

$$\frac{dP_1}{dt} = -\frac{1}{2}(3+\gamma)P_1 + P_2 - \gamma \frac{P_1}{\rho} + \frac{1}{2}(1-\gamma)\lambda^3. \tag{2.88}$$

No se hace distinción entre espines $+1$ y -1 en las distribuciones debido a que son equivalentes cuando $H = 0$. Si bien, las ecuaciones que describen la evolución de las distribuciones son equivalentes, las distribuciones de tamaños de dominios no necesariamente coinciden para espines $+1$ y -1 . Como se mencionó antes, esto depende de la magnetización inicial.

Si además, se considera el caso $T \rightarrow \infty$ ($\gamma \rightarrow 0$), todos los eventos son igualmente probables, pues $w_i = \frac{1}{2} \forall i$ (ver Sec. (2.2)). Por lo tanto, para $n \geq 2$

$$\frac{dP_n}{dt} = -2P_n + P_{n+1} + P_{n-1} \left(1 - \frac{P_1}{\rho}\right) + \frac{1}{2} \frac{P_1}{\rho^2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P_i P_j - \frac{1}{2} (n-2) P_n, \quad (2.89)$$

y para $n = 1$

$$\frac{dP_1}{dt} = -\frac{3}{2} P_1 + P_2 + \frac{1}{2} \lambda^3. \quad (2.90)$$

Se puede notar que el término correspondiente a la coalescencia de un dominio de tamaño n con un dominio de cualquier tamaño desaparece.

Si por el contrario, se considera $T \rightarrow 0$ ($\gamma \rightarrow 1$), se obtiene

$$\frac{dP_n}{dt} = -2P_n + P_{n+1} + P_{n-1} \left(1 - \frac{P_1}{\rho}\right) + \frac{P_1}{\rho^2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P_i P_j - \frac{P_1}{\rho} P_n, \quad (2.91)$$

válida para $n \geq 1$. En acuerdo a los resultados reportados en las Refs. [8, 10]. Se observa que las contribuciones de la fragmentación de dominios desaparecen, lo cual se debe a que este proceso es causado por fluctuaciones térmicas y por el campo magnético externo, y al no estar presentes, la tasa de transición es cero.

Otro caso de interés se presenta cuando se tiene $T = 0$ y un campo magnético no nulo (ver Sec. 2.2.2). Para $T = 0$ y $H > 2J$, se tiene que $\omega_1 = \omega_3 = \omega_5 = \omega_7 = 0$ y $\omega_2 = \omega_4 = \omega_6 = \omega_8 = 1$. Por lo tanto, para $n \geq 2$

$$\frac{dP_n^{\uparrow}}{dt} = -2P_n^{\uparrow} + 2P_{n-1}^{\uparrow} \left(1 - \frac{P_1^{\downarrow}}{\rho^{\uparrow}}\right) + \frac{P_1^{\downarrow}}{(\rho^{\uparrow})^2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P_i^{\uparrow} P_j^{\uparrow}, \quad (2.92)$$

$$\frac{dP_n^{\downarrow}}{dt} = -2P_n^{\downarrow} + 2P_{n+1}^{\downarrow} - (n-2)P_n^{\downarrow}, \quad (2.93)$$

y para $n = 1$

$$\frac{dP_1^{\uparrow}}{dt} = -2P_1^{\uparrow} + \lambda^3, \quad (2.94)$$

$$\frac{dP_1^{\downarrow}}{dt} = -P_1^{\downarrow} + 2P_2^{\downarrow}. \quad (2.95)$$

Mientras que, para $T = 0$ y $H < 2J$ se tiene que $\omega_1 = \omega_3 = \omega_5 = \omega_8 = 0$ y $\omega_2 = \omega_4 = \omega_6 = \omega_7 = 1$. De este modo, para $n \geq 2$ se obtiene la Ec. (2.92) para el caso de dominios de espines $+1$, y para dominios de espines -1

$$\frac{dP_n^{\downarrow}}{dt} = -2P_n^{\downarrow} + 2P_{n+1}^{\downarrow} + \frac{P_1^{\uparrow}}{(\rho^{\downarrow})^2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \delta_{i+j,n-1} P_i^{\downarrow} P_j^{\downarrow} - 2 \frac{P_1^{\uparrow}}{\rho^{\downarrow}} P_n^{\downarrow}. \quad (2.96)$$

Para $n = 1$ se encuentra

$$\frac{dP_1^{\uparrow}}{dt} = -3P_1^{\uparrow} \quad (2.97)$$

$$\frac{dP_1^\downarrow}{dt} = -P_1^\downarrow + 2P_2^\downarrow - 2\frac{P_1^\uparrow}{\rho^\downarrow}P_1^\downarrow. \quad (2.98)$$

Debido a que la Ec. (2.92) se mantiene en ambos regímenes, se concluye que los dominios de espines $+1$ no se ven afectados por la magnitud del campo magnético, salvo cuando el tamaño del dominio es $n = 1$. Por otro lado, usando la Ec. (2.97) se obtiene $P_1^\uparrow(t) = P_1^\uparrow(0)e^{-3t}$, por lo que eventualmente $P_1^\uparrow(t) \approx 0$. Reemplazando este resultado en las Ecs. (2.96) y (2.98) se recuperan los resultados obtenidos al estudiar el régimen de campo magnético débil, Ecs. (2.66) y (2.67).

3 Análisis de resultados computacionales y numéricos

En este capítulo se discuten los resultados obtenidos para la magnetización, la correlación de pares de espines en el equilibrio y la formación de dominios dentro del modelo de Ising-Glauber descrito en el capítulo anterior. La ecuación maestra de la distribución de tamaños de dominios está dada por las Ecs. (2.83) a (2.86), las cuales se resuelven de manera numérica usando el algoritmo de Euler. Por su parte, la magnetización y la correlación de pares están dadas por las Ecs. (2.29) y (2.41), respectivamente. Los resultados obtenidos mediante simulaciones computacionales basadas en el método de Monte Carlo cinético (kMC) para diferentes temperaturas y campos magnéticos, son comparados con su contraparte analítica. Para todos los casos se tomó $J = 1$. La información detallada de las simulaciones computacionales se encuentra en el Apéndice C.

A menos que se especifique lo contrario, las distribuciones $P_n(t)$ obtenidas para el tamaño de dominios n se reescalan usando el cambio de variable $s(t) = n/\langle n(t) \rangle$, con $\langle n(t) \rangle$ el promedio de n en el instante de tiempo t , dado por $\sum_n n P_n(t)$. La distribución reescalada se encuentra usando $P_s = \langle n(t) \rangle P_n(t)$ [6, 23].

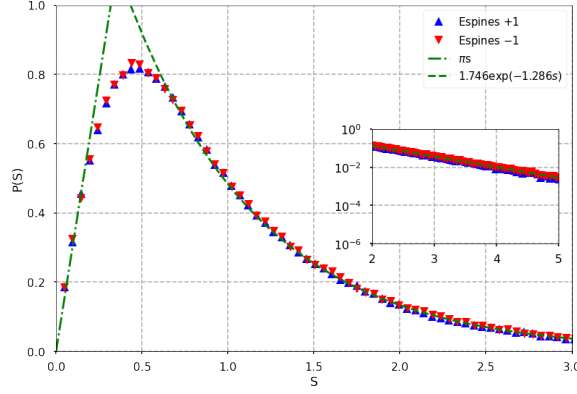
3.1. Formación de dominios en ausencia de campo magnético

Para el caso $T = 0$, se realizó la simulación mediante dos algoritmos. Usando el algoritmo de Glauber descrito en el Apéndice C.2 se implementó una simulación con una red de $N = 1000$ sitios, un ciclo temporal de 35000 pasos y se promedió sobre 20000 repeticiones. Mientras que, con el método kMC detallado en el Apéndice C.1 se tomó $\beta = 5000$ para simular la condición de temperatura cero, $N = 1000$, un ciclo temporal de 10000 pasos que se trunca al alcanzar un tiempo máximo de medida de $t = 34$ unidades, y 20000 repeticiones. En todos los casos el número de repeticiones se seleccionó con el objetivo de obtener una estadística apropiada. La Fig. 3.1 muestra la distribución de tamaños de dominios reescalada para dominios de espines $+1$ ($\uparrow$) y -1 ($\downarrow$) para diferentes valores de $m(0)$, con $T = 0$ y $H = 0$, usando la dinámica Glauber. Por su parte, la Fig. 3.2 muestra los resultados análogos pero usando el algoritmo general de kMC. Con $m(0) = 0$, se observa en las Figs. 3.1a y 3.2a que las distribuciones para los espines $+1$ y -1 coinciden. Sin embargo, con magnetizaciones iniciales diferentes de cero, $m(0) \neq 0$, se presenta una discrepancia entre ambas distribuciones, la cual depende del valor de $m(0)$, como se muestra en las Figs. 3.1b, 3.1c, 3.2b y 3.2c. Esta diferencia se debe a que la longitud promedio de los dos tipos de dominios, así como sus respectivas distribuciones iniciales, dependen fuertemente de la magnetización inicial (ver Sec. 2.2.3). Recordemos que, para $T = 0$, la magnetización es una cantidad conservada, por lo que es de esperar que la diferencia entre las distribuciones se mantenga en el tiempo.

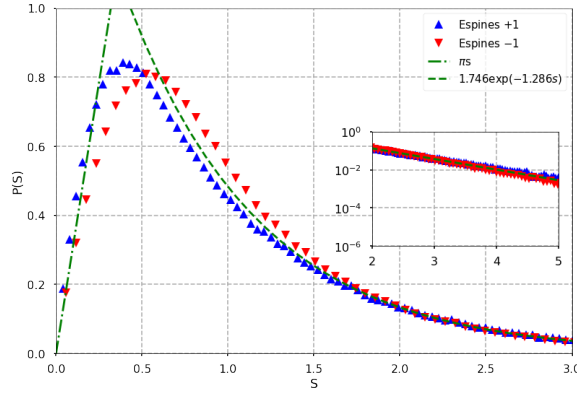
A pesar de que con ambos algoritmos de simulación se obtuvo la misma distribución, el algoritmo de Glauber para temperatura cero es más eficiente, pues el tiempo de simulación es mucho menor que el de kMC ($\sim 0.003s$ vs $\sim 1.4s$ por ciclo de tiempo). Simulado en un computador portátil con las siguientes especificaciones: procesador Intel Core i5-5200U, sistema operativo de 64 bits, RAM de 8GB DDR3, y una unidad SSD ADATA SU650 con capacidad de 480GB). Sin embargo, el algoritmo kMC no está restringido a temperatura cero [28, 29] y por lo tanto es más versátil, puesto que permite determinar el comportamiento de diferentes cantidades, tales como la densidad de paredes de dominio, la magnetización por partícula y la correlación de pares de espines como función de la temperatura

del sistema.

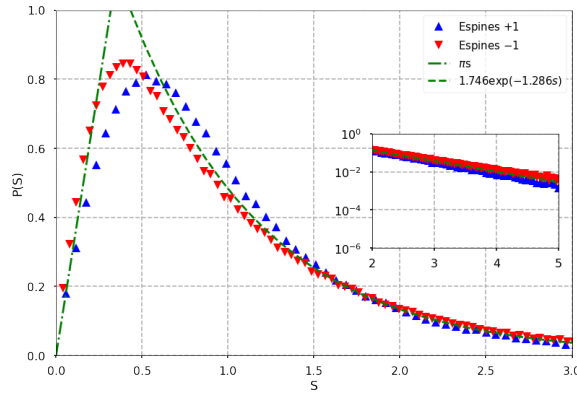
Para $T = 0$, la cola de la izquierda de P_n crece linealmente con el tamaño del dominio y la de la derecha decae exponencialmente. El comportamiento lineal sugiere la existencia de una fuerza de repulsión entrópica entre las paredes de un dominio, mientras que, el decaimiento exponencial se debe a la fuerza entrópica de atracción, debida a los demás dominios, que no permite que un dominio crezca indefinidamente. El recuadro en las Figs. 3.1 y 3.2 resalta el decaimiento exponencial de la cola derecha de la distribución. Tal y como lo muestra la gráfica de la distribución, la probabilidad de que



(a) Distribución de tamaños de dominios reescalada con $m(0) = 0$.



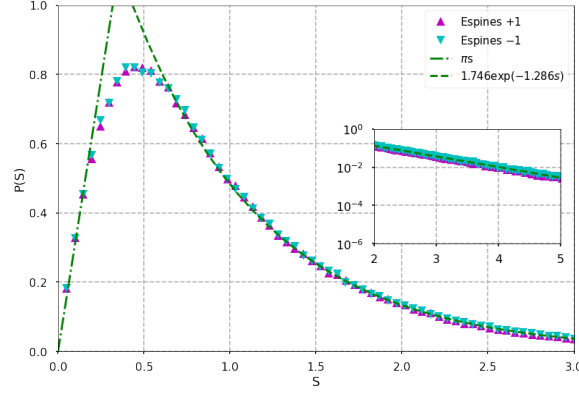
(b) Distribución de tamaños de dominios reescalada con $m(0) = 0.2$.



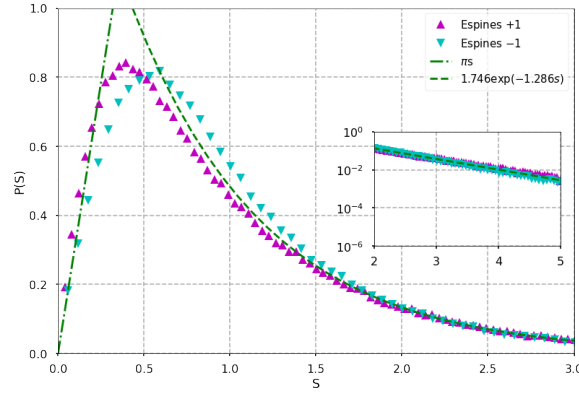
(c) Distribución de tamaños de dominios reescalada con $m(0) = -0.2$.

Figura 3.1: Distribución de tamaños de dominios reescalada. Se obtuvo usando el algoritmo de Glauber para $H = 0$, $T = 0$, $NPT = 35000$ y diferentes magnetizaciones iniciales, $m(0)$. El inset incluye la gráfica en escala logarítmica en el eje y , resaltando la cola de la exponencial.

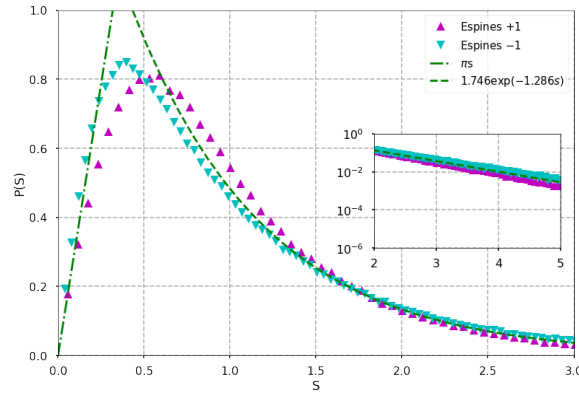
el sistema se ordene con una única orientación de espín es prácticamente cero, debido al hecho de que no hay ningún agente externo que rompa la simetría del sistema y privilegie una orientación particular de espín. Igualmente, la existencia de dominios de tamaño uno es prácticamente cero. Para $T = 0$, el proceso de formación de dominios de distintos tamaños ocurre preservando la magnetización inicial mientras el tamaño promedio de los dominios se incrementa. En particular para $m(0) = 0$, el sistema evoluciona de tal forma que, aunque la magnetización local es diferente de cero debido a la existencia de dominios, la magnetización global es nula.



(a) Distribución de tamaños de dominios reescalada con $m(0) = 0$.



(b) Distribución de tamaños de dominios reescalada con $m(0) = 0.2$.



(c) Distribución de tamaños de dominios reescalada con $m(0) = -0.2$.

Figura 3.2: Distribución de tamaños de dominios reescalada. Se obtuvo mediante el método kMC con $J = 1$, $H = 0$, $\beta = 5000$, $t = 34$ y diferentes magnetizaciones iniciales, $m(0)$. El inset incluye la gráfica en escala logarítmica en el eje y , resaltando la cola de la exponencial.

Los resultados encontrados para valores pequeños y grandes de s coinciden con los reportados en la Ref. [23] para Marcha Aleatoria con Aniquilación (ARW), representados por líneas discontinuas en las Figs. 3.1 y 3.2. En el régimen $T = 0$, $H = 0$ y $m(0) = 0$, la distribución reescalada P_s se comporta de acuerdo a [23]:

$$P_s \rightarrow \pi s \text{ para } s \rightarrow 0 \quad \text{y} \quad P_s \rightarrow c e^{-\alpha s} \text{ para } s \rightarrow \infty, \quad (3.1)$$

donde c y α han sido determinados numéricamente usando simulaciones computacionales extensas y un ajuste exponencial. En este trabajo se usan los valores $c = 1.746$ y $\alpha = 1.286$ reportados en la Ref. [23] para ARW. Este resultado es de esperar, puesto que el modelo 1-D de Ising-Glauber a temperatura y campo magnético cero es equivalente al de ARW. En la ARW las paredes de dominios equivalen a partículas que ejecutan marcha aleatoria y están sometidas a una reacción de aniquilación de pares cuando dos partículas se encuentran (ver Fig. 2.3).

Además de P_n , otra cantidad de interés es la densidad de paredes de dominio $\rho(t)$. Para el caso $T = 0$ y $m(0) = 0$, se realizaron simulaciones con $N = 1000$, $\beta = 5000$, un tiempo máximo de medida de $t = 34$, promediando sobre 10000 repeticiones. Para una magnetización inicial diferente de cero se trabajó con $N = 2000$ sitios de red. Por otro lado, la magnetización por partícula, $m(t)$, se calculó para $H = 0$ con $N = 500$, $\beta = 0.1$ y $\beta = 5000$, con un tiempo máximo de medida de $t = 7$. En esta ocasión solo se requirieron 1000 repeticiones para obtener una buena estadística. Los resultados obtenidos para las dos cantidades calculadas se muestran en las Figs. 3.3 y 3.4, respectivamente. En la Fig. 3.3 se observa que el comportamiento asintótico de la densidad de paredes de dominio coincide con el predicho en los resultados analíticos, Ecs. (2.50) y (2.51). Se puede notar, que aproximadamente a partir de $t = 3$ la densidad de dominios se comporta como $\sim (1 - m(0)^2)t^{-1/2}$. Para $T = 0$ la separación media de las paredes de dominio (el inverso de la densidad de paredes de dominio) aumenta y el sistema tiende a ordenarse debido a la formación de dominios. El hecho de que la separación media de las paredes de dominio aumente con el tiempo sugiere que los tamaños de los dominios, en promedio, aumentan progresivamente. Por su parte, en la Fig. 3.4 es claro que para $T = 0$ la magnetización se conserva, mientras que, para temperatura no nula la magnetización decae exponencialmente a cero sin importar la magnetización inicial, tal y como lo predice la Ec. (2.29). Para una temperatura finita las fluctuaciones térmicas desordenan el sistema, haciendo que $m(0) \rightarrow 0$ para $t \rightarrow \infty$. Vale la pena enfatizar que para $T = 0$, si bien, el sistema puede tener magnetización promedio nula, localmente no necesariamente es así, ya que se forman dominios. Esto se evidencia en las Figs. 3.1a y 3.2a.

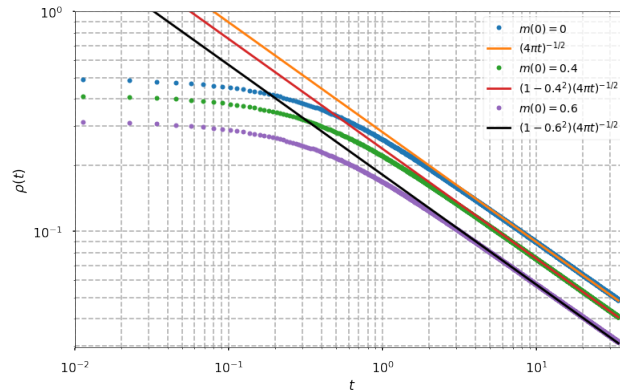


Figura 3.3: Se muestra la densidad de dominios en escala logarítmica para diferentes magnetizaciones iniciales, $m(0)$, obtenida con el método kMC con $H = 0$, $J = 1$, $\beta = 5000$ y $t = 34$; y las curvas correspondientes a las Ecs. (2.50) y (2.51).

Siguiendo lo mencionado en el párrafo anterior, es interesante mostrar la distribución de tamaños de dominios reescalada para distintos tiempos de evolución, como lo muestra la Fig. 3.5, donde se tomó $N = 1000$, $\beta = 5000$, $m(0) = 0$, y 20000 repeticiones. Se observa que a partir de $t = 5$ la distribución

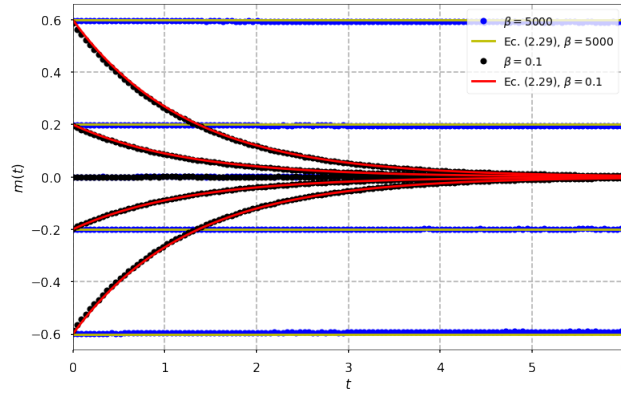


Figura 3.4: Magnetización por partícula partiendo de diferentes magnetizaciones iniciales, $m(0)$. Se midió usando kMC con $H = 0$, $J = 1$, $\beta = 5000$ y $\beta = 0.1$. También se muestran las curvas correspondientes a la Ec. (2.29) con los parámetros mencionados antes.

mantiene la misma forma, es decir, presenta escalamiento dinámico [5, 20]. Los tiempos en los cuales el sistema evoluciona sin cambiar la forma funcional de la distribución coinciden con la región donde la densidad de paredes de dominio decae asintóticamente como $\sim t^{-1/2}$, esto define el régimen de escalamiento del sistema. En el límite termodinámico el tamaño del sistema es infinito, por lo que para $T = 0$ el sistema evoluciona de tal forma que la distribución de tamaños de dominios mostrada en las Figs. 3.1a y 3.2a se mantiene durante toda la evolución. En contraste, para un sistema finito, los dominios se reducirán con el tiempo hasta alcanzar el estado de equilibrio, donde simplemente se tendrán dos dominios de espines $+1$ y -1 , de tamaños tales, que preserven la magnetización inicial.

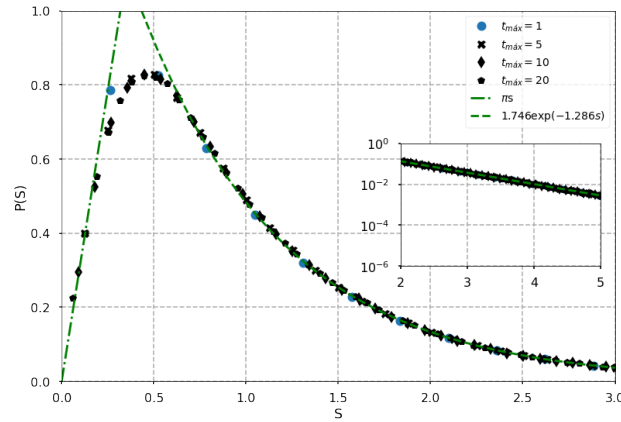


Figura 3.5: Distribución de tamaños de dominios reescalada para cuatro tiempos de evolución. Se obtuvo mediante el método kMC con $H = 0$, $J = 1$, $\beta = 5000$ y $m(0) = 0$. El inset incluye la gráfica en escala logarítmica en el eje y , resaltando la cola de la exponencial.

Ahora, que hemos obtenido numéricamente la distribución de tamaños de dominios a $T = 0$ usando dos algoritmos diferentes, y que sabemos que presenta escalamiento dinámico, vale la pena compararla con la solución numérica de la ecuación maestra de la distribución de tamaños de dominios dada por la Ec. (2.91). Esta ecuación se resolvió usando el método de Euler para $m(0) = 0$. Los resultados obtenidos para tres tiempos de evolución diferentes se muestran en la Fig. 3.6 por medio de líneas continuas. Se puede observar que, aunque la solución numérica presenta la misma forma, hay algunas discrepancias con los resultados de las simulaciones para $t > 6$. En particular, se observa un corrimiento del valor medio hacia la derecha conforme aumenta el tiempo. Esto se debe a que el error producido por la aproximación de intervalos independientes hecha para escribir la ecuación maestra se acumula en cada

paso de tiempo. A pesar de estas pequeñas discrepancias, se puede decir que todas las distribuciones presentan el mismo comportamiento: comportamiento lineal para dominios pequeños y decaimiento exponencial para dominios grandes (ver recuadro de la Fig. 3.6). Se puede concluir, además, que los procesos fundamentales considerados para escribir la ecuación maestra son relevantes durante todo el proceso de evolución del sistema.

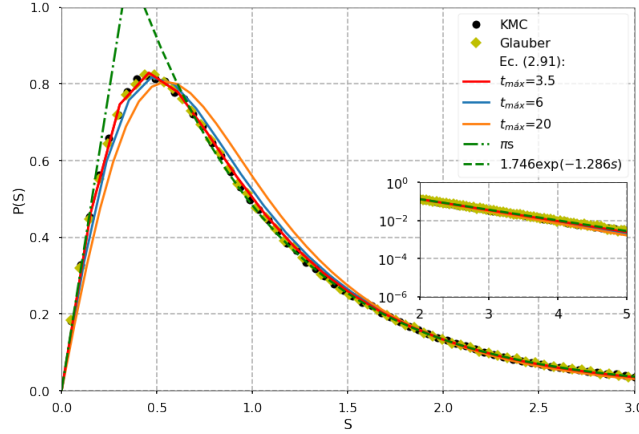


Figura 3.6: Se muestra la distribución de tamaños de dominios reescalada para $H = 0$ y $m(0) = 0$, obtenida mediante los métodos kMC con $J = 1$, $\beta = 5000$, $t = 34$ y Glauber $T = 0$; y la solución numérica de la Ec. (2.91) para diferentes tiempos de evolución. El inset incluye la gráfica en escala logarítmica en el eje y , resaltando la cola de la exponencial.

La Fig. 3.7 muestra la distribución de tamaños de dominios para una temperatura finita. Note que la fuerza de repulsión entrópica entre las paredes de un dominio desaparece, mientras que, el comportamiento exponencial de la cola derecha de la distribución se mantiene. Esto comprueba que la formación de dominios es una consecuencia de la ausencia de fluctuaciones térmicas a temperatura cero. Los resultados mostrados en la Fig. 3.7 se obtuvieron con $N = 1000$, $H = 0$, $\beta = 1.5$, $t = 34$, $m(0) = 0$, y 20000 repeticiones. Además, se compararon los resultados computacionales con la solución numérica de las Ecs. (2.87) y (2.88), obteniendo una buena coincidencia entre las distribuciones. Vale la pena aclarar que en el caso de temperatura finita y $H = 0$ el sistema evoluciona de tal forma que para tiempos grandes la magnetización es nula y el tamaño más probable de un dominio es $n = 1$ (ver Fig. 3.4). En este caso tanto la magnetización local como la global son nulas. Este es el estado de equilibrio del sistema.

Adicionalmente, para $H = 0$ se midió en el equilibrio la correlación de pares, $G(k)$, en función de la separación entre los espines, k . Se consideraron dos diferentes temperaturas y magnetizaciones iniciales. Para el desarrollo de las simulaciones con $\beta = 1$ se tomó $N = 200$, un tiempo máximo de medida de $t = 1100$ y 20000 repeticiones. Por su parte, para $\beta = 2$ se usó $N = 1000$, un tiempo máximo de medida de $t = 3300$ unidades y 5000 repeticiones. Los resultados obtenidos se muestran en la Fig. 3.8, donde los puntos representan los resultados numéricos mientras las líneas continuas los analíticos dados por la Ec. (2.41). Ambos conjuntos de resultados coinciden en todo el dominio de k considerado. El recuadro con el eje vertical en escala logarítmica resalta el decaimiento exponencial conforme la separación entre los espines aumenta. Como es de esperar, para un k dado, a medida que la temperatura aumenta (β disminuye) $G(k)$ disminuye, tal como lo predice la Ec. (2.41).

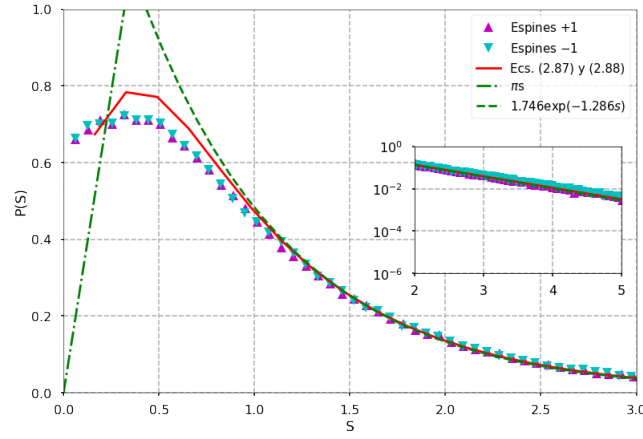


Figura 3.7: Distribución de tamaños de dominios reescalada. Se obtuvo mediante el método kMC con $J = 1$, $H = 0$, $\beta = 1.5$, $t = 34$ y $m(0) = 0$. También se muestra la solución numérica de las Ecs. (2.87) y (2.88). El inset incluye la gráfica en escala logarítmica en el eje y , resaltando la cola de la exponencial.

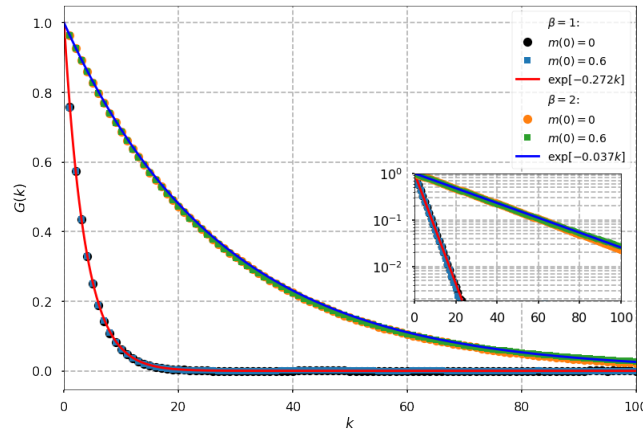


Figura 3.8: Correlación de pares de espines en el equilibrio en función de su separación. Se midió usando kMC con $H = 0$, $J = 1$, $\beta = 1$ y $\beta = 2$, y magnetización inicial $m(0) = 0$ y $m(0) = 0.6$. También se muestra la curva correspondiente a la Ec. (2.41) con los parámetros mencionados antes. El inset incluye la gráfica en escala logarítmica en el eje y .

3.2. Formación de dominios a temperatura cero en presencia de un campo magnético

Como se mostró en la Sec. 2.2.2, en presencia de un campo magnético el comportamiento del sistema varía dependiendo de la relación entre la magnitud del campo y la constante de acoplamiento entre los espines. Por esta razón, para $T = 0$ se usa la condición dada por la Ec. (2.60) en el algoritmo kMC, para determinar las tasas de transición del sistema, donde la tasa de transición es 1 si $\Delta E < 0$ y 0 si $\Delta E > 0$.

Una cantidad útil para estudiar el sistema dentro del régimen de campo fuerte ($H > 2J$) es el espín promedio S_i . Para su análisis se midió el promedio de espín en función del tiempo en tres sitios diferentes de la red, cada uno con un promedio inicial diferente. Se tomó $N = 1000$, $H = 3.5$, un tiempo máximo de medida de $t = 5$ y se promedió sobre 20000 repeticiones. Los resultados se muestran en la Fig. 3.9. Se observa que el espín promedio satisface la Ec. (2.63) y el sistema tiende rápidamente a orientarse en dirección del campo magnético.

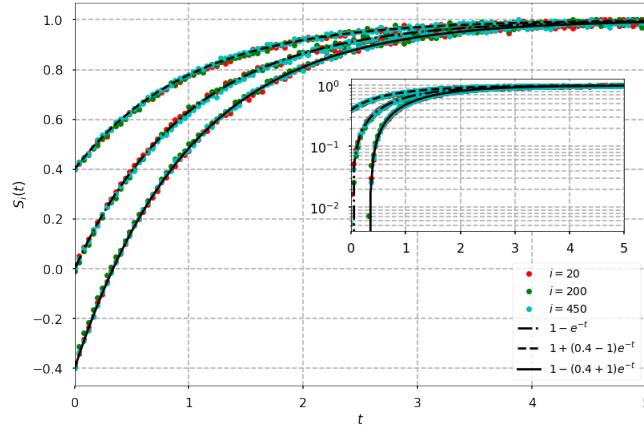
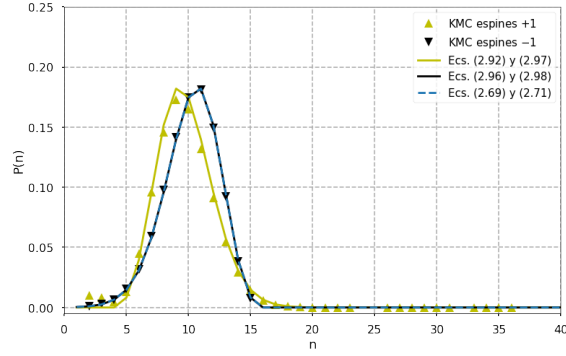
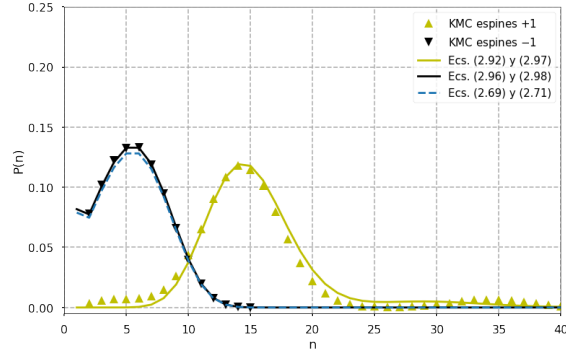


Figura 3.9: Espín promedio en el sitio i en función del tiempo, $S_i(t)$, para 3 sitios y promedios iniciales, $S_i(0)$, diferentes; obtenida usando el método kMC con $H = 3.5$, $J = 1$ y $T = 0$. También se muestra la curva correspondiente a la Ec. (2.63) con los parámetros mencionados antes. El inset incluye la gráfica en escala logarítmica en el eje y .

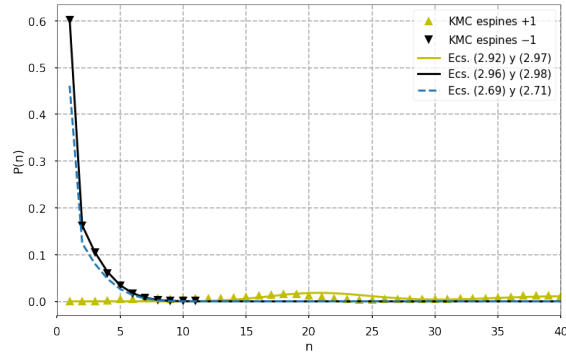
En cuanto al régimen de campo débil ($H < 2J$), para ilustrar las limitaciones de las Ecs. (2.69) y (2.71) reportadas en la Ref. [8], se estudia el sistema partiendo de dos condiciones iniciales distintas. Se propone una condición inicial donde todos los dominios de espines $+1$ y -1 tienen tamaño 5 y 15, respectivamente. Y otra condición inicial donde los tamaños corresponden a 1 y 9, respectivamente. Las distribuciones de tamaños de dominios de espines $+1$ y -1 se obtuvieron mediante el método kMC para tres tiempos de evolución diferentes, y se trabajó con $N = 500$ sitios de red, $H = 0.5$ y 20000 repeticiones. Adicionalmente, usando el método de Euler se resolvieron numéricamente las Ecs. (2.92), (2.96), (2.97) y (2.98), que consideran todos los procesos fundamentales en la formación de dominios. En este caso, las distribuciones de tamaños de dominios no se reescalaron. La Fig. 3.10 muestra los resultados para la primera condición inicial, donde se observa que las distribuciones obtenidas mediante la simulación coinciden con los resultados teóricos para los tres tiempos de evolución considerados. Además, la distribución de tamaños de dominios -1 está bien descrita por las Ecs. (2.69) y (2.71), es más, no se forman dominios de espines -1 de tamaño mayor al inicial. Por otro lado, para la segunda condición inicial, la Fig. 3.11 muestra una coincidencia entre los resultados computacionales y teóricos, sin embargo, la distribución de tamaños de dominios -1 no está apropiadamente descrita por las Ecs. (2.69) y (2.71). En este caso, se forman dominios de espines -1 de tamaño mayor al inicial, lo cual, muestra que la coalescencia de dominios para una condición inicial como la considerada no puede despreciarse, pero puede tenerse en cuenta usando una aproximación simple como la que se muestra en la Ec. (2.82). Como se había mencionado en la Sec. 2.2.2, las Ecs. (2.69) y (2.71) pierden su validez cuando se tienen condiciones iniciales en donde existen dominios de espines $+1$ de tamaño uno. Es por esto que en la Fig. 3.11 las Ecs. (2.69) y (2.71) no reproducen los diferentes máximos que se forman debido a la coalescencia de dominios.



(a) Distribución de tamaños de dominios con $t = 2.4$.

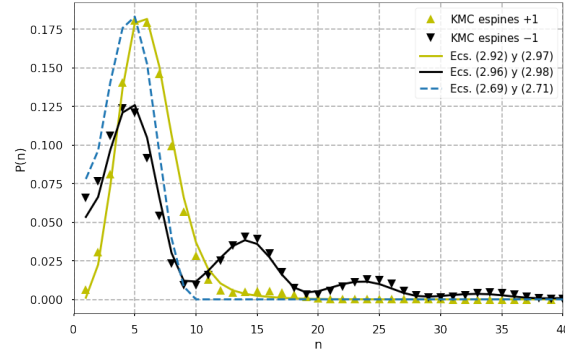


(b) Distribución de tamaños de dominios con $t = 5$.

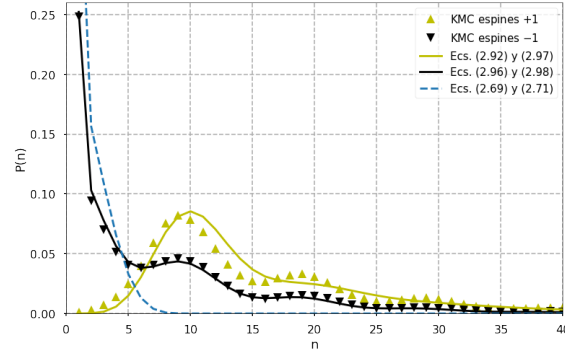


(c) Distribución de tamaños de dominios con $t = 10$.

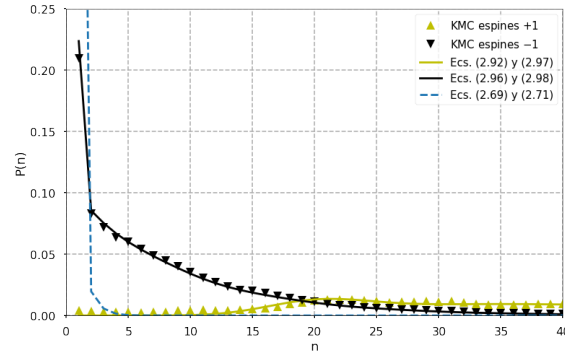
Figura 3.10: Se muestra la distribución de tamaños de dominios para la condición inicial $P_5^\uparrow(0) = 1$ y $P_{15}^\downarrow(0) = 1$, obtenida usando el método kMC para $H = 0.5$, $J = 1$ y $T = 0$; la solución numérica de las Ecs. (2.92), (2.96), (2.97), (2.98); y la curva correspondiente a las Ecs. (2.69) y (2.71).



(a) Distribución de tamaños de dominios con $t = 2.4$.



(b) Distribución de tamaños de dominios con $t = 5$.



(c) Distribución de tamaños de dominios con $t = 12$.

Figura 3.11: Se muestra la distribución de tamaños de dominios para la condición inicial $P_1^\uparrow(0) = 1$ y $P_9^\downarrow(0) = 1$, obtenida usando el método kMC para $H = 0.5$, $J = 1$ y $T = 0$; la solución numérica de las Ecs. (2.92), (2.96), (2.97), (2.98); y la curva correspondiente a las Ecs. (2.69) y (2.71).

4 Conclusiones

En este trabajo se presenta un estudio detallado de la cadena de espines Ising ferromagnética bajo la dinámica de Glauber para distintos valores de temperatura y campo magnético. En particular, se presta especial atención al proceso de formación de dominios. Primero se realizó un análisis del sistema en ausencia de campo magnético. En el caso particular de $T = 0$ se usaron dos algoritmos de simulación basados en el método de Monte Carlo cinético (kMC). Con ambos algoritmos de simulación se logró reproducir la distribución de tamaños de dominios reportada en la literatura (Figs. 3.1 y 3.2). Esto ejemplifica el hecho de que diferentes dinámicas pueden llevar al sistema al mismo estado estacionario o de equilibrio. Sin embargo, el algoritmo de Glauber es más eficiente, pues el tiempo de simulación es mucho menor que el de kMC. A pesar de esto, el método kMC permite determinar el comportamiento de diferentes cantidades físicas en función de la temperatura mientras que el de Glauber solo funciona para temperatura cero.

Para $T = 0$ y $H = 0$ la distribución de tamaños de dominios presenta un comportamiento lineal para dominios pequeños y un decaimiento exponencial para dominios grandes. El decaimiento exponencial permanece incluso a temperatura finita, mientras que el comportamiento lineal desaparece. Esto implica que la fuerza de repulsión entrópica entre las paredes de dominios solo está presente a $T = 0$ y que la formación de dominios es una consecuencia de esta condición. Otra particularidad del sistema a $T = 0$ es que evoluciona preservando la magnetización inicial. A temperatura finita la magnetización tiende a cero si $H = 0$, mientras que, tiende a uno si $H > 0$. Para $T = 0$ y $H = 0$ el sistema evoluciona formando dominios de forma que P_n presenta escalamiento dinámico. En este régimen la magnetización global es diferente de la local. Por su parte, para $T > 0$ y $H = 0$ las fluctuaciones térmicas dominan la evolución del sistema, y tanto la magnetización global como la local son semejantes.

En presencia de un campo magnético el comportamiento del sistema se divide en dos regímenes, dependiendo de la relación entre la magnitud del campo y la constante de acoplamiento entre los espines. Dentro del régimen de campo fuerte ($H > 2J$) el sistema tiende rápidamente a orientarse en dirección del campo magnético. En el régimen de campo débil ($H < 2J$), los dominios de espines -1 desaparecen sistemáticamente conforme el sistema evoluciona. Particularmente, el comportamiento del sistema durante su evolución depende de la condición inicial. Si se tiene una condición inicial donde $P_1^\uparrow \approx 0$, el proceso de coalescencia de dominios será despreciable. Por el contrario, si $P_1^\uparrow \neq 0$ la coalescencia de dominios tendrá un papel importante en la formación de dominios de espines -1 durante la evolución del sistema.

Las expresiones para la ecuación maestra de las distribuciones de dominios de espines $+1$ y -1 , Ecs. (2.83) a (2.86), son más generales que las reportadas en la literatura, puesto que permiten describir el sistema para valores arbitrarios de J , T y H . Esta es la contribución más grande de este trabajo puesto que generaliza las expresiones para $T = 0$ y $H = 0$ presentes en la literatura actual [8, 10, 15, 21]. La solución numérica de la ecuación maestra propuesta en este trabajo describe bien los resultados computacionales para todos los conjuntos de parámetros considerados. Esto implica que los procesos fundamentales envueltos en la formación de dominios son la difusión de paredes de dominio, la coalescencia y fragmentación de dominios. Estos procesos pueden o no estar presentes durante la evolución del sistema, dependiendo de la temperatura y campo magnético.

Las conclusiones mencionadas en los párrafos anteriores nos conducen a afirmar que la dinámica del

sistema hacia el estado estacionario y/o de equilibrio está determinada por la temperatura del sistema y la presencia de un campo magnético externo. De esta manera, un cambio en la orientación de un espín se produce por el intercambio de energía con un reservorio a temperatura T y la influencia de un campo magnético H . Sin embargo, un escenario más general es aquel en el cual el sistema está en contacto con varios reservorios a diferentes temperaturas. Un primer acercamiento es, entonces, estudiar la cadena de espines Ising en contacto con dos reservorios a temperaturas T_1 y T_2 [12, 19, 30]. Para ello, se divide el sistema en dos redes de espines, cada una a la temperatura correspondiente al reservorio con el cual intercambia energía. A cada red le corresponde una tasa de transición de Glauber. Además, es de esperar que exista un flujo de energía entre ellas, como resultado de la competencia de los reservorios por conducir al sistema hacia el equilibrio [19, 30]. Este es el siguiente paso en este estudio, usar las Ecs. (2.83) a (2.86) para describir P_n en un sistema de espines con dos temperaturas diferentes.

A Modelo de Ising

El modelo de Ising (o modelo de Ising-Lenz) es un modelo simple de gran interés académico, propuesto para estudiar el ferromagnetismo y las transiciones de fase [1, 3]. El modelo en una dimensión fue resuelto por Ernst Ising y luego extendido a dos dimensiones por Lars Onsager [2]. Hoy se sabe que el modelo de Ising y generalizaciones del mismo sirven para explicar una gran variedad de fenómenos [2, 3]. El modelo consiste de variables discretas que representan el espín de una partícula, el cual puede estar en uno de dos estados, $+1$ ($\uparrow$) o -1 ($\downarrow$). Los espines se arreglan en una red periódica, donde a cada uno se le permite interactuar con sus vecinos. Para dos espines en sitios de red adyacentes i, j la intensidad de la interacción se caracteriza por una constante $J_{i,j}$. Además, cada espín i de la red interactúa con un campo magnético externo H . De este modo, el hamiltoniano del sistema está dado por [1, 3, 9]

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad (\text{A.1})$$

donde la suma se hace sobre primeros vecinos $\langle i, j \rangle$. El signo negativo en cada término es usado por convención.

Las propiedades termodinámicas del modelo de Ising se pueden obtener a partir de la función de partición $Z_N(\beta) = \sum \exp(-\beta\mathcal{H})$, donde la suma es sobre todas las configuraciones de espín del sistema y $\beta = 1/(k_B T)$ [9, 12]. La probabilidad de una configuración está dada por la distribución de Boltzmann [12]

$$P(\mathcal{S}) = \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}(\mathcal{S}))}{Z_N(\beta)}, \quad (\text{A.2})$$

donde $\mathcal{S}$ denota cualquiera de los 2^N estados de los N espines del sistema. Los comportamientos dados por el modelo de Ising se pueden clasificar según el signo de la interacción:

$$\begin{aligned} J_{i,j} &> 0, \text{ interacción ferromagnética,} \\ J_{i,j} &< 0, \text{ interacción antiferromagnética.} \end{aligned}$$

Si la interacción es ferromagnética, dos espines vecinos tienden a orientarse en la misma dirección y su energía mutua es $-J_{i,j}$, lo que reduce la energía del sistema. Por el contrario, si la interacción es antiferromagnética, esta tiende a favorecer que los espines se orienten en direcciones opuestas.

Por otro lado, el espín en el sitio i interactúa con el campo externo de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} H &> 0, \text{ el espín tiende a alinearse en la dirección } +1, \\ H &< 0, \text{ el espín tiende a alinearse en la dirección } -1. \end{aligned}$$

Cuando el campo externo es cero, $H = 0$, el modelo de Ising es simétrico al cambiar el valor del espín en todos los sitios de la red; un campo distinto de cero rompe esta simetría. Una simplificación común es asumir que todos los primeros vecinos tienen la misma magnitud de interacción. Entonces, se puede establecer $J_{ij} = J$ para todos los pares $\langle i, j \rangle$.

A.1. Modelo de Ising en una dimensión

En una dimensión, el hamiltoniano Ising en presencia de un campo magnético externo toma la forma [9]

$$\mathcal{H} = -J \sum_i s_i s_{i+1} - \frac{1}{2} H \sum_i (s_i + s_{i+1}). \quad (\text{A.3})$$

Se considera una cadena con condiciones de contorno periódicas $s_{i+N} = s_i$. La función de partición canónica para este sistema se puede expresar como

$$Z_N(\beta) = \sum_{\{s_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\beta[J s_i s_{i+1} + \frac{1}{2} H (s_i + s_{i+1})]}, \quad (\text{A.4})$$

donde $\{s_i\}$ significa que la suma se aplica a todos los 2^N estados posibles del sistema. Introducimos la matriz de transferencia [3]

$$P = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+H)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

cuyos elementos matriciales correspondientes se definen como

$$P_{s_i s_j} = e^{\beta J s_i s_j + \frac{1}{2} \beta H (s_i + s_j)} \quad (\text{A.6})$$

$$= \vec{v}_i^T P \vec{v}_j \quad (\text{A.7})$$

donde $\vec{v}_i^T = (1 \ 0)$ o $(0 \ 1)$. De esta manera, la función de partición se puede escribir como

$$Z_N(\beta) = \sum_{\{\vec{v}_i\}} \prod_{i=1}^N \vec{v}_i^T P \vec{v}_{i+1} = \sum_{\{\vec{v}_i\}} \vec{v}_1^T P \vec{v}_1 = \text{Tr}(P^N). \quad (\text{A.8})$$

Diagonalizando la matriz de transferencia por medio de la transformación unitaria $P = U^{-1} D U$, donde D es una matriz diagonal cuyas componentes son los valores propios de P , la función de partición puede ser escrita como

$$\begin{aligned} Z_N(\beta) &= \text{Tr}(U^{-1} D^N U) \\ &= \text{Tr}(D^N) \\ &= \lambda_1^N + \lambda_2^N \\ &= \lambda_1^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right), \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

donde λ_1 y λ_2 son los valores propios de la matriz P . Usando la ecuación característica

$$\lambda^2 - \text{Tr}(P)\lambda + \det(P) = 0, \quad (\text{A.10})$$

se obtiene

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \left[\cosh(\beta H) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta H) + e^{-4\beta J}} \right], \quad (\text{A.11})$$

donde $\lambda_1 > \lambda_2$ para cualquier valor de H . En consecuencia, en el límite termodinámico se obtiene una función de partición de la forma

$$Z_N(\beta) = e^{N\beta J} \left[\cosh(\beta H) + \sqrt{\sinh^2(\beta H) + e^{-4\beta J}} \right]^N. \quad (\text{A.12})$$

Es importante destacar que la energía libre f y la magnetización m están dadas por

$$\begin{aligned} f(H, \beta) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[-\frac{k_B T}{N} \ln Z_N \right] = -k_B T \ln \lambda_1 \\ &= -J - k_B T \ln \left[\cosh(\beta H) + \sqrt{\sinh^2(\beta H) + e^{-4\beta J}} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

y

$$\begin{aligned} m(H, \beta) &= -\frac{\partial f}{\partial H} \\ &= \frac{\sinh(\beta H)}{\sqrt{\sinh^2(\beta H) + e^{-4\beta J}}}, \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

respectivamente. Dado que $\sinh(\beta H) \xrightarrow{\beta H \rightarrow 0} 0$, está claro que no se produce magnetización espontánea a temperatura finita en ausencia de un campo externo y el sistema no exhibe una transición de fase [1, 3, 9].

Se define la correlación de pares entre los espines i y j de acuerdo a [3]

$$G_r = \langle s_n s_{n+r} \rangle - \langle s_n \rangle \langle s_{n+r} \rangle. \quad (\text{A.15})$$

Usando el método de la matriz de transferencia se calcula $\langle s_n \rangle$, de forma que

$$\begin{aligned} \langle s_n \rangle &= \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{\substack{\{\vec{v}_i\} \\ \{s_n\}}} s_n \prod_{i=1}^N \vec{v}_i^T P \vec{v}_{i+1} \\ &= \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{\substack{\{\vec{v}_i\} \\ \{s_n\}}} s_n \vec{v}_1^T P \vec{v}_2 \cdots \vec{v}_{n-1}^T P \vec{v}_n \vec{v}_n^T P \vec{v}_{n+1} \cdots \vec{v}_N^T P \vec{v}_1 \\ &= \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{\substack{\{\vec{v}_i\} \\ \{s_n\}}} \vec{v}_n^T P \vec{v}_{n+1} \cdots \vec{v}_N^T P \vec{v}_1 \vec{v}_1^T P \vec{v}_2 \cdots \vec{v}_{n-1}^T P \vec{v}_n s_n \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Si se define la matriz S como

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.17})$$

la Ec. (A.16) toma la forma

$$\begin{aligned} \langle s_n \rangle &= \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{\{\vec{v}_i\}} \vec{v}_n^T P \vec{v}_{n+1} \cdots \vec{v}_N^T P \vec{v}_1 \vec{v}_1^T P \vec{v}_2 \cdots \vec{v}_{n-1}^T P S \vec{v}_n \\ &= \frac{1}{Z_N(\beta)} \text{Tr}(P^N S) \\ &= \frac{1}{Z_N(\beta)} \text{Tr}(U^{-1} P^N U S). \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Si $H = 0$ se obtiene

$$\langle s_n \rangle = \frac{1}{Z_N(\beta)} \text{Tr} \begin{pmatrix} 0 & \lambda_1^N \\ \lambda_2^N & 0 \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{A.19})$$

La ausencia del índice n en el lado derecho evidencia la invariancia traslacional del sistema.

Realizando un procedimiento análogo al anterior, se puede encontrar que $\langle s_n s_{n+r} \rangle$ satisface

$$\begin{aligned}
 \langle s_n s_{n+r} \rangle &= \frac{1}{Z_N(\beta)} \text{Tr}(P^{N-r} S P^r S) \\
 &= \frac{1}{Z_N(\beta)} \text{Tr}(U^{-1} D^{N-r} U S U^{-1} D^r U S) \\
 &= \frac{\lambda_1^{N-r} \lambda_2^r + \lambda_1^r \lambda_2^{N-r}}{\lambda_1^N + \lambda_2^N}.
 \end{aligned} \tag{A.20}$$

Al igual que antes, la ausencia del índice n se debe a la invariancia traslacional del sistema. Para $H = 0$ y en el límite termodinámico, la función de correlación de pares toma la forma

$$G_r = e^{-r/\xi}, \tag{A.21}$$

donde $\xi = [\ln(\coth(\beta J))]^{-1}$ es la longitud de correlación, la cual diverge únicamente en $T = 0$.

B Ecuación maestra y balance detallado

En ocasiones aparecen procesos en los cuales el intervalo de tiempo entre eventos puede variar de manera continua y aleatoria, pero la variable estocástica es discreta. Para tales procesos, se necesita obtener una ecuación diferencial para la dependencia temporal de la probabilidad $P_i(t)$ de que el sistema esté en el estado i en el tiempo t [1]. Si las transiciones entre estados constituyen un proceso Markoviano, el cambio en la probabilidad $P_i(t)$ depende solo de las probabilidades de transición del estado actual i a cualquier otro estado j , ω_{ij} , y de las probabilidades de transición al estado i desde cualquier otro estado j , ω_{ji} . Por lo tanto, la evolución temporal de tales procesos está gobernada por la ecuación maestra [1, 12, 14, 20, 21]

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \sum_{j \neq i} [P_j(t)\omega_{ji} - P_i(t)\omega_{ij}]. \quad (\text{B.1})$$

Desde un punto de vista matemático, la ecuación (B.1) es un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas.

Ahora, consideremos un sistema que satisface la condición

$$\sum_{j \neq i} P_i^* \omega_{ij} = \sum_{j \neq i} P_i^* \omega_{ji}, \quad (\text{B.2})$$

para todo i , donde $P_i^* \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} P_i(t)$ es la probabilidad estacionaria del sistema, la cual es independiente del tiempo. Un sistema que satisfaga (B.2) alcanza el estado estacionario. Teniendo en cuenta que el flujo $\mathcal{J}_{ij}$ del estado i al j cumple $\mathcal{J}_{ij} = P_i^* \omega_{ij}$, la ecuación (B.2) muestra que para un estado estacionario, el flujo total al estado i debe ser igual al flujo total fuera de ese estado.

Una restricción aún más fuerte es el balance detallado [8, 11, 12, 13], que requiere que el flujo entre dos estados cualesquiera se equilibre, $\mathcal{J}_{ij} = \mathcal{J}_{ji}$, para todo par ij , es decir,

$$P_i^* \omega_{ij} = P_j^* \omega_{ji}. \quad (\text{B.3})$$

Claramente, el balance detallado (B.3) garantiza que se cumpla la condición de estado estacionario (B.2), pero el estado estacionario no implica necesariamente un balance detallado.

C Métodos computacionales

C.1. Método de Monte Carlo Cinético (kMC)

El método de Monte Carlo cinético (kMC por sus siglas en inglés), es un método usado para simular la evolución temporal de algunos sistemas Markovianos donde los procesos ocurren con una tasa dada [28, 29]. Dichas tasas se consideran conocidas y, por lo tanto, son información de entrada para el algoritmo. Para el caso particular de la dinámica de Glauber, las tasas de transición del sistema están dadas por la Ec. (2.56). La temperatura del sistema se encuentra incluida en el parámetro β y la orientación inicial de cada espín se determina de forma aleatoria, donde cada estado (+1 o -1) tiene una cierta probabilidad de ser seleccionado. Esta probabilidad determina la magnetización inicial.

Para simular la evolución temporal del sistema, se fija el instante de tiempo inicial, se usa la tasa de transición determinada previamente para el sistema, y se crea una lista con todas las posibles tasas de transición ω_i , desde el estado i a otro posible estado. Mediante la generación de un número aleatorio r uniformemente distribuido entre 0 y 1, se determina el proceso que se llevará a cabo (Fig. C.1), siguiendo la condición

$$\Omega_{j-1} < r\Omega_N \leq \Omega_j, \quad (\text{C.1})$$

donde $\Omega_j = \sum_{l=1}^j \omega_l$, con $j = 1, \dots, N$ (N es el número total de transiciones). Se selecciona el proceso j para evolucionar el sistema. Después de que la transición ocurra, se genera un nuevo número aleatorio r' , y el tiempo se incrementa de acuerdo a $t = t + \Delta t$, donde $\Delta t = -\Omega_N^{-1} \ln r'$ corresponde al tiempo de escape asociado al estado en el que está el sistema. Por último, se recalculan las tasas ω_i para el nuevo estado del sistema y se repite el proceso. Cabe anotar que ocurre un solo proceso por paso de tiempo. El algoritmo se repite las veces necesarias hasta alcanzar el tiempo de simulación deseado $t_{\text{máx}}$ [28, 29, 31].

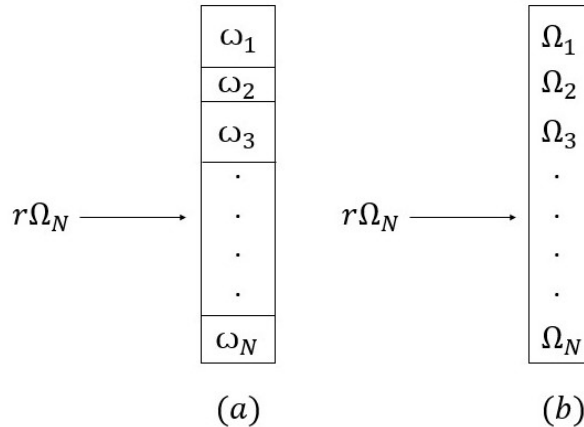


Figura C.1: Ilustración esquemática del procedimiento para seleccionar el proceso para hacer avanzar el sistema al siguiente estado en el algoritmo kMC. (a) Los objetos (recuadros), cada uno con una longitud proporcional a la tasa de transición, se colocan de extremo a extremo. Un número aleatorio r en $(0,1)$, multiplicado por Ω_N , apunta a una casilla con la probabilidad correcta. (b) Numéricamente esto se logra comparando $r\Omega_N$ con elementos en una matriz de sumas parciales. Tomado de la Ref. [29]

C.2. Algoritmo de Glauber a $T = 0$ y $H = 0$

En la dinámica de Glauber a temperatura y campo magnético externo cero, el equilibrio del sistema está dado por el mínimo de energía, puesto que no hay fluctuaciones térmicas ni un rompimiento de simetría debido a un campo magnético (Sec. 2.2.2). Cuando el campo magnético es nulo, los espines $+1$ y -1 tienen comportamientos equivalentes (Apéndice A). Por lo tanto, un espín elegido al azar cambia su orientación si esta produce una reducción en la energía, de lo contrario el espín no cambia su estado. Para simular el sistema se usa el Método de Monte Carlo Cinético descrito en la Sec. C.1, donde las tasas de transición que rigen la evolución del sistema se determinan teniendo en cuenta lo siguiente [25]: Si un espín tiene la misma orientación que la mayoría de sus vecinos, este no cambia su estado. Si por el contrario, el espín tiene orientación opuesta a la mayoría de sus vecinos, entonces, este cambia su estado. Finalmente, si no hay cambio en la energía al invertir la orientación del espín (en una dimensión, ocurre cuando sus vecinos tienen orientaciones opuestas), este se invierte con probabilidad $1/2$. Para simular la cadena de espines, cada valor de espín se orienta como se muestra en la Sec. C.1 y se almacena en un sitio de un arreglo de tamaño N . En cada paso de tiempo, se elige de forma aleatoria un espín del arreglo mediante la generación de un número aleatorio con distribución uniforme, y el espín elegido evoluciona de acuerdo a las reglas dinámicas descritas anteriormente. El número de pasos de tiempo NPT (ciclo de tiempo) debe ser suficientemente grande para que el sistema alcance el equilibrio.

C.3. Calculo computacional de la distribución de tamaños de dominios, la densidad de paredes de dominio y la magnetización por partícula

Para estudiar de manera computacional la formación de dominios dentro del modelo de Ising-Glauber, descrito en el Cap. 2, se utilizan los métodos de simulación descritos en las Secs. C.1 y C.2. Dentro de los cuales, se pueden calcular cantidades como la distribución de tamaños de dominios, y la densidad de paredes de dominio y magnetización por partícula en función del tiempo. Para ello, se recurre a las técnicas de cálculo descritas a continuación.

Para obtener la distribución de tamaños de dominios, se determinan los sitios del arreglo de espines que corresponden a paredes de dominio por cada ciclo de tiempo, usando la condición (2.33). Con estos datos, se calcula el tamaño de los dominios del sistema y las veces que se repite cada uno, para así, determinar la distribución.

Para calcular la densidad de paredes de dominio y la magnetización por partícula en función del tiempo se usa el método kMC, donde por cada paso de tiempo se mide el número de dominios del sistema, N_{dom} , y se calcula la suma de los valores de espín del arreglo, N_{mag} . Es conveniente asignar a cada tiempo (t) una casilla de un arreglo, $n = \text{int}(t/\Delta t)$ (int significa parte entera), para almacenar el número de dominios y la suma de los valores de espín por paso de tiempo, hasta alcanzar el tiempo de medida deseado. Esto es, $N_{\text{dom}}(n) = N_{\text{dom}}(n) + N_{\text{dom}}$ y $N_{\text{mag}}(n) = N_{\text{mag}}(n) + N_{\text{mag}}$, donde $N_{\text{dom}}(n)$ y $N_{\text{mag}}(n)$ son arreglos que almacenan los datos obtenidos. Como el tiempo no es lineal, no todos los bins de tiempo se miden un número igual de veces. Esto se soluciona usando un número auxiliar, tal que, cada vez que se mide N_{dom} y N_{mag} se calcula el número de medida para el bin asociado. Esto es, $N_{\text{aux}}(n) = N_{\text{aux}}(n) + 1$, donde $N_{\text{aux}}(n)$ es un arreglo que almacena los datos obtenidos. Finalmente, la densidad de paredes de dominio y la magnetización por partícula en función del tiempo se calculan haciendo un bucle de $i = 0$ a $i = \text{NPT}$ (número de pasos de tiempo), y tomando el tiempo, la densidad, y la magnetización, como $i\Delta t$, $N_{\text{dom}}(i)/(N_{\text{aux}}(i) \times N)$, y $N_{\text{mag}}(i)/(N_{\text{aux}}(i) \times N)$, respectivamente.

Bibliografía

- [1] L. E. Reichl. *A modern course in statistical physics; 2nd ed.* John Wiley & Sons, 1998.
- [2] Andrea Taroni. “90 years of the Ising model”. En: *Nature Physics* 11 (2015), pág. 997. DOI: 10.1038/nphys3595. URL: <https://doi.org/10.1038/nphys3595>.
- [3] Rodney J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. 1982.
- [4] Pablo A. Alemany y Daniel ben-Avraham. “Inter-particle distribution functions for one-species diffusion-limited annihilation, $A + A \rightarrow 0$ ”. En: *Physics Letters A* 206.1-2 (oct. de 1995), págs. 18-25. ISSN: 0375-9601. DOI: 10.1016/0375-9601(95)00625-d. URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601\(95\)00625-D](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601(95)00625-D).
- [5] Stephen J. Cornell y Alan J. Bray. “Domain growth in a one-dimensional driven diffusive system”. En: *Phys. Rev. E* 54 (2 ago. de 1996), págs. 1153-1160. DOI: 10.1103/PhysRevE.54.1153. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.54.1153>.
- [6] Diego Luis González y Gabriel Téllez. “Statistical behavior of domain systems”. En: *Phys. Rev. E* 76 (1 jul. de 2007), pág. 011126. DOI: 10.1103/PhysRevE.76.011126. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.76.011126>.
- [7] Diego Luis González y Gabriel Téllez. “Wigner Surmise for Domain Systems”. En: *Journal of Statistical Physics* 132.1 (abr. de 2008), págs. 187-205. ISSN: 1572-9613. DOI: 10.1007/s10955-008-9548-5. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s10955-008-9548-5>.
- [8] Pavel L. Krapivsky, Sidney Redner y Eli Ben-Naim. *A Kinetic View of Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2010, págs. 233-274. DOI: 10.1017/CB09780511780516.
- [9] Wenlong Wang, Rogelio Díaz-Méndez y Raudys Capdevila. “Solving the one-dimensional Ising chain via mathematical induction: an intuitive approach to the transfer matrix”. En: 40.6 (sep. de 2019), pág. 065102. DOI: 10.1088/1361-6404/ab330c. URL: <https://doi.org/10.1088/1361-6404/ab330c>.
- [10] P. L. Krapivsky y E. Ben-Naim. “Domain statistics in coarsening systems”. En: *Physical Review E* 56.4 (oct. de 1997), págs. 3788-3798. ISSN: 1095-3787. DOI: 10.1103/physreve.56.3788. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.56.3788>.
- [11] M. D. Grynberg. “Low-temperature Glauber dynamics under weak competing interactions”. En: *Phys. Rev. E* 91 (3 mar. de 2015), pág. 032129. DOI: 10.1103/PhysRevE.91.032129. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.91.032129>.
- [12] Nicholas J. Borchers. *Non-equilibrium Statistical Mechanics of a Two-temperature Ising Ring With Conserved Dynamics*. 2015.
- [13] R Augusiak et al. “Quantum kinetic Ising models”. En: *New Journal of Physics* 12.2 (feb. de 2010), pág. 025021. DOI: 10.1088/1367-2630/12/2/025021. URL: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/2/025021>.
- [14] Z. R. Yang. “Glauber dynamics of the kinetic Ising model”. En: *Phys. Rev. B* 46 (18 nov. de 1992), págs. 11578-11584. DOI: 10.1103/PhysRevB.46.11578. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.46.11578>.
- [15] A. Baumgärtner y K. Binder. “Dynamics of the generalized Glauber-Ising chain in a magnetic field”. En: *Journal of Statistical Physics* 18 (1978), págs. 423-444. ISSN: 1572-9613. DOI: 10.1007/BF01014516. URL: <https://doi.org/10.1007/BF01014516>.

- [16] M Hoyuelos, H O Martin y E V Albano. “Study of the steady state of a two-species annihilation process with separated reactants”. En: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 28.18 (sep. de 1995), págs. L483-L489. DOI: 10.1088/0305-4470/28/18/002. URL: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/28/18/002>.
- [17] Claude Godrèche, Florent Krzakala y Federico Ricci-Tersenghi. “Non-equilibrium critical dynamics of the ferromagnetic Ising model with Kawasaki dynamics”. En: *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2004.04 (mayo de 2004), P04007. DOI: 10.1088/1742-5468/2004/04/p04007. URL: <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2004/04/p04007>.
- [18] Simone Artz y Steffen Trimper. “Competing Glauber and Kawasaki Dynamics”. En: *International Journal of Modern Physics B* 12.23 (sep. de 1998), págs. 2385-2392. DOI: 10.1142/s0217979298001393. URL: <https://doi.org/10.1142/s0217979298001393>.
- [19] Z. Rácz y R. K. P. Zia. “Two-temperature kinetic Ising model in one dimension: Steady-state correlations in terms of energy and energy flux”. En: *Phys. Rev. E* 49 (1 ene. de 1994), págs. 139-144. DOI: 10.1103/PhysRevE.49.139. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.49.139>.
- [20] John Cardy. *Field Theory and Nonequilibrium Statistical Mechanics*. 1999.
- [21] M.A. Aliev. “Exact solution for the generating function of correlators of the kinetic Glauber-Ising model”. En: *Physics Letters A* 241.1 (1998), págs. 19-27. ISSN: 0375-9601. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(98\)00104-2](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(98)00104-2). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960198001042>.
- [22] Milton Abramowitz, Irene A. Stegun y Robert H. Romer. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Vol. 56. 10. 1988. DOI: 10.1119/1.15378. eprint: <https://doi.org/10.1119/1.15378>. URL: <https://doi.org/10.1119/1.15378>.
- [23] M Müller y W Paul. “The Annihilating Random Walk as a Model for Domain Growth in One Dimension”. En: *Europhysics Letters (EPL)* 25.2 (ene. de 1994), págs. 79-85. DOI: 10.1209/0295-5075/25/2/001. URL: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/25/2/001>.
- [24] D Balding, P Clifford y NJB Green. “Invasion processes and binary annihilation in one dimension”. En: *Physics Letters A* 126.8-9 (1988), págs. 481-483.
- [25] Unjong Yu. “Fate of Ising ferromagnets and antiferromagnets by zero-temperature Glauber dynamics on the two-dimensional Archimedean and 2-uniform lattices”. En: *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2017.12 (dic. de 2017), pág. 123203. ISSN: 1742-5468. DOI: 10.1088/1742-5468/aa9a56. URL: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/aa9a56>.
- [26] A Prados y J Javier Brey. “Analytical solution of a one-dimensional Ising model with zero-temperature dynamics”. En: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 34.33 (ago. de 2001), págs. L453-L459. DOI: 10.1088/0305-4470/34/33/103. URL: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/34/33/103>.
- [27] A Lefèvre y D S Dean. “Tapping thermodynamics of the one-dimensional Ising model”. En: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 34.14 (mar. de 2001), págs. L213-L220. DOI: 10.1088/0305-4470/34/14/101. URL: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/34/14/101>.
- [28] Mie Andersen, Chiara Panosetti y Karsten Reuter. “A Practical Guide to Surface Kinetic Monte Carlo Simulations”. En: *Frontiers in Chemistry* 7 (2019), pág. 202. ISSN: 2296-2646. DOI: 10.3389/fchem.2019.00202. URL: <https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fchem.2019.00202>.
- [29] Arthur F. Voter. “INTRODUCTION TO THE KINETIC MONTE CARLO METHOD”. En: *Radiation Effects in Solids*. Ed. por Kurt E. Sickafus, Eugene A. Kotomin y Blas P. Uberuaga. Dordrecht: Springer Netherlands, 2007, págs. 1-23. ISBN: 978-1-4020-5295-8.

- [30] F Cornu y H J Hilhorst. “Glauber’s Ising chain between two thermostats”. En: *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2017.4 (abr. de 2017), pág. 043207. DOI: 10 . 1088/1742-5468/aa64f2. URL: <https://doi.org/10.1088/1742-5468/aa64f2>.
- [31] Daan Frenkel. *Monte Carlo simulations and molecular dynamics*. Ene. de 2007.