

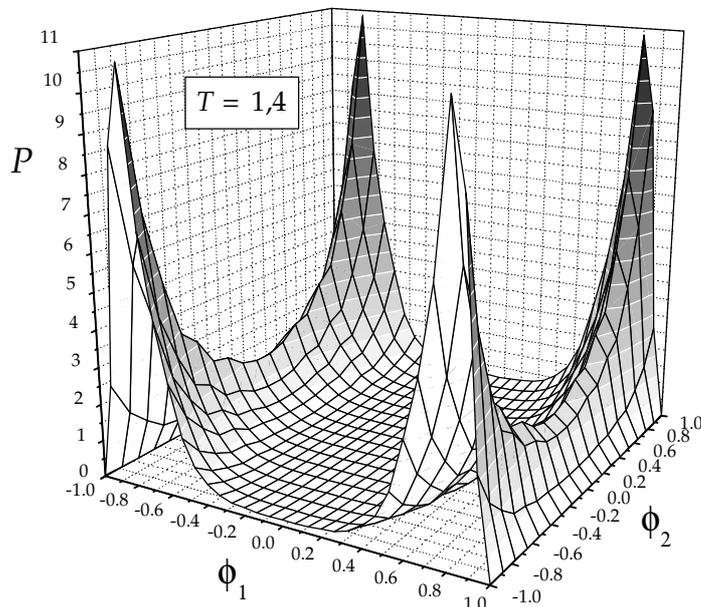


Universidad Nacional de San Luis

Facultada de Ciencias Físico-Matemáticas y Naturales

Departamento de Física

Redes de Ising con enlaces mixtos $\pm J$: estudio de las propiedades termodinámicas mediante simulación de Monte Carlo



Maestrando: Lic. Federico José Romá
Asesor científico: Dr. Antonio José Ramirez
Co-asesor científico: Dr. Felix Daniel Nieto

San Luis
2004

A Moira

..... Al mediodía habíamos llegado. Levanté la cabeza y vi el orificio superior del cono, en el cual se encuadraba un trozo de cielo enmarcado en una circunferencia singularmente reducida pero casi perfecta. Solamente en un punto se destacaba el pico del Scartaris, que se hundía en la inmensidad.

En el fondo del cráter se abrían tres chimeneas por las que, en tiempos de las erupciones del Sneffels, el foco central dejaba escapar sus lavas y vapores. Cada chimenea tenía alrededor de cien pies de diámetro. Estaban allí, abiertas bajo nuestros pies. No tuve valor para hundir en ellas mis miradas. El profesor Lidenbrock había hecho un examen rápido de su disposición; estaba jadeante; corría de una a otra, gesticulando y lanzando palabras incomprensibles. Hans y sus compañeros, sentados en trozos de lava, lo miraban; evidentemente lo tomaban por loco.

De pronto mi tío lanzó un grito. Creí que acababa de perder pie y de caer en una de las simas. Pero no. Lo vi con los brazos extendidos, las piernas abiertas, de pie ante una roca de granito colocada en el centro del cráter, como un enorme pedestal hecho para la estatua de un Plutón. Estaba en una postura de hombre estupefacto, pero cuya estupefacción dio paso bien pronto a una alegría insensata.

- ¡Axel, Axel! - gritó -. ¡Ven, ven!

Audí. Ni Hans ni los islandeses se movieron.

- Mira - me dijo el profesor.

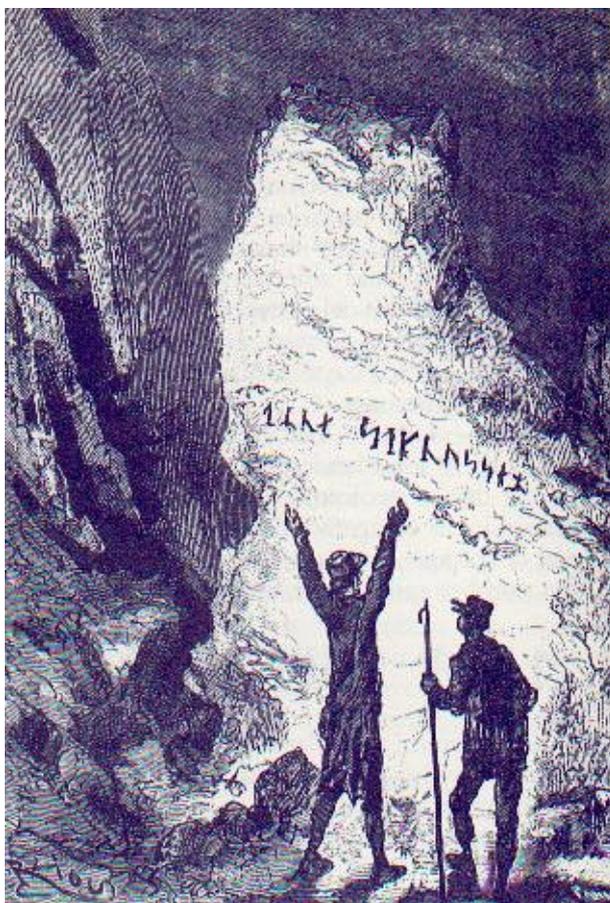
Y compartiendo su estupefacción, si no su alegría, leí en la cara occidental del bloque, en caracteres rúnicos medio roídos por el tiempo, ese nombre mil veces maldito:

𐌹𐌺𐌹𐌺 𐌶𐌿𐌿𐌸𐌹𐌺𐌹𐌺

- ¡Arne Sak nussemm! - exclamó mi tío -. ¿Aún dudas?.

No respondí, y volví consternado a mi banco de lava. La evidencia me aplastaba.....

(Julio Verne, *Viaje al centro de la tierra*, París 1864)



Agradecimientos

Quisiera decirle a *Moira* que la amo y agradecerle mil cosas. Entre ellas, su tolerancia y predisposición hacia mí, su firme decisión de no dejar zozobrar nuestro barco en este mar tormentoso que es la vida y su valentía, en los momentos en los que hay que ser valiente.

A mi familia, *Antonia, Carlos, María Celeste, María Eugenia, Marcelo, María Victoria, José, Federico, José Antonio, Evelina, Lucía, Rocío, Tano, Gabriela, Gabriel, Manuel y Daniel*, y a mi nueva familia, *Alejandro, Cristina, Sebastián, Jimena, Alejo, Lautaro, Martha, Carlos y Carmen*, quisiera agradecerles por su apoyo incondicional, aún cuando soy tan poco atento y cariñoso.

A *Pepe y Felix*, mis directores y amigos, por no dejar de alentarme siempre y por permitirme explorar mis ocurrencias más absurdas. Al lado de ellos, no he dejado ni un solo día de crecer como investigador.

A *Eugenio*, por depositarme toda su confianza y por apoyar innumerables veces mi formación científica.

Al *Núcleo Milenio de Física de la Materia Condensada*, por el apoyo financiero que me ha dado estos últimos años, el cual ha sido vital para la concreción de este trabajo.

A *Angélica, Eugenio, Olga, Sergio, Jaime, Julio, Walter y Margot*, por su hospitalidad durante mis estadías en Temuco.

A mis *compañeros y amigos* del Departamento de Física y del Laboratorio de Ciencias de Superficies y Medios Porosos por, entre otras cosas, alegrarme la vida.

A mis más fieles seguidores, *Inti, Margarita y Clementina*.

Y a la Universidad Nacional de San Luis, por permitirme acceder a una educación libre y gratuita, aún en estos tiempos tan difíciles.

De entre los pocos recuerdos que me quedan de mi niñez, mi pobre memoria guarda caprichosamente esa página escrita por *Verne*. Luego de más de 20 años sin verla, acudí a ella para ilustrar el comienzo de este trabajo. Inevitablemente, el tiempo al fin pudo doblegar aquella facilidad e ingenuidad de creer sinceramente que, aunque remota, existe la posibilidad de encontrar la entrada que conduce al centro de la tierra. La vida se empeña en convencernos de que, por pura lógica, los pensamientos posiblemente ingenuos nos llevan siempre a callejones sin salida, para terminar luego encerrados en los recintos marginales de nuestra memoria. Pero en el fondo de ese texto hay algo más. Probablemente sólo exprese el heroico momento del descubrimiento. O quizás, la esencia misma que nos impulsa a explorar lo desconocido. Cuando hayamos agotado todos los caminos, la cruel realidad proclamará vencedora a la terrible *imposibilidad*. Entonces, tarde o temprano, a pesar de estar reclusa y dormida, nuestra imaginación reaparecerá intacta, acudiendo puntual a la cita con la verdad. Habremos emprendido una vez más, nuestro propio viaje al centro de la tierra.

Índice

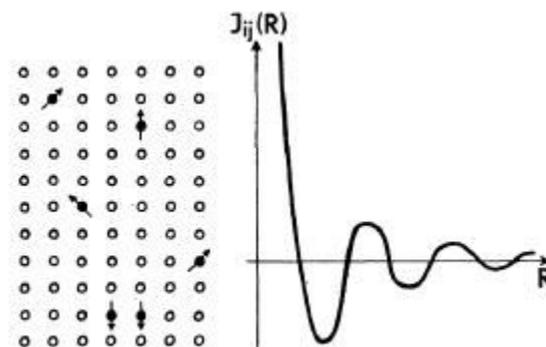
	Página
Introducción	1
Capítulo 1: Sistemas desordenados	5
1.1 Sistemas desordenados	5
1.2 Ergodicidad	9
1.3 El modelo de Edwards y Anderson $\pm J$	13
Capítulo 2: Propiedades termodinámicas del nivel fundamental	18
2.1 El método de integración termodinámica	18
2.2 Simulación de Monte Carlo	21
2.3 Técnica de aproximación trapezoidal y errores numéricos	23
2.4 Energía y entropía del estado fundamental	25
Capítulo 3: Estudio topológico del nivel fundamental	32
3.1 La red diluida y la red rígida de enlaces	32
3.2 El método de exploración dirigida del nivel fundamental	35
3.3 Análisis topológico de la red diluida y la red rígida de enlaces	38
Capítulo 4: Comportamiento crítico del modelo de Edwards y Anderson $\pm J$	47
4.1 La fase termodinámica a $T = 0$	47
4.2 El parámetro de orden	48
4.3 Estudio de la transición ferromagnética a bajas concentraciones	56
4.4 Análisis del comportamiento crítico a $x = 0,5$	62
Conclusiones y perspectivas futuras	68
Referencias	70
Nomenclatura	73

Introducción

Los *vidrios de espín* (SG) son sistemas magnéticos en los cuales las interacciones entre los momentos magnéticos están en *conflicto* unas con otras [Binder and Young 1986; Mezard, Parisi and Virasoro 1987]. Esto significa que, como consecuencia del desorden en la estructura del material, no es posible establecer un orden ferromagnético o antiferromagnético de largo alcance. En su lugar, al disminuir la temperatura, el sistema experimenta una transición de *congelado* (freezing) que lo lleva a una supuesta fase en la que los momentos magnéticos se encuentran orientados aparentemente al azar y en la que el orden de largo alcance no es evidente.

Entre los sistemas experimentales que exhiben un comportamiento tipo SG, se encuentran las aleaciones formadas por metales nobles (Au, Ag, Cu, Pt) levemente diluidos con iones de Fe o Mn: CuMn, AuFe, PtMn y AgMn. Clásicamente, se supone que la estructura de estos materiales está constituida por iones magnéticos (que poseen un momento magnético de espín) distribuidos en forma aleatoria en una matriz no magnética. Debido a que la dilución es muy pequeña (por ejemplo en CuMn hay un estado SG cuando Mn está presente en un 0,9 %), la distancia de separación promedio entre los iones es de varias constantes de red. Como consecuencia de ello, el solapamiento entre las distribuciones de carga de los iones y, por ende, la interacción de intercambio (la cual es responsable de un estado ferromagnético en el Fe) entre los espines, son despreciables. Erróneamente, se podría pensar que los espines se encuentran prácticamente aislados. Esto es aproximadamente correcto a una temperatura suficientemente alta en relación a T_f , la temperatura de freezing o congelado (del orden de 9 K en CuMn con Mn 0,94 %), para la cual un SG se comporta como un paramagneto. Sin embargo, por debajo de T_f , existe un estado SG en el cual se observa que los momentos magnéticos *mantienen una orientación aleatoria* durante el lapso de tiempo de experimentación. Evidentemente, a bajas temperaturas debe prevalecer algún tipo de interacción entre los iones magnéticos.

En un metal no ferromagnético como el cobre o la plata, la contribución de los electrones de conducción a la magnetización del material es muy pequeña e independiente de la temperatura [Kittel 1976]. En sólidos como el SG CuMn, existe una *interacción de intercambio directa* entre los átomos de manganeso y los electrones de conducción del cobre que se encuentran en su entorno, ya que hay un solapamiento importante en las densidades de carga. Esto origina una perturbación en la magnetización de los electrones de conducción que es percibida por el resto de los átomos de manganeso, originando una *interacción de intercambio indirecta* conocida como RKKY (Ruderman, Kittel, Kasuya y Yosida) [Ruderman and Kittel 1954; Kasuya 1956; K. Yosida 1957]. La figura 1, muestra un esquema de un sistema de espines distribuidos al azar sobre un red cristalina y la interacción de intercambio RKKY como función de la distancia de separación R .



Dibujo esquemático de momentos magnéticos distribuidos al azar sobre una red cristalina, y la interacción RKKY como función de la distancia de separación [Binder and Young 1986].

Observemos en la figura anterior que, la interacción RKKY predice que el acoplamiento entre los momentos magnéticos puede ser tanto ferromagnético (F) como antiferromagnético (AF), de acuerdo a la distancia de separación (en la figura 1, un valor positivo de J_{ij} indica una interacción F y uno negativo AF). A pesar de que el modelo RKKY es muy idealizado, se ha comprobado experimentalmente [Morgownik and Mydosh 1983] que al menos predice cualitativamente el comportamiento oscilante de la interacción de intercambio indirecta. De ahora en más, consideraremos únicamente los términos del hamiltoniano relacionados con la interacción RKKY. Debido a que las interacciones de intercambio indirectas o *enlaces* entre los momentos magnéticos de espín pueden ser F o AF, el SG adquiere una característica singular que se denomina *frustración de los enlaces*: en cada uno de los estados accesibles del sistema no es posible satisfacer simultáneamente todas las interacciones. Es decir, no existen configuraciones que permitan, a la vez, mantener una alineación paralela entre los espines acoplados ferromagnéticamente y antiparalela entre aquellos acoplados antiferromagnéticamente. Como consecuencia directa de la frustración de los enlaces y del desorden en la estructura del material (existen muchas formas de distribuir las impurezas magnéticas), el espacio fase del sistema adquiere una gran complejidad. Esto origina diversos interrogantes:

- Formalmente, ¿cómo debe efectuarse un estudio de mecánica estadística de un sistema con un número muy grande de variables que describen el desorden?
- Recordemos que por debajo de T_f se observa un estado de congelado. ¿Esto se origina como consecuencia del quiebre en la ergodicidad del sistema, o simplemente los tiempos de relajación son extremadamente grandes?
- De existir una ruptura en la ergodicidad, ¿cuál es el parámetro de orden adecuado que describe la transición de fase asociada?

Con el objeto de abordar el problema, a lo largo de varias décadas se han diseñado una multitud de modelos teóricos de SG [Binder and Young 1986]. En este trabajo, hemos estudiado un modelo con interacciones de corto alcance que originalmente fue propuesto por Toulouse [Toulouse 1977], como una versión simplificada del modelo gaussiano de Edwards y Anderson [Edwards and Anderson 1975]. Lo llamaremos modelo de Edwards y Anderson $\pm J$ (EA). El hamiltoniano del sistema es de tipo Ising [Ising 1925] y las interacciones entre los espines pueden ser ferromagnéticas ($-J$) o antiferromagnéticas ($+J$), pero siempre de la misma intensidad ($|\pm J| = \text{cte.}$). En este trabajo estudiaremos en detalle algunas de las características más sobresalientes del modelo EA.

En el capítulo 1, nos detendremos a analizar brevemente los problemas que surgen al trabajar con sistemas desordenados como los SG. Veremos que, en general, deben tomarse ciertos recaudos al momento de realizar un promedio en el desorden de un dado observable ya que, al tomar el límite termodinámico, el valor calculado puede incorporar un error sistemático. También, como introducción al capítulo 4 en el que estudiaremos el comportamiento crítico del modelo de EA, dedicaremos especial atención a la descripción de los sistemas que experimentan una transición de fase, con la consecuente ruptura en su ergodicidad.

La posibilidad de que exista de una transición de fase, ha obligado a los investigadores a buscar un orden de largo alcance en el sistema, que permita describir la fase SG. Parte de los esfuerzos se han localizado en el estado fundamental (GM). Al igual que en otros modelos, en el de EA la frustración y el desorden dan vida a un GM altamente degenerado, con una entropía configuracional por espín diferente de cero incluso en el límite termodinámico. En apariencia, esta característica impide establecer algún tipo de orden de largo alcance. Es por ello que, frecuentemente, se hace referencia a que el sistema podría experimentar una transición de fase a un estado con un *nuevo tipo de orden* que aún no ha sido debidamente caracterizado.

Se han realizado numerosos estudios topológicos del GM con el objeto de aclarar este interrogante. Entre ellos, los cálculos de la energía y la entropía del estado fundamental que son supuestamente los más sencillos de realizar, representan grandes desafíos a la hora de diseñar algoritmos computacionales. En el capítulo 2 veremos que, sólo es posible contar numéricamente los estados accesibles del GM (y por lo tanto, calcular su entropía) para pequeños tamaños de red. Esto se debe a que la degeneración se incrementa exponencialmente con el número de espines del sistema. Para realizar cálculos a tamaños mayores (y de esta forma determinar mejor el límite termodinámico), se puede emplear simulación de Monte Carlo para evaluar la entropía configuracional, usando el *método de integración termodinámica*. En el pasado, el método fue usado por S. Kirkpatrick en el modelo de EA precisamente con este fin [Kirkpatrick 1977]. Con el tiempo, se fueron diseñando nuevos métodos y algoritmos de cálculo, que permitieron comprobar que el resultado obtenido por Kirkpatrick era erróneo. Probablemente, esto se debió al excesivo tamaño de red usado (80×80 espines) y al pequeño tiempo de observación empleado en la simulación (con respecto al tiempo de relajación del sistema). En este trabajo hemos investigado las limitaciones del método de integración termodinámica. Debido en parte al avance logrado en las computadoras digitales, hoy es posible usar dicho método para realizar cálculos precisos de la entropía del GM para grandes tamaños de red. En el capítulo 2 veremos cómo realizar esta tarea. A su vez, evaluaremos el error cometido en el cálculo estableciendo un criterio para su minimización. Comprobaremos de esta forma, que los valores obtenidos de energía y entropía del GM acuerdan muy bien con los reportados en la literatura.

Otros estudios topológicos fueron realizados con el objeto de, elaborar una descripción lo más sencilla posible del (supuesto) orden que alcanza el sistema a $T = 0$. El cálculo de diversos parámetros de orden magnético ha tenido esta finalidad. Recientemente se ha reportado [Vogel *et al.* 1994; Ramirez-Pastor, Nieto and Vogel 1997; Vogel *et al.* 1998; Ramirez-Pastor *et al.* 2000; Vogel *et al.* 2002] que, en el modelo de EA a $T = 0$, una fracción apreciable de enlaces permanecen *satisfechos*, formando una red denominada *red diluida de enlaces*. Para que un enlace F (AF) esté siempre satisfecho, los espines que vincula deben tener en todo momento la misma (diferente) orientación en el GM. Dicho comportamiento se ha estudiado para tamaños del sistema muy pequeños (alrededor de 64 espines). Corroborar que este resultado se mantiene en el límite termodinámico, es vital para hablar de la posibilidad de un orden de largo alcance.

Para avanzar en tamaño, debemos abandonar la idea de explorar todas las configuraciones pertenecientes al GM (recordemos que el número de configuraciones crece exponencialmente con el tamaño) como método de cálculo. En su lugar, se deben mejorar las estrategias de tal forma que podamos realizar determinaciones precisas, visitando el mínimo número posible de estados del sistema. Siguiendo esta premisa, en el capítulo 3 desarrollaremos un nuevo método numérico que permite discriminar la red diluida. La información obtenida, servirá para estimar cual es el comportamiento de dicha estructura en el límite termodinámico.

En este trabajo también hemos explorado el diagrama de fase, temperatura crítica T_c versus la fracción de enlaces AF (en ausencia de un campo magnético externo), para el modelo de EA en la red cuadrada. Para $x = 0$ se observa una transición de fase ferromagnética a $T_c \approx 2,269$ (por simplicidad hemos tomado $k_B J = 1$, donde k_B es la constante de Boltzmann) ya que, para esa concentración, el modelo de EA es equivalente al modelo de Ising ferromagnético. Como es bien conocido, la magnetización es el parámetro de orden adecuado para estudiar este comportamiento crítico. En el otro extremo a $x = 1$, tenemos una transición antiferromagnética con la misma temperatura crítica. Esto no es casual ya que el modelo de EA posee una simetría respecto a $x = 0,5$. A pesar de ello, el estudio a $x = 1$ se basa en un parámetro de orden aparentemente diferente, que respeta la simetría encontrada en el estado fundamental. A $T = 0$, la magnetización de un antiferromagneto es igual a cero, ya que la mitad de los espines se ordenan con una

orientación opuesta a la de la otra mitad. Cada uno de estos grupos recaen sobre una de las dos subredes de simetría $C(2 \times 2)$. El parámetro de orden para la transición antiferromagnética consiste simplemente en la diferencia de magnetización entre estas dos subredes.

Al aumentar levemente la concentración de enlaces AF a partir de $x = 0$, encontramos que la transición ferromagnética perdura hasta aproximadamente $x \approx 0,1$ (lo mismo sucede para la transición antiferromagnética entre $x = 1$ y $x \approx 0,9$). Comúnmente, el estudio de esta región del diagrama de fase se ha efectuado usando simplemente la magnetización del sistema. Dicho parámetro de orden no es el más adecuado, ya que la magnetización del GM no es única para $x \neq 0$. Por arriba de $x \approx 0,1$ y hasta $x = 0,5$, ya no es posible usar la magnetización para explorar el diagrama de fase. Dentro de este rango se pregona que existe un fase SG con un nuevo tipo de orden magnético. Esto ha impulsado a los investigadores a definir diversos parámetros de orden para estudiar la posible existencia de una transición de fase continua.

La existencia de una red diluida, o su generalización la *red rígida de enlaces* (ver capítulo 3), constituye un pilar fundamental para estudiar el comportamiento crítico del sistema. La razón es muy simple: un conjunto de enlaces como la red diluida, une a un cluster masivo de espines, obligándolos a mantener una orientación relativa a $T = 0$. Para que exista una transición de fase, el desorden térmico debe romper este vínculo entre los espines. En el capítulo 4 veremos que, basados en estos estudios topológicos, es posible definir un *nuevo parámetro de orden*. Entre sus características más sobresalientes podemos señalar que:

- Esta definido en todo el rango de concentración x . Es decir, podemos explorar el diagrama de fase usando un único parámetro de orden.
- Constituye una generalización de otros parámetros de orden. A $x = 0$ y a $x = 1$ el nuevo parámetro es idéntico, respectivamente, a la magnetización del sistema (ferromagneto) y a la diferencia de magnetización entre las dos subredes de espines (antiferromagneto).
- Su distribución a bajas temperaturas no presenta efectos espurios (ver capítulo 4).

Usando esta función, exploraremos todo el diagrama de fase del modelo de EA, analizando fundamentalmente el comportamiento crítico a $x = 0,5$.

Capítulo 1

Sistemas desordenados

Un sistema *desordenado* es aquel cuyas características dependen de una serie de variables aleatorias, que no cambian apreciablemente su valor durante un tiempo de observación prolongado. Por ejemplo, en un SG, la distribución espacial de las impurezas magnéticas determina si el acoplamiento entre los espines es F o AF. Si los tiempos característicos de difusión de estos iones son extremadamente grandes frente al tiempo en que se realiza una medida experimental, entonces el desorden puede considerarse congelado y, las coordenadas que indican las posiciones de las impurezas dentro del sólido, pueden tomarse como las variables que determinan el desorden del sistema.

Un estudio teórico de un sistema desordenado inevitablemente afronta una seria cuestión: en rigor, ¿cómo debemos determinar el límite termodinámico de una dada cantidad?. Frecuentemente en un sistema ordinario, el camino a seguir consiste en calcular primero dicha cantidad para una serie de tamaños pequeños y luego, extrapolando, estimar su valor para el sistema infinito. Este mismo proceso puede ser utilizado en un sistema desordenado, pero siempre teniendo en cuenta que existen innumerables realizaciones del desorden y, para cada una de ellas, un valor particular de la cantidad de interés. La dificultad aquí no reside en el proceso de extrapolación, sino en el forma en que se determina un valor promedio a través del desorden para un tamaño finito. Intuitivamente la tendencia consiste en realizar un simple promedio aritmético. En la primer sección de este capítulo, tendremos oportunidad de comprobar que este procedimiento a veces puede incorporar un error sistemático: al extrapolar hacia el límite termodinámico, las cantidades obtenidas de esta forma suelen diferir de su valor real.

Por debajo de T_f , tanto los sistemas reales como los modelos teóricos de SG, muestran una dinámica muy *lenta* caracterizada por un tiempo de relajación máximo τ_{max} . No es posible discriminar experimentalmente, si este tiempo es extremadamente grande (pero finito) o infinito. Desde un punto de vista teórico esta diferencia es significativa, ya que si $\tau_{max} \rightarrow \infty$ cuando tomamos el límite termodinámico, el sistema será *no-ergódico*. Con el término no-ergódico nos referimos a un sistema para el cual se ha roto la ergodicidad: para el sistema infinito y por debajo de una dada temperatura, existirán estados termodinámicos con las mismas propiedades macroscópicas, pero separados por barreras de energía libre de altura infinita. Por otro lado, si τ_{max} es muy grande (pero finito), existe la posibilidad de que el sistema sea *efectivamente no-ergódico*. Esto se presenta frecuentemente cuando existen estados metaestables: dentro de la escala de tiempo del experimento el sistema explorará sólo una fracción del espacio de fase que le es accesible. Como veremos en la segunda sección, distinguir un caso de otro es fundamental para determinar si el sistema realmente experimenta un transición de fase continua.

Finalmente, en la última sección de este capítulo, introduciremos el modelo de Edwards y Anderson, el cual estudiaremos a lo largo de todo este trabajo.

1.1 Sistemas desordenados

Consideremos un sistema desordenado arbitrario descrito por dos conjuntos de variables: N variables estadísticas σ_i ($i = 1, \dots, N$) y M variables γ_j ($j = 1, \dots, M$) que describen el *desorden*. Por ejemplo en un SG, los conjuntos $\{\sigma\}$ y $\{\gamma\}$ pueden asociarse, respectivamente, a los estados de espín (donde N sería el número de espines y estaría asociado al tamaño del sistema) y a las posiciones de las impurezas magnéticas en el interior de la red cristalina. Las variables que describen el desorden poseen un tiempo característico de evolución o fluctuación τ_{fl} , el cual necesariamente debe compararse con

τ_{exp} , el tiempo medio en el que se efectúa una medición experimental de un observable (no debemos confundir τ_{flu} con τ_{max} , el tiempo de relajación máximo del sistema). Si $\tau_{flu} \ll \tau_{exp}$ (supondremos que esta condición siempre se cumple para las variables estadísticas), las variables γ_i pueden fluctuar durante el tiempo de medición, alcanzando en el equilibrio termodinámico los valores más probables. En nuestro ejemplo, esta situación correspondería a tiempos característicos de difusión de las impurezas magnéticas muy pequeños en comparación a τ_{exp} . Para calcular la energía libre del sistema F por grado de libertad (que identificamos con N), simplemente tratamos las variables γ_i en igual forma que las variables estadísticas:

$$F = -\frac{1}{N} k_B T \ln \langle Z\{\gamma\} \rangle. \quad (1.1)$$

En la ecuación anterior, realizamos un promedio aritmético sobre todas las posibles realizaciones del desorden (representado por el símbolo $\langle \dots \rangle$) de la función de partición

$$Z\{\gamma\} = \sum_{\Omega} \exp(-H\{\gamma, \sigma\} / k_B T), \quad (1.2)$$

donde H es el hamiltoniano del sistema y la suma se extiende al conjunto Ω de todas las configuraciones del espacio fase $\{\sigma\}$ que le son accesibles al sistema ($\{\sigma\} \in \Omega$). Resultados analíticos de una versión del modelo de Ising en la que los enlaces (mixtos) pueden libremente reordenarse en una red cuadrada (manteniendo siempre sus proporciones), no muestran propiedades interesantes relacionadas a un SG [Thorpe and Beeman 1976].

En la práctica y a temperaturas suficientemente bajas, los tiempos de difusión de los átomos dentro del sólido son extremadamente grandes, por lo que el límite representado por la ecuación (1.1) no es de gran utilidad. El caso opuesto, cuando $\tau_{flu} \gg \tau_{exp}$, indica que las variables que describen el desorden pueden considerarse fijas, ya que no modifican apreciablemente su valor durante el tiempo en que transcurre una observación experimental. El problema es determinar qué cantidades pueden ser promediadas y cómo debe efectuarse este promedio en el desorden. Como veremos, es suficiente con realizar *un promedio aritmético de variables extensivas*.

Consideremos un sistema desordenado masivo, formado por un ensamble numeroso de subsistemas estadísticamente idénticos [Brout 1959]. Supongamos que cada subunidad es suficientemente masiva como para despreciar el acoplamiento entre ellas (subsistemas independientes). En el límite $\tau_{flu} \ll \tau_{exp}$ todas las realizaciones del desorden son posibles en cada subsistema, por lo que la energía libre calculada en la ecuación (1.1) es la misma en cada uno de ellos. Por otro lado, si $\tau_{flu} \gg \tau_{exp}$ cada subsistema del ensamble posee una configuración diferente del desorden. Teniendo en cuenta que las subunidades son independientes, calculamos la función de partición del sistema Z_S como el producto de las funciones de partición Z de los subsistemas:

$$Z_S = \prod_{\gamma} Z\{\gamma\}. \quad (1.3)$$

En la ecuación anterior el producto se realiza sobre todos los subsistemas del ensamble (cada uno identificado con una realización diferente del desorden). Equivalentemente, calculamos la densidad de energía libre del sistema F_S como la suma de las densidades de energías libres F de cada subsistema:

$$F_S = -\frac{1}{N_S} k_B T \ln \left(\prod_{\gamma} Z\{\gamma\} \right) = \frac{1}{N_S} \sum_{\gamma} -k_B T \ln Z\{\gamma\}, \quad (1.4)$$

donde N_s es el número total de grados de libertad. Si tomado $N_s = N l$, con N el número de grados de libertad de cada uno de los l subsistemas, podemos reescribir la ecuación (1.4) de la siguiente forma:

$$F_s = \frac{1}{l} \sum_{\gamma} \frac{-k_B T \ln Z\{\gamma\}}{N} = \langle F\{\gamma\} \rangle. \quad (1.5)$$

La ecuación (1.5) expresa que la densidad de energía libre (y en realidad la densidad de cualquier cantidad extensiva) de un sistema masivo, es igual al promedio en el desorden de la densidad de energía libre de un número muy grande de subsistemas. Esta propiedad, que ha sido probada en algunos modelos [van Hemmen and Palmer 1982; van Enter and van Hemmen 1983, 1984], es de gran importancia ya que nos permite hacer una comparación entre los resultados teóricos y las medidas experimentales efectuadas sobre un solo espécimen de gran tamaño.

A partir de lo expuesto en los párrafos anteriores es evidente que

$$\ln \langle Z\{\gamma\} \rangle \neq \langle \ln Z\{\gamma\} \rangle, \quad (1.6)$$

donde el lado derecho indica la forma adecuada de proceder en un sistema cuyo desorden está congelado (la función de partición no es una cantidad extensiva, por lo que no es lícito promediarla en el desorden). Una situación similar ocurre cuando deseamos determinar la densidad de entropía S de un sistema desordenado. Si para cada realización del desorden conocemos el número de estados accesibles G (degeneración), el postulado de Boltzmann nos dice que

$$S\{\gamma\} = \frac{1}{N} k_B \ln G\{\gamma\}. \quad (1.7)$$

En principio tenemos dos opciones para realizar un promedio. O lo realizamos directamente sobre G ,

$$S_G = \frac{1}{N} k_B \ln \langle G\{\gamma\} \rangle, \quad (1.8)$$

o simplemente sobre el logaritmo natural de la degeneración,

$$S_L = \frac{1}{N} k_B \langle \ln G\{\gamma\} \rangle. \quad (1.9)$$

La ecuación (1.9) es la forma correcta de realizar el promedio en el desorden ya que la entropía, y no G , es una cantidad extensiva.

Incluso en el límite termodinámico, la diferencia entre S_G y S_L permanece finita. A partir de la ecuación (1.7), vemos que la degeneración para una dada realización del desorden es:

$$G\{\gamma\} = \exp[N S\{\gamma\} / k_B] = \exp[N S_L / k_B] \exp[N (S\{\gamma\} - S_L) / k_B]. \quad (1.10)$$

Teniendo en cuenta (1.10), reescribimos la ecuación (1.8):

$$S_G = \frac{1}{N} k_B \ln \langle \exp[N S_L / k_B] \exp[N (S\{\gamma\} - S_L) / k_B] \rangle$$

$$S_G = S_L + \frac{1}{N} k_B \ln \langle \exp[N (S\{\gamma\} - S_L) / k_B] \rangle. \quad (1.11)$$

Si ahora suponemos que la distribución de entropía (en el desorden) es gaussiana con ancho $\Delta \propto N^{-1/2}$ [Ma 1985] incluso, en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$), el segundo término del lado derecho de la ecuación (1.11) convergerá a un valor mayor que cero:

$$S_G > S_L . \quad (1.12)$$

Para demostrar la desigualdad (1.12), debemos probar que

$$a \equiv \frac{1}{N} \ln \langle \exp[N (S\{\gamma\} - S_L) / k_B] \rangle > 0 , \quad (1.13)$$

suponiendo que la distribución de entropía en el desorden para un dado N es

$$\rho(S) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta} \exp - [(S - S_L) / \Delta]^2 , \quad (1.14)$$

donde por simplicidad hemos tomado $S \equiv S\{\gamma\}$. Comenzamos por calcular el promedio mostrado en la ecuación (1.13):

$$\frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \exp - [(S - S_L) / \Delta]^2 \exp[N (S - S_L) / k_B] dS . \quad (1.15)$$

A pesar de que la entropía no puede tomar un valor negativo, para facilitar los cálculos, el límite de integración inferior se ha extendido hasta $-\infty$ (esto no afecta los cálculos si suponemos que $\rho(S) \equiv 0$ para $S < 0$). Completando cuadrados podemos reescribir (1.15):

$$\frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \exp - [(S - S_L) / \Delta - N \Delta / 2k_B]^2 \exp[N \Delta / 2k_B]^2 dS . \quad (1.16)$$

Si tenemos en cuenta que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp - (x)^2 dx = \sqrt{\pi} , \quad (1.17)$$

la ecuación (1.16) puede integrarse fácilmente arrojando el siguiente resultado:

$$\exp[N \Delta / 2k_B]^2 . \quad (1.18)$$

Finalmente, a partir del resultado (1.18), podemos determinar que:

$$a = \frac{1}{N} \ln \{ \exp[N \Delta / 2k_B]^2 \} = N \Delta^2 / (2k_B)^2 > 0 , \quad (1.19)$$

donde hemos considerado que $N \Delta^2 = \text{cte.} > 0$, ya que $\Delta \propto N^{-1/2}$.

Cuando tomamos el límite termodinámico, la distribución (1.14) tiende a una delta de Dirac que diverge para $S = S_L$:

$$\rho(S) = \delta(S - S_L) \quad \text{cuando } N \rightarrow \infty . \quad (1.20)$$

Entonces, la desigualdad (1.12), nos está diciendo simplemente que S_G corresponde a la entropía de una muestra macroscópica *extremadamente improbable*. En la figura 1.1 se muestra mediante un esquema, la diferencia entre S_G y S_L la cual se mantiene incluso al tomar el límite termodinámico.

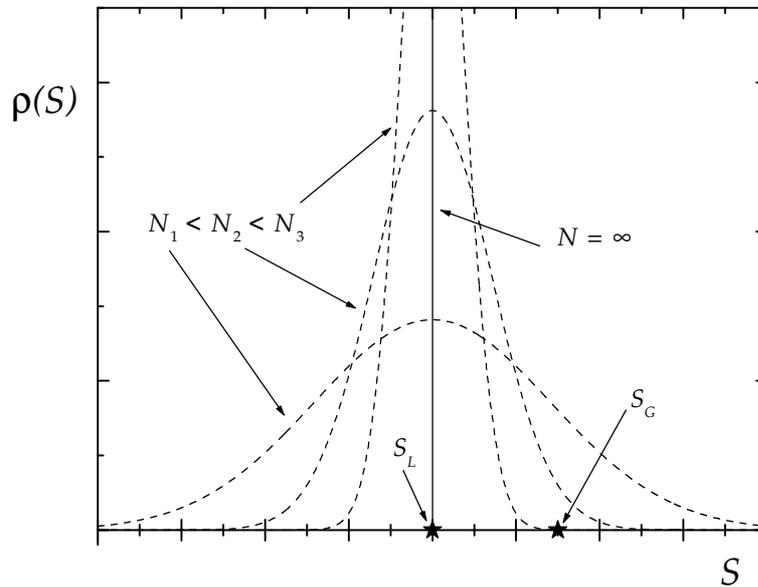


Figura 1.1. Esquema que muestra la dependencia con N de la distribución (en el desorden) de la densidad de entropía. Con estrellas se muestran los valores de S_L y S_G .

Existen otras cantidades para las cuales no es trivial encontrar la forma de efectuar el promedio en el desorden, ya que su comportamiento con N es muy complejo. Por ejemplo, tanto la función de correlación entre pares de espines [McCoy and Wu 1968; Kinzel and Binder 1981] como los cumulantes de Binder para sistemas desordenados [Kawashima and Young 1996], deben recibir un tratamiento particular. En especial, en el capítulo 4, usaremos los cumulantes de Binder para estudiar la distribución de probabilidad de un nuevo parámetro de orden.

1.2 Ergodicidad

Cuando realizamos un experimento y efectuamos la medida de un observable, el valor que obtenemos corresponde a un *promedio temporal* de dicha cantidad a lo largo de todos los estados microscópicos visitados por el sistema durante el tiempo τ_{exp} . Si $\tau_{exp} \gg \tau_{max}$ (tiempo de relajación máximo del sistema), este promedio será equivalente a un *promedio configuracional* sobre todos los estados del espacio fase accesibles al sistema, cada uno de ellos pesado por la distribución de probabilidad canónica

$$P_k = \frac{1}{Z} \exp(-H_k / k_B T), \quad (1.21)$$

donde el subíndice k denota uno de tales estados. Decimos que, bajo estas condiciones experimentales (de temperatura, presión, etc.), el sistema es *ergódico* y está en un *completo equilibrio termodinámico*.

Existen situaciones para los cuales estos dos promedios no son equivalentes. Como discutimos en la introducción de este capítulo, puede suceder que τ_{max} sea extremadamente grande con respecto τ_{exp} . En este caso, usualmente se observará que el sistema permanece indefinidamente en un estado *metaestable*, sin relajarse a uno más probable de menor energía libre. Un ejemplo típico de ello lo constituye el dióxido de silicio SiO_2 .

Un análisis cuidadoso, señala que el mínimo de energía libre F_{min} (al cual debería acceder el sistema en el equilibrio termodinámico) corresponde a una estructura cristalina ordenada llamada cuarzo. Sin embargo, dependiendo de la forma en la se ha enfriado el sólido, es posible encontrar el SiO_2 en un estado amorfo *estable*, pero con una energía libre mayor que F_{min} . El mecanismo para pasar de una estructura a la otra [Binder and Stauffer 1976], consiste en la nucleación de dominios suficientemente grandes de la fase cristalina, los cuales deben crecer hasta cubrir todo el material. En la práctica, el tiempo que se requiere para observar este proceso, es mucho mayor que el tiempo de realización de cualquier experimento concebible. En rigor, el sistema sigue siendo ergódico aunque estemos en presencia de un proceso que se encuentra *fuera del equilibrio termodinámico*.

Si el sistema experimenta una transición de fase, entonces $\tau_{max} \rightarrow \infty$ en el límite termodinámico. Esta divergencia indica que se ha *quebrado la ergodicidad*, ya que se necesita un tiempo infinito para poder visitar todos los estados que le deberían ser accesibles. A lo largo de su trayectoria, el sistema encuentra barreras de energía libre *infinitas*, que restringen su derrotero a una región limitada del espacio fase. Como un ejemplo de ello, consideremos el modelo de Ising de un ferromagneto [Ising 1925]. El hamiltoniano de este sistema de N espines en un campo magnético externo B , puede escribirse como

$$H = J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (1.22)$$

en donde $\sigma_i = \pm 1$ es la variable de espín del sitio i -ésimo (de una red de una determinada geometría) y la primera suma se extiende a todos los primeros vecinos (i,j) vinculados a través de $J < 0$ (la constante de intercambio o enlace). Para una temperatura T mayor que la temperatura de Curie T_c ($\approx 2,269 |J|/k_B$ para una red cuadrada [Onsager 1944]), el sistema es ergódico y se comporta como un simple paramagneto. Sin embargo, por debajo de T_c y para $B = 0$, experimenta una magnetización espontánea en una de las dos direcciones posibles y con igual probabilidad. En otras palabras, para $T < T_c$ hay dos estados termodinámicos equivalentes que están separados por una barrera de energía libre infinita (en el límite termodinámico), la cual obliga al sistema a permanecer en uno de tales estados por un tiempo indefinido.

Para ver esto mejor, definamos la magnetización promedio por espín (que es el parámetro de orden natural del sistema)

$$m(T) = \frac{1}{Z} \sum_{\Omega} m\{\sigma\} \exp(-H\{\sigma\}/k_B T), \quad (1.23)$$

donde la suma se extiende al conjunto Ω de todas las configuraciones del espacio fase $\{\sigma\}$ que le son accesibles al sistema, y

$$m\{\sigma\} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (1.24)$$

Consideremos una red cuadrada de espines y un campo magnético externo nulo. Para $T > T_c$, tenemos un único estado termodinámico con $m = 0$ (paramagneto). Debido a que, invirtiendo todos y cada uno de los espines de una dada configuración $\{\sigma\}$ con $m\{\sigma\}$, es posible encontrar otra $\{\sigma\}^*$ cuya magnetización $m\{\sigma\}^* = -m\{\sigma\}$, es fácil demostrar que el hamiltoniano (1.22) tiene una simetría *arriba-abajo* y por lo tanto deberíamos tener $m = 0$ para todo T . Sin embargo, para $T < T_c$, el sistema experimenta una transición de fase continua y se magnetiza espontáneamente con $m > 0$ o $m < 0$ [Onsager 1944]. Decimos que la simetría se ha roto y la ergodicidad se ha quebrado. Necesariamente, el sistema elige uno de los dos estados termodinámicos o componentes, cada uno asociado a un valor

positivo o negativo de la magnetización (para forzar a que el sistema elija una componente, se puede usar un campo magnético que luego se hace tender a cero). Estas componentes son ergódicas: una vez que eligió una de ellas, la trayectoria en el espacio fase le permite acceder a todos los estados pertenecientes a la misma. Sin embargo, en un tiempo finito, el sistema no puede visitar ninguna configuración de la otra componente ya que una barrera infinita de energía libre separa ambos estados termodinámicos.

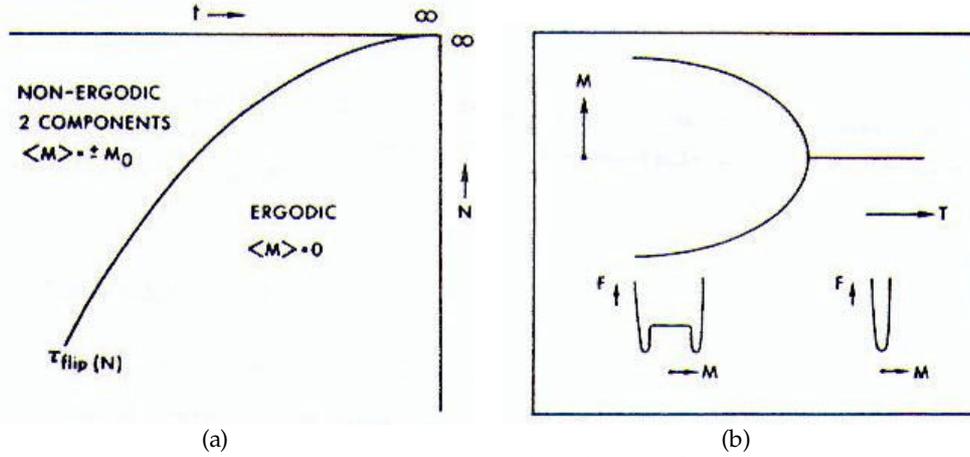


Figura 1.2. Comportamiento esquemático del modelo de Ising ferromagnético. En (a) se muestra la dependencia con N del tiempo τ_{flip} , y en (b) la magnetización en función de T para un campo magnético nulo. También podemos observar la energía libre para dos temperaturas por arriba y por debajo de T_c [Palmer 1982, 1983].

Bajo estas condiciones ($T < T_c$), un sistema de tamaño finito posee un tiempo medio de relajación τ_{flip} , el cual se debe esperar para observar un cruce a través de la barrera de energía libre (finita) que separa los dos estados termodinámicos. En la figura 1.2.a [Palmer 1982, 1983] podemos observar un esquema de la dependencia con N de τ_{flip} para el modelo de Ising. Si $\tau_{exp} < \tau_{flip}$ (en la figura $\tau_{exp} = t$), entonces el sistema estará atrapado en una de las componentes y tendremos $m \neq 0$ (en la figura $\langle M \rangle = m$). Por otro lado, si $\tau_{exp} > \tau_{flip}$, el sistema podrá explorar los dos estados termodinámicos y por lo tanto tendremos $m = 0$. Como vemos en la figura 1.2.a, $\tau_{flip} \rightarrow \infty$ cuando $N \rightarrow \infty$, lo que indica que en el límite termodinámico el sistema no será ergódico y, al igual que en una muestra ferromagnética macroscópica, $m \neq 0$.

La figura 1.2.b [Palmer 1982, 1983], muestra un esquema de la dependencia de la magnetización con la temperatura del sistema. En la parte inferior, podemos ver la estructura de la energía libre con respecto a la magnetización para dos temperaturas, una por debajo y otra por arriba de T_c . Nuevamente, para $T > T_c$ existe un solo mínimo en el que el sistema posee un estado termodinámico con $m = 0$. Por otro lado para $T < T_c$, son dos los mínimos, cada uno con $m > 0$ y $m < 0$. En el modelo de Ising se puede demostrar que, la barrera de energía libre que separa estos dos estados termodinámicos es proporcional a L^{d-1} , donde L es el tamaño lineal del sistema y d la dimensión del espacio [Binder and Young 1986].

Para formalizar los ejemplos y razonamientos anteriores, consideremos un sistema clásico de tamaño finito N , cuyos estados accesibles ω pertenecen al espacio fase Ω [van Enter and van Hemmen 1984]. El promedio configuracional de un observable $A(\omega)$ está dado por

$$A_{con} = \int_{\Omega} dP(\omega) A(\omega), \quad (1.25)$$

donde la integral (o suma) anterior se extiende a todos los estados del espacio fase Ω , cada uno de los cuales tiene una densidad de probabilidad $P(\omega)$. Por otro lado, supongamos

que inicialmente el estado del sistema es ω y su posición al tiempo t está dada por $E_t \omega$, siendo E_t un operador que representa la dinámica de evolución del sistema. El *promedio temporal* del mismo observable, calculado a lo largo de la trayectoria que sigue el sistema en el espacio fase, es:

$$A_{tem} = \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} dt A(E_t \omega). \quad (1.26)$$

Ahora bien, si todos los estados son igualmente probables y la probabilidad P es independiente del tiempo, entonces $P(\omega) = P(E_t \omega)$. Decimos que P es ergódica con respecto a la dinámica E_t , si el conjunto vacío y Ω son los únicos conjuntos invariantes bajo la transformación E_t :

$$E_t \Omega \subseteq \Omega. \quad (1.27)$$

Como consecuencia de ello, los promedios configuracional (1.25) y temporal (1.26) de un mismo observable, serán exactamente iguales.

Una posibilidad es que P no sea ergódica con respecto a la dinámica E_t . En este caso Ω estaría fraccionada en conjuntos disjuntos Ω_i , cada uno de ellos invariante:

$$\Omega = \bigcup_i \Omega_i, \quad \Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset, \quad E_t \Omega_i \subseteq \Omega_i. \quad (1.28)$$

Para un sistema que ha sufrido el quiebre de su ergodicidad (acompañada de una transición de fase), las Ω_i representan *componentes ergódicas* o *estados termodinámicos de igual energía libre*. Esto último implica que, es lo mismo calcular el valor de la energía libre por grado de libertad (o por espín) sobre todos los estados de Ω , que hacerlo sobre cualquiera de sus componentes Ω_i . Siempre obtendremos el mismo valor. Por otro lado, los promedios (1.25) y (1.26) efectuados sobre un observable cualquiera, no tienen por que ser iguales. Tal es el caso de la magnetización de un ferromagneto: en el límite termodinámico y por debajo de T_c , el promedio configuracional de m será igual a cero (sin una adecuada separación ergódica), mientras su promedio temporal será distinto de cero.

Finalmente, debemos considerar la noción de *parámetro de orden*. Para un sistema desordenado como un SG, la siguiente propiedad debería ser satisfecha [van Enter and van Hemmen 1984]:

$$\begin{aligned} & \text{para una dada realización del desorden,} \\ & \text{el parámetro de orden debería ser capaz} \\ & \text{de señalar cada componente ergódica.} \end{aligned} \quad (1.29)$$

En otras palabras, un *buen parámetro de orden* tendría que tomar diferentes valores en cada uno de los estados termodinámicos, en los que puede caer el sistema luego de una transición de fase. Claramente, esta propiedad se cumple también para un sistema que no es desordenado. Tal es el caso de un ferromagneto, en el que la magnetización (el parámetro de orden) toma un valor positivo o negativo, de acuerdo a la componente en la que se encuentre el sistema.

Para los SG diversos parámetros de orden han sido definidos [Binder and Young 1986], ninguno de los cuales satisface la propiedad (1.29). Como veremos en el capítulo 3, al explorar el estado fundamental del modelo de Edwards y Anderson $\pm J$, seremos capaces de aislar un cierto orden magnético. Más tarde, en el capítulo 4, utilizaremos esta información para describir la fase y definir un nuevo parámetro de orden, el cual será capaz de satisfacer (1.29).

1.3 El modelo de Edwards y Anderson $\pm J$

Si estamos interesados en estudiar un SG metálico tal como el CuMn o el AuFe, fácilmente podemos diseñar un modelo que sea fiel a la realidad. Esto se logra distribuyendo al azar momentos magnéticos de espín sobre los sitios de una estructura tridimensional periódica, por ejemplo fcc. Posteriormente, el acoplamiento entre espines puede realizarse a través de la interacción RKKY. Aunque una investigación detallada de este tipo de modelos es de gran importancia, debido principalmente a su gran complejidad, los estudios teóricos tratan de evitar este tipo de sistemas. La experiencia demuestra que, es posible obtener buenos resultados e información valiosa, trabajando con modelos discretos que capturen las características esenciales observadas en los sistemas experimentales.

Siguiendo esta línea de pensamiento, en el año 1975 Edwards y Anderson introdujeron un modelo discreto con interacciones de corto alcance, que denominaremos modelo *Gaussiano de Edwards y Anderson* (EAG) [Edwards and Anderson 1975]. La idea central consiste en describir un SG por medio de un hamiltoniano tipo Ising con interacciones mixtas:

$$H = \sum_{(i,j)} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j. \quad (1.30)$$

Como veremos, el hamiltoniano anterior es de la forma (1.22) para un campo magnético externo nulo. A pesar de que $\sigma_i = \pm 1$ sigue siendo la variable de espín del sitio i -ésimo, las interacciones ya no son todas iguales. Cada una de las $J_{i,j}$ acopla los dos espines primeros vecinos situados en los sitios i y j , y viene dada por una distribución gaussiana:

$$P(J_{i,j}) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta J} \exp - \left[(J_{i,j} - J_0) / \Delta J \right]^2. \quad (1.31)$$

Como puede observarse en la ecuación anterior, la distribución está debidamente normalizada y ΔJ representa la dispersión de intensidad de los enlaces $J_{i,j}$. J_0 es el valor medio, el cual puede seleccionarse adecuadamente para incorporar diferentes concentraciones de enlaces F (valores negativos de $J_{i,j}$) y AF (valores positivos de $J_{i,j}$), o simplemente anisotropía. Si $J_0 = 0$, tendremos el caso típico de igual probabilidad de ambos tipos de enlaces. En este modelo el desorden se introduce en dos etapas: primero se eligen todos los $J_{i,j}$ de acuerdo a la función de distribución y, posteriormente, estos se distribuyen espacialmente al azar uniendo cada uno de los pares de espines primeros vecinos.

Dos años mas tarde, Toulouse propuso una nueva versión del modelo de EAG, en la cual sólo sustituyó la función de distribución de los enlaces (1.31) por otra más simple [Toulouse 1977]:

$$P(J_{i,j}) = (1-x) \delta(J_{i,j} + J) + x \delta(J_{i,j} - J). \quad (1.32)$$

En la ecuación anterior, x es la concentración (entre 0 y 1) de enlaces AF (= $+J$), $1-x$ la concentración de enlaces F (= $-J$) y δ es la función delta de Dirac que cumple con las siguientes propiedades:

$$\delta(x - x_0) = 0 \iff x \neq x_0 \quad (1.33)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0). \quad (1.34)$$

Por razones históricas [Binder and Young 1986], nos referiremos a este sistema como *modelo frustrado* o *modelo de Edwards y Anderson $\pm J$* (EA). A pesar de que en principio, todas las técnicas empleadas en este trabajo pueden ser aplicadas a cualquier modelo discreto de

SG, por simplicidad, estudiaremos únicamente el modelo EA para una red cuadrada de N sitios con condiciones de borde periódicas.

Como señalamos anteriormente, una vez elegida la concentración x , una determinada realización del desorden o *muestra*, se obtiene al distribuir al azar sobre la red todos los enlaces dados por la distribución (1.32). La figura 1.3 representa una muestra típica para una red cuadrada de $N = 64$ espines a una concentración de enlaces AF de $x = 0,5$. Los sitios de la red (círculos) son ocupados por espines, que se encuentran vinculados por $2N$ enlaces, tanto F (barras simples) como AF (barras dobles). Los enlaces dispuestos en el perímetro superior y derecho de la figura, representan las condiciones de borde periódicas, las cuales se incorporan al sistema para minimizar los efectos de tamaño finito en las simulaciones numéricas.

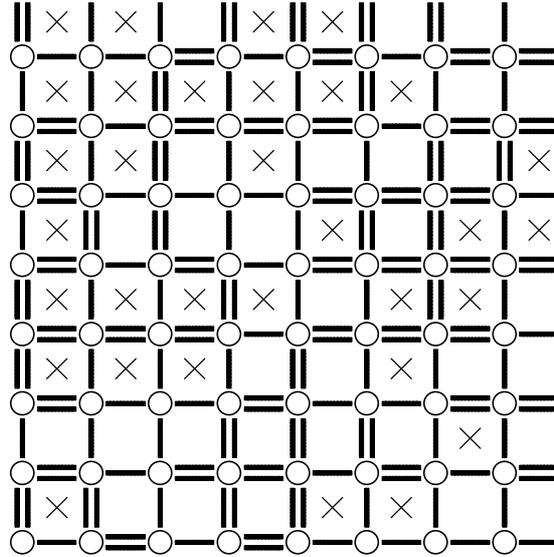


Figura 1.3. Muestra cuadrada de concentración $x = 0,5$, formada por 64 espines (círculos) que se vinculan a través de 128 enlaces, la mitad de los cuales son F (barras simples) y la otra mitad AF (barras dobles). Las cruces marcan aquellas plaquetas que son curvas.

A pesar de que el modelo es muy simple (pero muy difícil de tratar analítica y numéricamente), incorpora los ingredientes imprescindibles para que el sistema sea un buen SG: *desorden estructural y frustración de enlaces*. Para entender a qué nos referimos con frustración de enlaces, definiremos algunos términos topológicos. Una *plaqueta* es el menor circuito cerrado de enlaces de la red (en este caso formado por un cuadrado en cuyos vértices hay 4 espines). Aquellas que se encuentran formadas por un número impar de enlaces AF, son llamadas *plaquetas curvas*. A su vez, decimos que un enlace está *satisfecho* en una dada configuración, cuando su aporte al hamiltoniano es $-J$. Es decir, un enlace F (AF) estará satisfecho, si los dos espines que vincula se encuentran orientados en el mismo sentido (en el sentido opuesto). Por otro lado, un enlace estará *frustrado*, si su aporte al hamiltoniano es $+J$.

En la figura 1.3 se han marcado las plaquetas curvas con una cruz. Esta muestra posee un gran número de ellas debido principalmente a que la concentración es 0,5. Ahora podemos entender fácilmente a que nos referimos con frustración de los enlaces: no es posible encontrar una configuración de espines que, simultáneamente, satisfaga cada uno de los enlaces de una plaqueta curva. Como veremos en el capítulo 2, una consecuencia directa de ello es que el estado fundamental del modelo de EA es degenerado y con una entropía distinta de cero, incluso en el límite termodinámico. Este elevado número de configuraciones atenta contra el establecimiento de un orden de largo alcance. Más adelante en el capítulo 3, analizaremos estos estados para demostrar que existe un

estructura ordenada que subyace bajo este orden configuracional. Dicho análisis será la base para fundamentar la definición de un nuevo parámetro de orden.

Usualmente, se afirma que el modelo de EA bidimensional es un sistema idealizado, cuyas predicciones no tienen un correlato experimental. Esto se fundamenta en que, en el modelo, todos los sitios de la red son ocupados por un momento de espín. Esto no sucede en un SG real, ya que el mismo se sintetiza diluyendo levemente un material magnético (que aporta los espines) en una matriz no magnética. Sin embargo, recientemente se ha reportado que el $\text{Rb}_2 \text{Cu}_{1-r} \text{Co}_r \text{Fe}_4$ es una realización experimental aceptable del modelo de EA en la red cuadrada. Si $r = 1$, tenemos $\text{Rb}_2 \text{CoFe}_4$, un antiferromagneto tipo Ising [Samuelsen 1973]. En el otro extremo para $r = 0$, encontramos que el $\text{Rb}_2 \text{CuFe}_4$ se comporta como un ferromagneto tipo Heisenberg [Yamada 1972]. En un punto intermedio, para una concentración de cobalto $r = 0,218$, el sistema presenta un estado de SG con una distribución de enlaces del tipo (1.32), para igual concentración de enlaces F y AF [Dekker *et al.* 1988a, 1988b]. El hecho de que este material tenga un comportamiento similar al de un modelo bidimensional, se debe a que su estructura está formada por planos de iones magnéticos. Estos planos se encuentran muy separados entre sí, originando que la interacción de intercambio en el plano, sea tres veces más fuerte que perpendicularmente a él. Sea cual sea su justificación, a lo largo de los años el modelo de EA en todas sus versiones, se ha instalado como el prototipo para describir los fenómenos cooperativos en sistemas magnéticos desordenados con interacciones competitivas, tales como los SG [Binder and Young 1986].

Antes de finalizar este capítulo, demostraremos una propiedad que nos será de gran utilidad. En ausencia de campo magnético externo, el modelo de EA para una red cuadrada de sitios, tiene una simetría con respecto a $x = 1/2$, es decir, los cálculos realizados a una concentración x valdrán también para $1 - x$. Esta propiedad, que nos permite restringir nuestra búsqueda a la mitad del rango de concentración, debe tomarse con cierta precaución ya que no significa que es válida para el cálculo de cualquier cantidad. Un ejemplo de ello es la magnetización por espín la cual, por debajo de la temperatura de Curie, es diferentes de cero para un ferromagneto ($x = 0$) e idénticamente nula para un antiferromagneto ($x = 1$). Para ser precisos, la simetría con respecto a $x = 1/2$ en el modelo de EA sólo es válida,

- a) para redes que pueden ser separadas en sólo dos subredes idénticas, con cada una de estas constituida por sitios que estén desconectados a primeros vecinos,
- b) y para un observable A que, si tiene una dependencia configuracional, pueda ser *mapeado* de una concentración x a otra $1 - x$ de igual forma que el hamiltoniano.

Satisfechos estos requisitos (que más tarde aclararemos), se cumplirá para el valor medio del observable que:

$$A(x) = A(1 - x) \quad \text{para } x \in [0,1]. \quad (1.35)$$

Para corroborar (1.35) basta con demostrar que, para cada muestra de concentración x , siempre es posible hallar otra de concentración $1 - x$ que tenga no sólo los mismos niveles de energía, sino que estén igualmente poblados.

Comenzamos considerando una muestra $\{J_{i,j}\}$ de concentración x , a partir de la cual construimos otra $\{J_{i,j}^*\}$ de concentración $1 - x$, sustituyendo los enlaces F y AF por, respectivamente, enlaces AF y F. Es decir,

$$J_{i,j}^* = -J_{i,j} \quad \forall (i, j), \quad (1.36)$$

donde la expresión (i,j) nos dice que los sitios i y j son primeros vecinos. Si el hamiltoniano del sistema $\{J_{i,j}\}$ es (1.30), para $\{J_{i,j}^*\}$ será:

$$H^* = \sum_{(i,j)} J_{i,j}^* \sigma_i^* \sigma_j^*. \quad (1.37)$$

Ahora bien, supongamos que la red de sitios Θ se puede separar en dos subredes del mismo tamaño (número de sitios) y geometría, Θ_1 y Θ_2 , de tal forma que no compartan ningún sitio en común:

$$\Theta = \Theta_1 \cup \Theta_2 \quad \text{y} \quad \Theta_1 \cap \Theta_2 = \emptyset. \quad (1.38)$$

A su vez, para que se satisfaga el requisito a), cada subred no debe estar conectada por sitios primeros vecinos, de tal forma que

$$\text{si } (i,j) \Rightarrow i \in \Theta_1 \text{ y } j \in \Theta_2 \quad \text{o} \quad j \in \Theta_1 \text{ y } i \in \Theta_2. \quad (1.39)$$

Teniendo en cuenta la separación en subredes y la relación (1.36), reescribimos el hamiltoniano (1.37) dividiendo la suma entre primeros vecinos, en otras dos que corren sobre sitios de diferentes subredes:

$$H^* = \sum_{i \in \Theta_1} \sigma_i^* \sum_{j \in \Theta_2 / (i,j)} J_{i,j}^* \sigma_j^* = \sum_{i \in \Theta_1} \sigma_i^* \sum_{j \in \Theta_2 / (i,j)} J_{i,j} (-\sigma_j^*). \quad (1.40)$$

Por último, considerando el mapeo

$$\sigma_k = \begin{cases} \sigma_k^* & \text{si } k \in \Theta_1 \\ -\sigma_k^* & \text{si } k \in \Theta_2 \end{cases}, \quad (1.41)$$

podemos reescribir (1.40), para corroborar que es idéntica al hamiltoniano (1.30) del sistema $\{J_{i,j}\}$:

$$H^* = \sum_{i \in \Theta_1} \sigma_i \sum_{j \in \Theta_2 / (i,j)} J_{i,j} \sigma_j = H \quad (1.42)$$

El mapeo (1.41) nos permite establecer un vínculo uno a uno entre las configuraciones del sistema $\{J_{i,j}\}$ de concentración x , con las del $\{J_{i,j}^*\}$ de concentración $1-x$ y, a su vez, la igualdad (1.42) nos dice que el hamiltoniano no cambiará bajo esta misma transformación. Es decir,

$$Z(x) = Z(1-x) \quad (1.43)$$

y los dos sistemas tendrán las mismas propiedades termodinámicas.

Ejemplos de redes que cumplen el requisito a) son las cuadradas y hexagonales. La figura 1.4 muestra su separación en dos subredes idénticas. Por otro lado, una excepción es la red triangular, ya que esta sólo puede separarse en tres subredes en lugar de dos. De hecho en este caso, si todos sus enlaces son F ($x = 0$), en el GM cada uno de ellos estará satisfecho. Pero, si los sustituimos por AF ($x = 1$), siempre un tercio se encontrará frustrado, dando vida a una energía del estado fundamental mucho mayor que la anterior. Esto se debe a que todas las plaquetas de una red triangular de enlaces AF serán curvas.

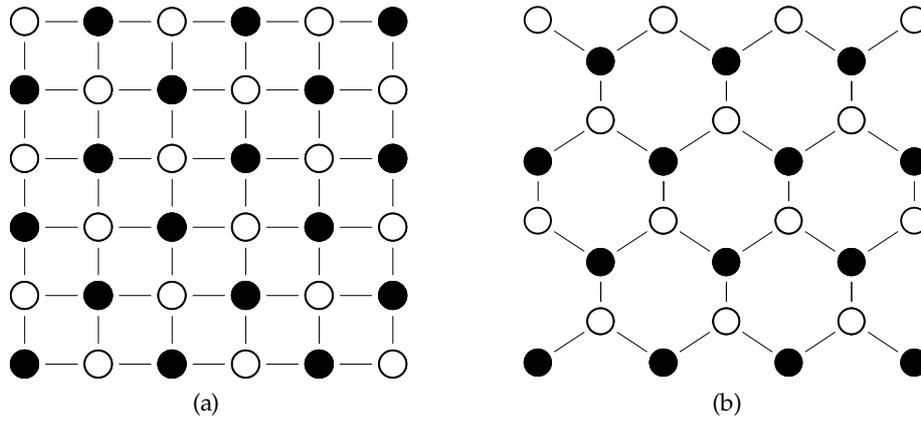


Figura 1.4. Los círculos negros y blancos, diferencian los sitios pertenecientes a las dos subredes que conforman (a) la red cuadrada y (b) la red hexagonal.

Por otro lado, es fácil corroborar que el requisito b), implica que la simetría se cumple para la energía media, la entropía (que depende únicamente de la estructura y población de los niveles de energía) y por lo tanto para la energía libre. Sin embargo, como apuntábamos al comienzo, la magnetización no respeta la simetría (1.35), debido a que tiene un valor para cada configuración de espines y este cambia bajo el mapeo (1.41). De hecho, una red con $m = 1$, sería transformada en otra con $m = 0$ de la misma energía.

Capítulo 2

Propiedades termodinámicas del nivel fundamental

Durante décadas, se han desarrollado diversas técnicas analíticas y numéricas para determinar las *propiedades termodinámicas del estado fundamental* de sistemas complejos como el modelo de EA. Esta insistencia no es caprichosa y se debe en gran parte a la necesidad de obtener nueva información que permita realizar una caracterización acabada del GM de un vidrio de espín. En especial, la *entropía*, es una cantidad cuyo cálculo se dificulta al incrementar el tamaño del sistema estudiado.

Existen diferentes estrategias para calcular la entropía del GM de una muestra particular de un modelo discreto como el de EA. Por un lado, a partir del postulado de Boltzmann sabemos que basta con contar el número total de estados de mínima energía del sistema. Aunque un proceso de este tipo nos permite obtener un *valor exacto* de entropía, sólo puede realizarse numéricamente para tamaños muy pequeños de red [Vogel *et al.* 1994; Ramirez-Pastor, Nieto and Vogel 1997; Vogel *et al.* 1998; Ramirez-Pastor *et al.* 2000; Vogel, *et al.* 2002], ya que la degeneración del GM se incrementa exponencialmente con N . A pesar de ello, hay técnicas sencillas como el *método de coincidencias* de Ma [Ma 1985] y el de *estados locales* de Meirovitch [Meirovitch 1977], y muy complejas como un algoritmo de tipo *genético* apoyado por una *búsqueda balística* [Hartmann 2000], que permiten aproximar la entropía del estado fundamental a partir del análisis de un número limitado de estados representativos.

En este capítulo hemos empleado el llamado *método de integración termodinámica*, el cual permite calcular la diferencia de entropía entre dos estados de equilibrio, integrando la energía media del sistema a través de un camino reversible. Esta técnica fue usada por primera vez por Kirkpatrick, para determinar la entropía del estado fundamental en el modelo de EA [Kirkpatrick 1977]. Sin embargo, debido a la baja capacidad de cálculo de la época y al gran tamaño de red usado ($N = 6400$ espines), el valor que obtuvo no acuerda con los mejores cálculos efectuados hasta la fecha. En su momento, esta discrepancia fue atribuida directamente a las dificultades en la implementación en vidrios de espín del método de integración termodinámica. Como veremos en este capítulo, hoy en día es posible usar dicha técnica para estimar eficientemente el límite termodinámico de la entropía del GM.

En la primer sección de este capítulo describiremos el método de integración termodinámica. A continuación, analizaremos la estrategia de Monte Carlo (MC) usada en este trabajo, para simular el modelo de EA en la red cuadrada de sitios. En la sección tres, determinaremos todos los errores estadísticos cometidos en la implementación del método de integración termodinámica y, por último, compararemos los resultados obtenidos con los reportados en la literatura.

2.1 El método de integración termodinámica

Consideremos el concepto termodinámico de entropía: *la entropía, S , de un sistema es una función de las variables termodinámicas, cuyo cambio entre los estados de equilibrio i y f es igual a la integral*

$$S_f - S_i = \int_{R_i}^f \frac{\delta Q}{T}, \quad (2.1)$$

calculada a lo largo de cualquier trayectoria reversible R que una ambos estados [Zemansky 1968]. En la ecuación (2.1), δQ es el diferencial de calor (inexacto, ya que Q no es una función de las variables termodinámicas y depende de la trayectoria elegida) transferido en forma reversible entre el sistema y un foco calorífico a la temperatura T . La trayectoria R se puede realizar como sigue. Si inicialmente el sistema se encuentra en un estado de equilibrio i a la temperatura T_i , podemos situarlo en otro muy próximo, poniéndolo en contacto con un foco calorífico a una $T = T_i + dT$, donde dT representa un cambio infinitesimal en la temperatura. El cambio en la entropía del sistema será

$$dS = \frac{\delta Q}{T}, \quad (2.2)$$

donde tomaremos por convención que, el calor transferido en forma reversible es positivo si ingresa al sistema y negativo si sale de él. Repitiendo este proceso cuasi-estático un número infinito de veces, podemos pasar al sistema del estado de equilibrio i al f . El cambio total de entropía será simplemente una suma sobre todos los incrementos de entropía del tipo (2.2), lo cual está representado por la integral (2.1).

Para determinar experimentalmente un cambio de entropía en el sistema, debemos someterlo a un proceso similar al anterior, sólo que con un número finito de pasos. En cada uno de ellos, pondremos al sistema en contacto con un foco a una temperatura T (lo más próxima posible a la anterior) y mediremos el calor transferido hasta que se restaure nuevamente el equilibrio termodinámico. Como veremos en la próxima sección, a pesar de que en un *experimento numérico* es sencillo lograr el equilibrio a diferentes temperaturas, no podemos medir entradas o salidas de calor del sistema. En su lugar, es sencillo determinar los cambios producidos por la variación de temperatura en, por ejemplo, la energía interna U . De acuerdo a la primera ley de la termodinámica [Zemansky 1968], existe un vínculo entre el calor transferido y el cambio en la energía interna del sistema:

$$dU = \delta Q - \delta W. \quad (2.3)$$

Aquí δW es el diferencial de trabajo, cuyo valor supondremos positivo si el sistema es el que hace trabajo sobre el medio exterior (una convención de signos opuesta a la de δQ). Si el trabajo realizado es cero (para un sistema de espines esto se logra si el campo magnético externo es nulo), entonces (2.3) permite reescribir la ecuación (2.1) como:

$$S_f - S_i = \int_{R, i}^f \frac{dU}{T}. \quad (2.4)$$

La ecuación anterior es una expresión particular del método de integración termodinámica (TIM) para un sistema cerrado, que sólo puede intercambiar calor con el medio exterior [Kirkpatrick 1977; Binder 1985; Romá, Ramirez-Pastor and Riccardo 2000].

A partir de (2.4) podemos calcular numéricamente la entropía del estado fundamental del sistema. Es importante tener en cuenta que, es imprescindible contar con un estado inicial o de *referencia*, ya que este método sólo nos permite calcular un cambio de entropía entre dos estados de equilibrio. Como veremos en la próxima sección, en una simulación de MC podemos partir nuestra trayectoria desde una temperatura infinita. A pesar de que para la mayoría de los sistemas es necesario realizar un cálculo analítico o numérico de la *entropía absoluta* cuando $T_i \rightarrow \infty$ [Romá, Ramirez-Pastor and Riccardo 2000, 2001], para los modelos de tipo Ising esto no es necesario. A una temperatura suficientemente elevada (en rigor infinita), las 2^N configuraciones posibles del sistema son igualmente probables y por lo tanto la entropía por enlace de nuestro estado de referencia será:

$$S_i = \lim_{T \rightarrow \infty} S(T) = \frac{1}{2N} \ln 2^N = \frac{\ln 2}{2} \quad (2.5)$$

(de ahora en mas, expresaremos todas las cantidades termodinámicas normalizadas al número de enlaces de la red $2N$).

Por otro lado, debido a que la cantidad que controlamos en una simulación es la temperatura (para la cual medimos U), es conveniente realizar un cambio de variables en (2.4). Comenzamos realizando una integración por partes:

$$S(T_f) - S(T_i) = \frac{U(T_f)}{T_f} - \frac{U(T_i)}{T_i} - \int_{U_i}^{U_f} U \frac{d}{dU} \left(\frac{1}{T} \right) dU$$

$$S(T_f) - S(T_i) = \frac{U(T_f)}{T_f} - \frac{U(T_i)}{T_i} - \int_{1/T_i}^{1/T_f} U d \left(\frac{1}{T} \right). \quad (2.6)$$

Si definimos un nuevo hamiltoniano H^* que difiera del original H por una constante aditiva $2NU_0$

$$H^* = H - 2NU_0, \quad (2.7)$$

entonces es trivial comprobar que la relación entre las energías medias por enlace U^* y U será:

$$U^*(T) = U(T) - U_0. \quad (2.8)$$

Haciendo una simple sustitución, podemos ver que la entropía del sistema no cambiará su valor ante esta transformación:

$$S(T_f) - S(T_i) = \frac{U^*(T_f)}{T_f} + \frac{U_0}{T_f} - \frac{U^*(T_i)}{T_i} - \frac{U_0}{T_i} - \int_{1/T_i}^{1/T_f} U^* d \left(\frac{1}{T} \right) - U_0 \int_{1/T_i}^{1/T_f} d \left(\frac{1}{T} \right)$$

$$S(T_f) - S(T_i) = \frac{U^*(T_f)}{T_f} - \frac{U^*(T_i)}{T_i} - \int_{1/T_i}^{1/T_f} U^* d \left(\frac{1}{T} \right) = S^*(T_f) - S^*(T_i). \quad (2.9)$$

Si ahora escogemos U_0 igual a la energía por enlace en el estado fundamental

$$U_0 = \lim_{T \rightarrow 0} U(T), \quad (2.10)$$

entonces

$$\lim_{T \rightarrow 0} U^*(T) = \lim_{T \rightarrow 0} U(T) - U_0 = 0. \quad (2.11)$$

Con esta elección de U_0 y tomando los límites $T_f \rightarrow 0$ y $T_i \rightarrow \infty$ en la ecuación (2.9), podemos fácilmente calcular la entropía del estado fundamental como

$$S(0) = S(\infty) - \int_0^\infty U^* d \left(\frac{1}{T} \right), \quad (2.12)$$

donde hemos considerado que

$$\lim_{T_i \rightarrow \infty} \frac{U^*(T_i)}{T_i} = 0 \quad (2.13)$$

y

$$\lim_{T_f \rightarrow 0} \frac{U^*(T_f)}{T_f} = 0 \quad (2.14)$$

El límite (2.13) es fácil de comprobar, debido a que la energía media por enlace tiende a un valor finito incluso cuando $T \rightarrow \infty$. Sin embargo, el hecho de que el límite (2.14) sea cero, merece una explicación más cuidadosa ya que cuando $T \rightarrow 0$ la energía media $U^* \rightarrow 0$ (ver ecuación (2.11)), lo cual en apariencia indica una indeterminación.

Consideremos que estamos a una temperatura suficientemente baja, como para que los únicos niveles con una población apreciable sean el fundamental y el primer excitado. Entonces, la energía media tendrá aproximadamente la siguiente dependencia exponencial:

$$U^*(T) \propto \exp(-H_1\beta) \quad (2.15)$$

En la ecuación anterior H_1 es la energía del primer nivel y $\beta = 1/k_B T$. Finalmente, teniendo en cuenta (2.15) podemos reescribir (2.14), para luego resolver el límite aplicando la regla de L'Hopital (derivando, por separado, el numerador y el denominador con respecto a β):

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\beta}{\exp(H_1\beta)} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{H_1 \exp(H_1\beta)} = 0. \quad (2.16)$$

Si reemplazamos el estado de referencia (2.5) en la integral (2.12), podemos escribir la expresión definitiva del TIM que usaremos en este capítulo para calcular la entropía del GM por enlace:

$$S_k(0) = \frac{\ln 2}{2} - \int_0^\infty U_k^* d\left(\frac{1}{T}\right). \quad (2.17)$$

En la ecuación anterior, hemos incorporado el subíndice k para indicar que se trata de la entropía de una muestra particular (más tarde deberemos realizar un promedio en el desorden). En la siguiente sección veremos la metodología de MC que hemos empleado para aproximar la integral del lado derecho de (2.17). Más tarde, derivaremos los errores estadísticos más importantes que afectan este cálculo y veremos cómo el resultado obtenido acuerda con lo reportado en la literatura reciente.

2.2 Simulación de Monte Carlo

En este trabajo hemos estudiado el modelo de EA en la red cuadrada de sitios, usando simulación de Monte Carlo en la asamblea canónica. Como es usual, el algorítmico genera un proceso de Markov definido en términos de la probabilidad de aceptación de Metropolis [Metropolis *et al.* 1953; Binder 1979]

$$W_{i,f} = \min\{1, \exp(-\Delta H_{i,f} / k_B T)\}, \quad (2.18)$$

donde $\Delta H_{i,f}$ es la diferencia de energía entre una configuración inicial ω_i y otra final ω_f :

$$\Delta H_{i,f} = H_f - H_i. \quad (2.19)$$

El estado ω_f se propone (ya que posteriormente debe aceptarse) a partir de ω_i mediante un mecanismo local de *spin flip*, es decir, cambiando el estado de un espín de la red elegido al azar [Glauber 1963]. Este proceso genera una cadena o trayectoria en el espacio fase que,

luego de una cantidad adecuada de iteraciones Nr_0 (N iteraciones es una unidad de tiempo de MC) que son despreciadas (necesarias para alcanzar el equilibrio termodinámico), visita cada una de las configuraciones del sistema un número de veces proporcional a la probabilidad canónica. Si el número de iteraciones *efectivas* es Nr (r es el tiempo total de MC en el equilibrio termodinámico), entonces es sencillo demostrar que el valor medio de un observable A a una temperatura T se puede determinar mediante un simple promedio aritmético [Binder 1979]:

$$A(T) = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r A_i \quad (2.20)$$

En la ecuación anterior, A_i es el valor del observable muestreado en el i -ésimo tiempo de MC. Un esquema del algoritmo usado se presenta a continuación:

- a) Situamos al sistema sobre una primer configuración ω_i seleccionada al azar.
- b) Generamos otra ω_f a partir de la anterior, eligiendo un espín al azar y cambiando su estado.
- c) Calculamos la variación de la energía $\Delta H_{i,f}$ que sufriría el sistema si se aceptara el cambio propuesto $i \rightarrow f$.
- d) Determinamos el valor la probabilidad de Metropolis $W_{i,f}$.
- e) Si $W_{i,f} = 1$ aceptamos el cambio. Pero si $W_{i,f} < 1$, seguimos el siguiente esquema: generamos un número al azar $\xi \in [0,1]$ y luego, si $W_{i,f} > \xi$, aceptamos el cambio.
- f) Si se produjo un cambio, se toma ω_f como la nueva configuración inicial. Regresamos al punto b).

El primer paso para determinar la entropía del GM usando (2.17), consiste en calcular la energía media por enlace [usando un promedio del tipo (2.20)] en n estados de equilibrio entre $T = 0$ y $T = \infty$. La figura 2.1 representa un ejemplo para el modelo de EA, para una muestra de $N = 16$ espines y concentración $x = 0,5$ (de ahora en adelante tomaremos $k_B = J = 1$ sin que esto origine una pérdida de generalidad).

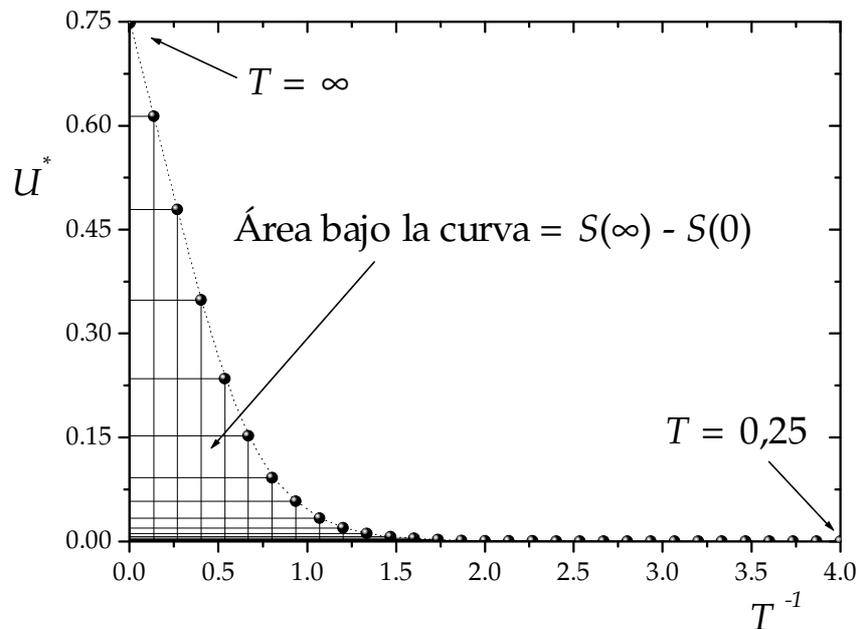


Figura 2.1. Energía media por enlace en función de la inversa de la temperatura para una muestra de $N = 16$ espines y $x = 0,5$.

Es importante destacar que los dos estados extremos, $T = 0$ y $T = \infty$, pueden ser determinados con MC. Sin embargo, en la práctica un sistema finito se localiza

indefinidamente en el GM a una temperatura mayor que cero, en nuestro caso $T = 0,25$. Esto se debe a que, a esta temperatura, la probabilidad de ocupar el primer estado excitado es muy pequeña, por lo que durante el tiempo total de muestreo r difícilmente se observa al sistema fuera del fundamental. Este comportamiento no perjudica al proceso de cálculo de la entropía ya que, la contribución de los puntos de muy baja temperatura, es prácticamente despreciable (lo cual se evidencia en la figura 2.1).

Como veremos en la próxima sección, luego de obtener la energía media en n estados de equilibrio, debemos emplear alguna técnica numérica para aproximar el valor del área bajo la curva a partir de este número discreto de puntos. Por otro lado, cada energía media se obtiene con un dado error de simulación el cual repercute en el cálculo de la integral (2.17). Por ello, también determinaremos las principales fuentes de error que afectan el cálculo de entropía con TIM.

2.3 Técnica de aproximación trapezoidal y errores numéricos

La técnica más sencilla para aproximar la integral de una función arbitraria $f(y)$ definida en el intervalo $[a,b]$, es el *método trapezoidal* (MT) [Press *et al.* 2002]:

$$\int_a^b f(y)dy = \frac{\Delta y}{2} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{l=1}^{n-1} f(y_l) \right] - \frac{(b-a)}{12} f''(\epsilon) \Delta y^2. \quad (2.21)$$

En la ecuación anterior, $\Delta y = (b - a)/n$ es la separación entre los $n + 1$ puntos $y_l = a + l \Delta y$ para los que se evalúa f . Podemos ver que, el término cuadrático de error está afectado por la derivada segunda de la función evaluada en un punto $\epsilon \in (b - a)$. Con el MT simplemente aproximamos la integral, calculando el área bajo una poligonal formada por la unión con segmentos de todos los pares de puntos que son contiguos entre sí. A medida que el número n aumenta, disminuye Δy y por lo tanto también lo hace el error sistemático en (2.21) (si la derivada segunda no cambia de signo, como es en nuestro caso).

Las tres principales fuentes de error que afectan al cálculo de entropía del nivel fundamental son [Romá *et al.* 2004]:

- El *error de integración* (IE), el cual está asociado a la técnica numérica usada para aproximar la integral (en nuestro caso este se corresponde con el término de error del MT).
- El *error de simulación* (SE), el cual se origina en el cálculo de la energía media mediante MC.
- El *error de muestreo* (SAE), originado por la elección de un conjunto finito de muestras de un dado tamaño, que se toman como representativas del desorden del sistema.

En lo que sigue, encontraremos una expresión analítica para cada una de las fuentes de error. Comenzamos escribiendo el MT para la integral del lado derecho de (2.17) (para la muestra k -ésima):

$$I_k = \int_0^{\infty} U_k^* d\left(\frac{1}{T}\right)$$

$$I_{k,n}(N) = -\frac{2}{n} \left[U_k^*(N, T_f) + U_k^*(N, T_i) + 2 \sum_{l=1}^{n-1} U_k^*(N, T_l) \right] + \frac{C}{n^2}, \quad (2.22)$$

donde

$$C = \frac{16}{3} U_k^{*''}(N, \epsilon). \quad (2.23)$$

Como aclaramos anteriormente, los extremos de temperatura se tomaron entre $T_f = 0,25$ y $T_i = \infty$, con las T_l dentro de este mismo intervalo. El último término del lado derecho de (2.22) es el error sistemático de integración IE. Para determinar el valor de C para un dado N y para una dada muestra, calculamos la entropía mediante (2.17) [aproximando la integral con (2.22)] para diferentes valores de n , lo que permitió constatar una dependencia funcional del IE con n^2 . Este proceso se realizó sobre 500 muestras, para pequeños tamaños de red entre $N = 16$ y $N = 81$, encontrándose un valor de $C \approx 2$ que no depende apreciablemente del tamaño de red y de la muestra considerada.

Para determinar el error de simulación SE, comenzamos considerando que para un tamaño N y una temperatura T , la distribución de probabilidad, de que el sistema tenga una dada energía (que es una cantidad extensiva normalizada en este caso al número de enlaces) debe ser una función gaussiana [Binder and Young 1986] con un ancho proporcional a $N^{-1/2}$ (esto se cumple sólo aproximadamente para pequeños tamaños de red). Por lo tanto, si realizamos un promedio sobre r valores de la energía, obtenemos una estimación de $U_k^*(N, T)$ con un dado error estadístico

$$U_k^*(N, T) = U_{k,r}^*(N, T) \pm \Delta U_{k,r}^*(N, T), \quad (2.24)$$

donde $U_{k,r}^*(N, T)$ es el promedio y

$$\Delta U_{k,r}^*(N, T) = \frac{\mu_k(T)}{\sqrt{N r}}. \quad (2.25)$$

Podemos apreciar en la ecuación anterior, que la dependencia del error con k y T ha sido absorbida por μ , cuya funcionalidad no nos detendremos a analizar. Sin embargo, la dependencia con r tiene una explicación sencilla: mientras un solo valor de energía tiene una incertidumbre del orden del ancho de la distribución ($\propto N^{-1/2}$), el promedio sobre r valores de este tipo, tendrá un error menor que se verá atenuado por $r^{-1/2}$.

El SE tiene su origen en el error con que se mide cada una de las $n + 1$ energías que participan en la evaluación del MT. Teniendo en cuenta (2.24) y (2.25), reescribimos (2.22) como

$$I_{k,n}(N) = I_{k,n,r}(N) \pm \frac{A_k}{\sqrt{N r n}} + \frac{C}{n^2}, \quad (2.26)$$

donde

$$I_{k,n,r}(N) = -\frac{2}{n} \left[U_{k,r}^*(N, T_f) + U_{k,r}^*(N, T_i) + 2 \sum_{l=1}^{n-1} U_{k,r}^*(N, T_l) \right] \quad (2.27)$$

es la integral determinada con los valores de energía calculados en la simulación de MC. La función A_k es un promedio para una muestra sobre las $n + 1$ energías:

$$A_k = \sqrt{8 \langle \mu_k^2(T) \rangle_n}. \quad (2.28)$$

Si realizamos ahora un promedio de la entropía sobre M muestras (que es un promedio aritmético, ya que S es extensiva), obtenemos

$$S_M(N, 0) = \langle S_k(N, 0) \rangle_M \quad (2.29)$$

$$S_M(N, 0) = S_{M,r,n}(N, 0) \pm \frac{A}{\sqrt{N r n M}} + \frac{C}{n^2}, \quad (2.30)$$

donde A es el promedio de A_k a lo largo de M muestras y

$$S_{M,r,n}(N,0) = \frac{\ln 2}{2} - I_{M,r,n}(N) \quad (2.31)$$

es nuestro estimador de la entropía del GM. El segundo término del lado derecho de (2.30) es el SE (notemos que este error se ha atenuado nuevamente, como consecuencia del promedio sobre M muestras). Para determinar A , comparamos la entropía calculada mediante (2.17), con la obtenida en forma exacta contando el número total de estados mediante un algoritmo denominado EFIS [Vogel *et al.* 2002]. Este proceso se realizó sobre 500 muestras, para pequeños tamaños de red entre $N = 16$ y $N = 81$, arribando a un valor de $A \approx 2$.

Para un dado tamaño de red N , existe un valor definido de entropía del estado fundamental $S(N,0)$. Sin embargo, debido a que el número total de muestras es enorme, realizamos una estimación de la entropía a partir de un promedio aritmético sobre M de ellas elegidas al azar. Al igual que en el caso de la energía media, la distribución de entropía (en el desorden) es gaussiana con ancho $N^{-1/2}$. Si realizamos ahora un promedio sobre M muestras, entonces podemos escribir

$$S(N,0) = S_{M,r,n}(N,0) \pm \frac{A}{\sqrt{N r n M}} \pm \frac{B}{\sqrt{N M}} + \frac{C}{n^2}. \quad (2.32)$$

El tercer término del lado derecho de la ecuación anterior es el error muestra o SAE. Podemos apreciar que, en (2.32), se han reunido todos los errores que afectan el cálculo de entropía del nivel fundamental al usar TIM y simulación de MC. Finalmente, a partir de la comparación con resultados exactos, obtenemos un valor de $B \approx 0,14$.

Concluimos esta sección analizando el error en la determinación de la energía del estado fundamental. Debido a que para una dada muestra este valor es único y no proviene de un promedio térmico, su error simplemente es muestral:

$$U(N,0) = U_M(N,0) \pm \frac{D}{\sqrt{N M}}. \quad (2.33)$$

En la ecuación anterior, el estimador de la energía se ha obtenido como un promedio en el desorden:

$$U_M(N,0) = \langle U_k(N,0) \rangle_M. \quad (2.34)$$

Como antes, a partir de la comparación con resultados exactos, se determinó que $D \approx 0,23$.

2.4 Energía y entropía del estado fundamental

Como hemos visto en la sección anterior, a partir de la comparación con datos exactos calculados con EFIS, se pudo determinar la magnitud del error cometido en la implementación de TIM. La tabla 2.1 muestra los valores de energía calculados con ambas metodologías, así como los errores de muestreo determinados con (2.33). Los tamaños considerados estuvieron comprendidos entre $N = 16$ y $N = 81$ (500 muestras por cada N). Podemos ver que, ambos algoritmos son capaces de llegar al estado fundamental de cada una de las muestras estudiadas, ya que los valores reportados de energía son los mismos. Por otro lado, la tabla 2.2 muestra la entropía y todos los errores asociados a la implementación de TIM [ecuación (2.32)]. Para mantener el error del cálculo numérico (SE y IE) despreciable frente al SAE (lo cual puede ser constatado comparando las últimas

tres columnas de la tabla), se eligió $n = 300$ y $r = 20.000$. Debido a esto, tomaremos al error muestral SAE como el más importante tanto en la determinación de la energía como de la entropía.

N	U_M exacto	U_M MC	SAE
16	-0,65475	-0,65475	0,00257
25	-0,67632	-0,67632	0,00206
36	-0,68189	-0,68189	0,00171
49	-0,68971	-0,68971	0,00147
64	-0,69272	-0,69272	0,00129
81	-0,69535	-0,69535	0,00114

Tabla 2.1. Energía del GM por enlace para diferentes tamaños de red. El cálculo exacto ha sido efectuado con EFIS y el de MC con TIM. El error reportado únicamente es el muestral.

N	S_M exacto	S_M MC	SE	IE	SAE
16	0,08294	0,08292	9,1E-6	2,2E-5	0,0016
25	0,06292	0,06292	7,3E-6	2,2E-5	0,0013
36	0,05756	0,05755	6,1E-6	2,2E-5	0,0011
49	0,05188	0,05180	5,2E-6	2,2E-5	9,2E-4
64	0,04824	0,04823	4,6E-6	2,2E-5	8,1E-4
81	0,04558	0,04558	4,0E-6	2,2E-5	7,2E-4

Tabla 2.2. Entropía del GM por enlace para diferentes tamaños de red. El cálculo exacto ha sido efectuado con EFIS y el de MC con TIM.

Las figuras 2.2 y 2.3 muestran los valores de energía y entropía en función del tamaño de red, para las 3.000 redes (500 para cada tamaño) de entre $N = 16$ y $N = 81$. El único error significativo que se reporta en ambas figuras es el SAE ya que, para la entropía, el resto de los errores son despreciables. Podemos apreciar en las figuras que, no es posible inferir adecuadamente cuál es la tendencia de U_M y S_M hacia el límite termodinámico. Obviamente se hace necesario realizar cálculos a mayores tamaños de red.

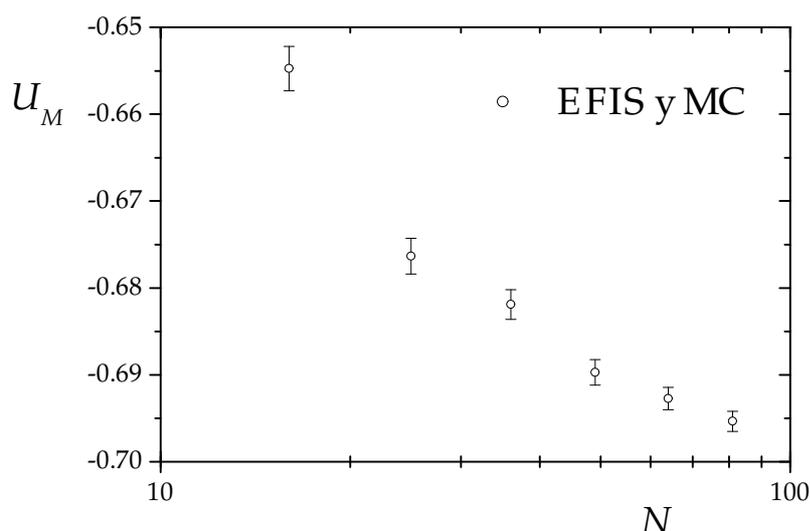


Figura 2.2. Energía del GM por enlace para diferentes tamaños de red. Los puntos con su barra de error corresponden a los valores de la tabla 2.1.

Una de las limitaciones de la simulación de MC con una dinámica de tipo spin flip, cuando se utiliza para estudiar sistemas complejos como el modelo de EA, es la dificultad para acceder al GM a medida que el tamaño de red aumenta. En nuestro caso este

inconveniente se presenta a partir de aproximadamente $N = 400$ espines, límite que no hemos superado para no afectar nuestros cálculos numéricos.

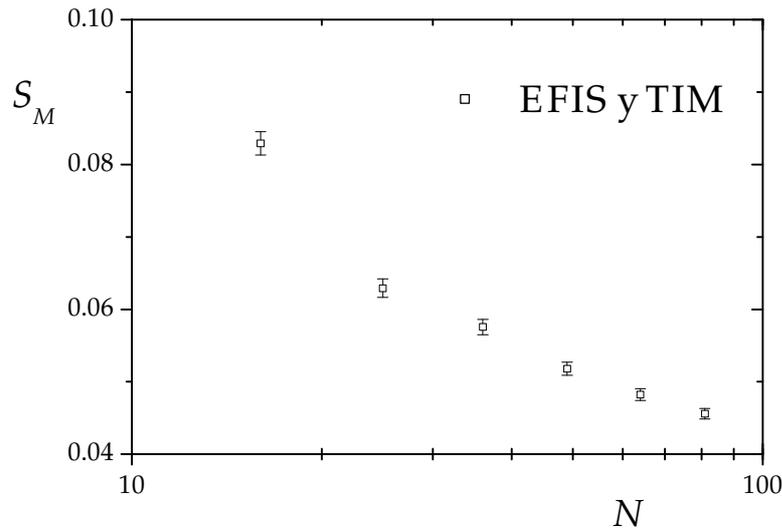


Figura 2.3. Entropía del GM por enlace para diferentes tamaños de red. Los puntos con su barra de error corresponden a los valores de la tabla 2.2.

La tabla 2.3 muestra tanto la energía como la entropía calculada por TIM para 18.000 muestras de red (2.000 por tamaño), y el error muestral para ambas cantidades. Un análisis superficial revela que los efectos de tamaño ya no son tan importantes por arriba de $N = 256$. Esto es más notorio en las figuras 2.4 y 2.5, en las cuales se muestran los valores reportados en la tabla 2.3.

N	U_M MC	SAE (U_M)	S_M MC	SAE (S_M)
16	-0,6551	1,3E-3	0,0804	8,1E-4
25	-0,6768	1,0E-3	0,0634	6,5E-4
36	-0,6817	8,6E-4	0,0574	5,5E-4
49	-0,6879	7,3E-4	0,0524	4,7E-4
64	-0,6917	6,4E-4	0,0494	4,1E-4
81	-0,6929	5,7E-4	0,0467	3,7E-4
144	-0,6963	4,3E-4	0,0431	2,8E-4
256	-0,6982	3,2E-4	0,0415	2,2E-4
400	-0,6982	2,6E-4	0,0409	1,8E-4

Tabla 2.3. Energía y entropía del GM por enlace para diferentes tamaños de red. El cálculo de ambas cantidades ha sido efectuado con MC y TIM. El error reportado únicamente es el muestral.

Para encontrar el límite termodinámico de U_M y S_M , podemos recurrir a dos estrategias diferentes. Por un lado, proponiendo alguna ley empírica (por ejemplo exponencial) para el decaimiento de estas cantidades hacia un valor independiente del tamaño, podemos realizar un ajuste e inferir el límite de $N \rightarrow \infty$. Esta metodología presenta un gran inconveniente: los valores límite obtenidos dependen fuertemente de la ley propuesta. De hecho, si uno realiza un ajuste de los puntos de la figura 2.5 con una ley exponencial simple, obtiene un valor de entropía para $N \rightarrow \infty$ de $S = 0,0416 \pm 0,0001$. Sin embargo, eligiendo una ley de decaimiento un poco más elaborada, por ejemplo una suma de dos exponenciales (usada para realizar la línea punteada de la figura 2.5), se mejora el ajuste y el valor límite es de $S = 0,0412 \pm 0,0001$. Claramente, los intervalos de confianza de los dos estimadores de la entropía no se solapan. Por otro lado, la mayoría de los autores [Kirkpatrick 1977; Vannimenus and Toulouse 1977; Morgenstern and Binder 1980; Cheung and McMillan 1983; Kolan and Palmer 1982], reportan los valores de energía y

entropía del mayor tamaño estudiado, como la mejor estimación del límite termodinámico de esas cantidades. Nosotros hemos seguido esta simple metodología. Por lo tanto, la última fila de la tabla 2.3, contiene los mejores valores de energía y entropía calculados en este trabajo:

$$\begin{aligned} U &= -0,6982 \pm 2,6 \times 10^{-4} \\ S &= 0,0409 \pm 1,8 \times 10^{-4} \end{aligned} \quad (2.35)$$

El mejor valor de energía del estado fundamental reportado en la literatura hasta la fecha $U = -0,700965 \pm 1 \times 10^{-6}$ [Palmer and Adler 1999], fue calculado extrapolando los resultados obtenidos para un gran número de muestras de hasta $N = 3.240.000$ espines (278 muestras de este tamaño).

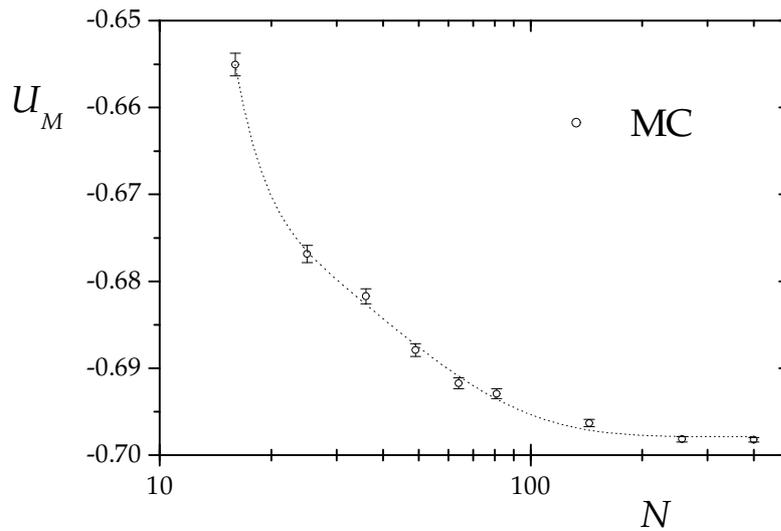


Figura 2.4. Energía del GM por enlace para diferentes tamaños de red. Los puntos con su barra de error corresponden a los valores de la tabla 2.3. La línea punteada es sólo una guía para el ojo.

Si uno lo compara con (2.35) se puede corroborar que la diferencia no supera el 0,4 %, un acuerdo significativo teniendo en cuenta que el mayor tamaño estudiado en este trabajo fue de $N = 400$ espines.

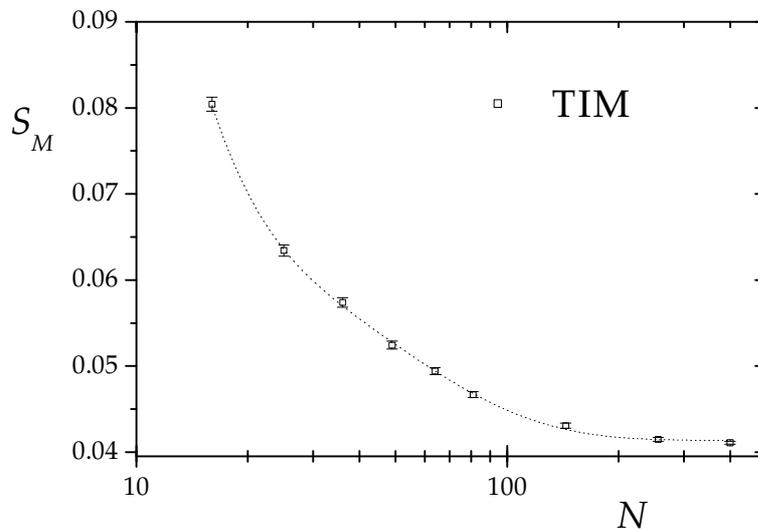


Figura 2.5. Entropía del GM por enlace para diferentes tamaños de red. Los puntos con su barra de error corresponden a los valores de la tabla 2.3. La línea punteada es sólo una guía para el ojo.

Por otro lado, para la entropía no existe un trabajo tan extenso como el anterior. La tabla 2.4 muestra cronológicamente algunos de los calculados más importantes de entropía que han sido reportados en la literatura.

S	Método	Autor
$\approx 0,05$	TIM	Kirkpatrick 1977
$\approx 0,035$	Algoritmo de minimización de las longitudes de frustración	Vannimenus and Toulouse 1977
$\approx 0,0375$	Matriz de transferencia	Morgenstern and Binder 1980
$\approx 0,04$	Matriz de transferencia	Kolan and Palmer 1982
$0,0350 \pm 0,0025$	Matriz de transferencia	Cheung and McMillan 1983
$0,0355 \pm 0,0035$	MC y Matriz de transferencia	Wang and Swendsen 1988
$0,0352 \pm 0,0001$	Método combinatorio	Blackman and Poulter 1991
$0,0354 \pm 0,0002$	Método combinatorio	Blackman, Conçalves and Poulter 1998
$0,0390 \pm 0,0025$	Algoritmo de aproximación del tipo genético y búsqueda balística	Hartmann 2000
$0,0409 \pm 0,0002$	TIM	Reportado en este trabajo 2004

Tabla 2.4. Valores de entropía del GM por enlace reportados en la literatura.

Podemos ver que, el valor de entropía calculado en este trabajo acuerda satisfactoriamente con el reportado por Hartmann. Al igual que nosotros, este autor estudió redes de hasta $N = 400$ espines (96 muestras de ese tamaño), extrapolando posteriormente para obtener el límite termodinámico. Las diferencias con el resto de los trabajos (sobre todo los más recientes) pueden tener su origen en el hecho de que el número de enlaces AF del sistema puede fluctuar (lo cual es una consecuencia de la metodología empleada). Para tratar el caso $x = 0,5$ estos autores no eligen muestras con igual cantidad de enlaces F y AF. En su lugar, los enlaces simplemente son seleccionados con probabilidad $1/2$. Esto puede llevar a discrepancias cuando el tamaño del sistema es pequeño.

Para finalizar este capítulo, consideraremos los cálculos de entropía y energía del fundamental, en todo el rango de concentración de enlaces AF. Como demostramos en la última sección del capítulo 1, el modelo de EA en la red cuadrada de sitios tiene una simetría en torno a $x = 1/2$, lo cual permite restringir los cálculos a la mitad del rango de concentración. Aprovechando esta propiedad, se determinó con MC la energía del GM por enlace para muestras de tamaño $N = 400$ espines (500 muestras para cada concentración tratada). Como vemos en la figura 2.6, a medida que x se aleja de sus valores extremos, U_M crece hasta aproximadamente $x = 0,3$ y $0,7$ permaneciendo casi constante a partir de allí. Una forma de estimar este comportamiento para bajas concentraciones, consiste en suponer que todos los enlaces minoritarios (aquellos que están presente en menor número) se encontrarán frustrados en el GM. Esto es lógico, ya que si estamos en la cercanías de $x = 0$, lo más probable es que todos los enlaces AF (una cantidad de $2Nx$) se encuentren aislados y frustrados, formando parte cada uno de ellos de dos plaquetas curvas vecinas, unidas por una trayectoria de frustración de longitud 1. El resto de los enlaces F se encontrarán satisfechos. Esto implica simplemente que la energía por enlace se puede escribir como:

$$U = \frac{-2N(1-x) + 2Nx}{2N} = -1 + 2x \quad \text{para } x \rightarrow 0. \quad (2.36)$$

Un razonamiento similar conduce a

$$U = -1 + 2(1 - x) \quad \text{para } x \rightarrow 1, \quad (2.37)$$

válida para muy altas concentraciones. En la figura 2.6, podemos apreciar el acuerdo obtenido con esta simple aproximación en los extremos de concentración.

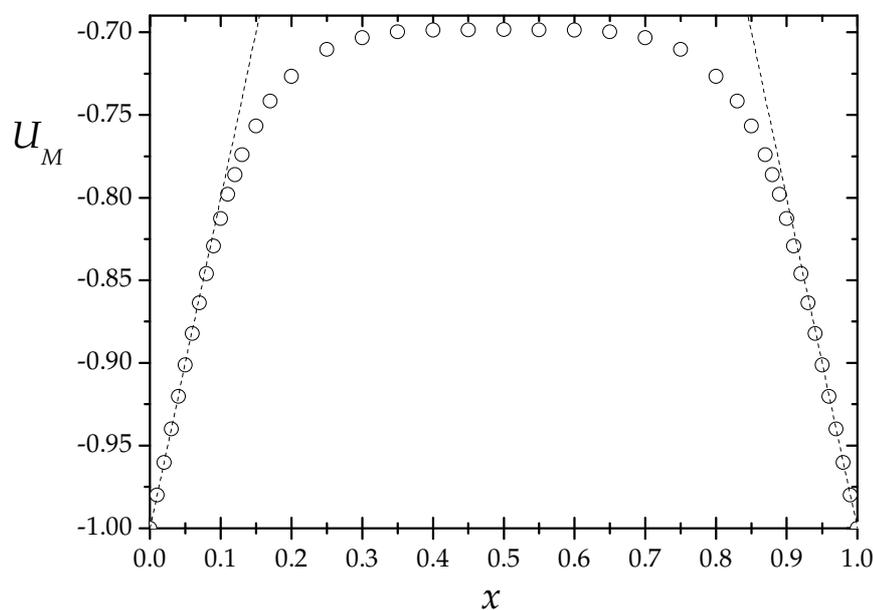


Figura 2.6. Energía del GM por enlace para diferentes concentraciones. Las líneas punteadas son las aproximaciones (2.36) y (2.37).

Un comportamiento similar sucede con la entropía. La figura 2.7 muestra S_M calculada con TIM para todo el rango de concentración.

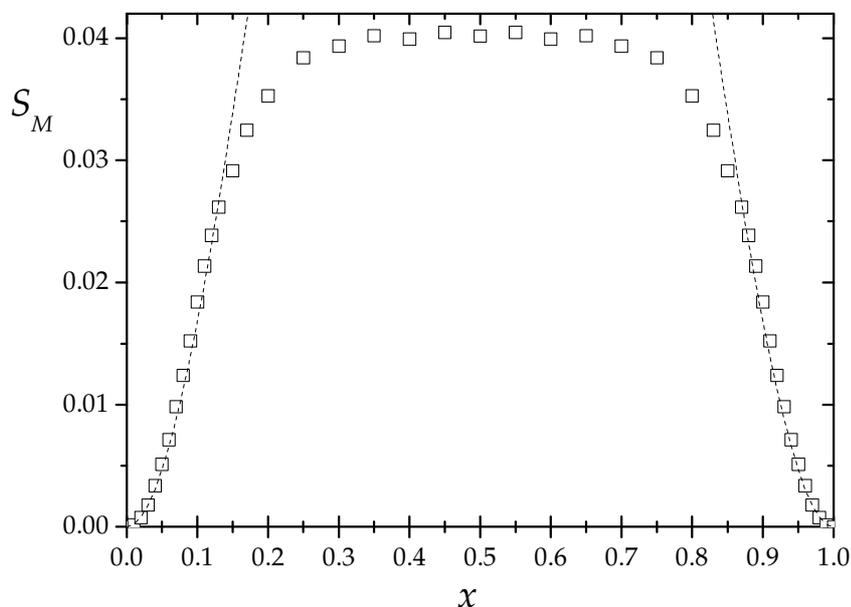


Figura 2.7. Entropía del GM por enlace para diferentes concentraciones de enlaces AF. La línea punteada es la aproximación (2.40).

Para realizar una aproximación a bajas concentraciones, suponemos que los pocos espines libres que hay en el sistema se encuentran muy alejados unos de otros. Si el número promedio de ellos es n_d , entonces la entropía por enlace será:

$$S = \frac{1}{2N} \ln 2^{n_{sl}} = \frac{n_{sl}}{N} \frac{\ln 2}{2}. \quad (2.38)$$

Para que un espín sea libre se necesita que, simultáneamente, dos de sus enlaces estén satisfechos y dos frustrados. Si seguimos suponiendo que, para bajas concentraciones todos los enlaces AF están frustrados, entonces la probabilidad de tener un entorno de este tipo es proporcional a $x^2 (1-x)^2$. Teniendo en cuenta que existen 6 configuraciones diferentes de enlaces que cumplen este requisito, podemos estimar el número promedio de espines libres como

$$n_{sl} = 6Nx^2(1-x)^2 \quad x \rightarrow 0, \quad (2.39)$$

que inmediatamente, usando la ecuación (2.38), nos conduce a:

$$S = x^2(1-x)^2 \ln 8 \quad x \rightarrow 0. \quad (2.40)$$

Haciendo un análisis similar al anterior, podemos demostrar que (2.40) sigue valiendo en el límite $x \rightarrow 1$. La figura 2.7 muestra con línea punteada a esta aproximación, donde podemos constatar el acuerdo con los cálculos de MC a bajas concentraciones.

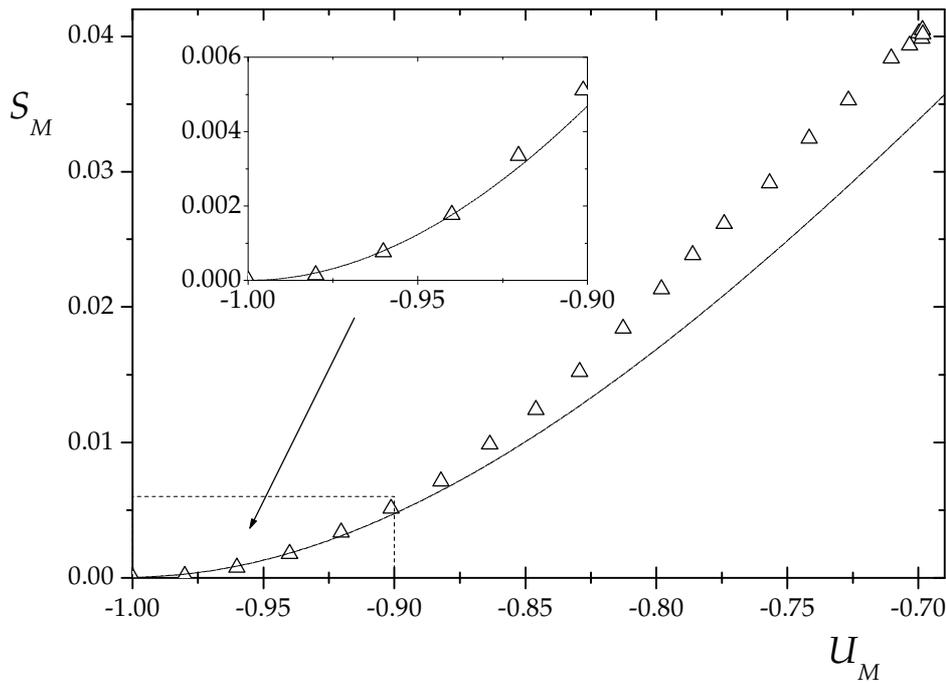


Figura 2.8. Entropía vs. energía del GM por enlace para todo el rango de concentración de enlaces AF. La línea punteada es la aproximación (2.41).

Por último, la figura 2.8 correlaciona los valores de entropía y energía del GM, para todo el rango de concentración. La línea punteada es nuestra aproximación, que podemos obtener a partir de las ecuaciones (2.40), (2.36) y (2.37):

$$S = (1-U^2)^2 \frac{\ln 8}{16}. \quad (2.41)$$

Capítulo 3

Estudio topológico del nivel fundamental

En general, un sistema no-desordenado que experimenta una transición termodinámica continua, se ordena en una *fase* con una simetría reconocible a simple vista. Este comportamiento está asociado directamente con la pérdida de algunos de los grados de libertad necesarios para describir sus estados accesibles. Tal es el caso de un ferromagneto, para el cual es evidente que en su fase, todos los espines del sistema tienen una afinidad por permanecer alineados en alguna de las dos direcciones posibles (espines tipo Ising). Por debajo de T_c , la energía libre representada en función de la magnetización m (figura 1.2 b), muestra claramente que existen dos componentes ergódicas en este sistema. Vemos que dicho *despliegue* es posible, gracias a que hemos determinado que m , es el parámetro de orden más adecuado para describir la transición ferromagnética. Si en un antiferromagneto intentamos realizar una representación similar, no podremos hacerlo con la ayuda de la magnetización. Tanto para estos sistemas como para aquellos que son desordenados, si estamos empeñados en describir su estado crítico, es vital encontrar el parámetro de orden adecuado.

Como vemos, hay un vínculo muy estrecho entre la pérdida de grados de libertad, la simetría de la fase y el parámetro de orden. Cuando estudiamos un sistema a fondo, paulatinamente aislamos aquellas variables que son relevantes, las cuales más tarde podemos usar para diseñar una función que sirva para separar las dos componentes ergódicas. En un vidrio de espín, este ejercicio ha sido ensayado decenas de veces, lo cual es manifestado por el gran número de parámetros de orden propuestos en la literatura [Binder and Young 1986]. Esta tarea la desarrollaremos una vez más en el capítulo 4, al proponer un nuevo parámetro de orden. Aquí comenzaremos por estudiar el estado fundamental del modelo de EA. Debido a que el desorden térmico no está presente a $T = 0$, la fase debería manifestarse en su estado más puro. Esto es lo que probablemente ha motivado los numerosos estudios topológicos del estado fundamental [Binder and Young 1986].

Nuestro punto de partida será el concepto de *red diluida* de enlaces [Vogel *et al.* 1994, 1995]. En la primera sección de este capítulo estudiaremos esta red y su posterior evolución, la *red rígida* de enlaces. Seguidamente, desarrollaremos un nuevo método numérico para determinar estas estructuras para grandes tamaños de red. Y por último, elaboraremos un análisis topológico del estado fundamental del modelo de EA basado en la nueva información obtenida.

3.1 La red diluida y la red rígida de enlaces

Si exploramos todas las configuraciones del estado fundamental de una muestra (del modelo de EA), podemos determinar que existen enlaces que nunca se frustran o, lo que es lo mismo, siempre están satisfechos. Llamaremos a esta red, *red diluida* de enlaces (RD) [Vogel *et al.* 1994, 1995]. Por supuesto, este comportamiento es igualmente observado en enlaces F como AF. Si $x = 0$ tenemos una muestra ferromagnética con sólo dos estados fundamentales, para los cuales todos los enlaces F estarán satisfechos y la RD será idéntica a la red de enlaces de la muestra. Lo mismo sucede en el otro extremo de concentración para una muestra antiferromagnética. Para una dada $x \in (0,1)$, la degeneración en el límite termodinámico es distinta de cero (ver capítulo 2), lo que implica que todos los enlaces de la red no pueden estar siempre satisfechos. De hecho, para algunas concentraciones la estructura de la RD se torna compleja, dividiéndose en islas de

diferentes tamaños. En la última sección de este capítulo analizaremos en detalle la red diluida.

Para una red cuadrada de N espines, definimos un parámetro h como

$$h = \frac{N_{ES}}{2N}, \quad (3.1)$$

donde N_{ES} es el número de enlaces siempre satisfechos del GM. Esta cantidad expresa simplemente la fracción de la red que pertenece a la RD sin dar mayor información sobre su estructura. Alternativamente podemos escribir dos definiciones equivalentes a (3.1):

$$h = \frac{1}{2N} \sum_{(i,j)} \left\{ \left[\sum_{\omega}^G \frac{|J_{i,j} - \sigma_i^{\omega} \sigma_j^{\omega}|}{2} \right] \text{div } G \right\} \quad (3.2)$$

y

$$h = \frac{1}{2N} \sum_{(i,j)} \delta \left(0, \sum_{\omega}^G \delta \left(1, J_{i,j} \sigma_i^{\omega} \sigma_j^{\omega} \right) \right). \quad (3.3)$$

Aquí, σ_i^{ω} es el estado del espín i -ésimo en ω , una de la G configuraciones del GM. En (3.2), la suma dentro de los corchetes se efectúa para un único enlace J_{ij} y corre sobre todos los estados del fundamental, para los cuales se calcula un valor absoluto. Si la suma da como resultado un valor igual a G , entonces ese enlace pertenece a la RD y debe ser considerado. Esto último se logra realizando una división entera (div). Por otro lado, si el enlace se frustra al menos una vez, entonces la suma es menor que G y la división entera igual a cero. En la otra definición (3.3) se hace uso de la delta de Kronecker:

$$\delta(k,l) = \begin{cases} 1 & \text{si } k = l \\ 0 & \text{si } k \neq l \end{cases}. \quad (3.4)$$

Como antes, la suma interna se realiza para un único enlace J_{ij} y corre sobre los estados del fundamental, para los cuales se determina el valor de δ . Esta suma es cero sólo si el enlace nunca se frustró. Por lo tanto, como la segunda delta de Kronecker compara este valor contra cero, la suma exterior será igual al número total de enlaces de la RD.

Analicemos ahora RD para una concentración $x = 0,5$. Más tarde, nos preocuparemos por describir la forma de acceder numéricamente a esta información. La figura 3.1 representa la red diluida de la misma muestra que fue tomada como ejemplo en la sección 1.3 (figura 1.3). Podemos apreciar que la misma está constituida por la mitad de los enlaces de la red ($h = 64 / 128 = 0,5$), repartidos aproximadamente en iguales proporciones entre F (31) y AF (33). Estructuralmente está formada por tres islas, una de las cuales sobresale, conteniendo el 82,8 % de enlaces de la RD. Todas las características anteriores, la hacen una muestra típica para la concentración $x = 0,5$.

Las islas de la RD permiten asegurar que, el conjunto de espines que vinculan, mantendrán sus orientaciones relativas inalteradas a lo largo de todas las configuraciones del GM. Es decir, cada isla establece una correlación muy fuerte entre algunos de los espines del sistema (entre sólo los que pertenecen a ella). Ese mismo tipo de vínculo también puede ser proporcionado por un enlace que *siempre esté frustrado* (en todo el GM). De hecho, a la RD tomada como ejemplo, se le puede agregar tres enlaces más con esta característica. La figura 3.2 muestra con línea punteada la inclusión de los mismos. Es fácil ver que, a pesar de haber hecho esta incorporación, el conjunto de espines vinculados por cada isla no ha cambiado. En todas las muestras estudiadas en este trabajo (en todo el rango de concentración), no se pudo encontrar ningún ejemplo en el que no sucediera esto.

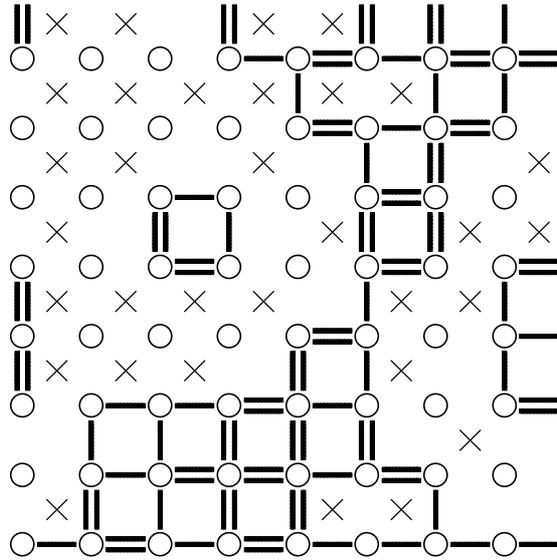


Figura 3.1. Red diluida de la muestra de la figura 1.3, formada por 64 de un total de 128 enlaces: $h = 0,5$. Las cruces marcan aquellas plaquetas que son curvas.

Sin embargo, como queremos establecer cuáles son las islas de espines fuertemente ligados, formalmente es necesario considerar estos nuevos enlaces. Por otro lado, cabe la posibilidad de que esta inclusión sea fundamental para tratar mayores tamaños de red o distintas geometría (ver sección 3.3). Esto será más evidente en el próximo capítulo cuando definamos un nuevo parámetro de orden.

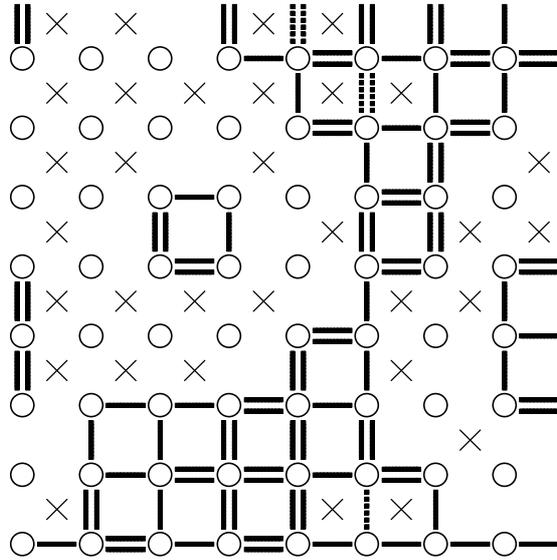


Figura 3.2. Red rígida de la muestra de la figura 1.3, formada por 67 de un total de 128 enlaces: $h_r \approx 0,523$. Los enlaces punteados son aquellos que están siempre frustrados.

Llamaremos a la red formada por todos los enlaces siempre satisfechos más los siempre frustrados, *red rígida* de enlaces (RR). Al igual que para la RD, definimos un parámetro h_r , que representa la fracción de enlaces de la red que pertenecen a la RR:

$$h_r = \frac{N_{ES} + N_{EF}}{2N}. \quad (3.5)$$

En la ecuación anterior N_{EF} es el número de enlaces siempre frustrados. Como antes, podemos escribir dos definiciones equivalentes a (3.5):

$$h_r = \frac{1}{2N} \sum_{(i,j)} \left\{ \left[\sum_{\omega} \frac{|J_{i,j} - \sigma_i^{\omega} \sigma_j^{\omega}|}{2} \right] \text{div} G + \left[\sum_{\omega} \frac{|J_{i,j} + \sigma_i^{\omega} \sigma_j^{\omega}|}{2} \right] \text{div} G \right\} \quad (3.6)$$

y

$$h_r = \frac{1}{2N} \sum_{(i,j)} \left\{ \delta \left(0, \sum_{\omega} \delta \left(1, J_{i,j} \sigma_i^{\omega} \sigma_j^{\omega} \right) \right) + \delta \left(0, \sum_{\omega} \delta \left(-1, J_{i,j} \sigma_i^{\omega} \sigma_j^{\omega} \right) \right) \right\}. \quad (3.7)$$

Las ecuaciones anteriores pueden ser explicadas de igual forma que (3.2) y (3.3).

De acuerdo a las definiciones (3.2), (3.3), (3.6) y (3.7), para determinar h o h_r (la RD o la RR), debemos visitar todos los estados del GM. Al igual que en el cálculo exacto de entropía, EFIS es capaz de realizar esta tarea eficientemente para N pequeño. En la próxima sección, veremos que la exploración exhaustiva del estado fundamental no es necesaria para determinar la RD o la RR. Este será el punto de partida de un nuevo método que nos permitirá estudiar redes de mayor tamaño.

3.2 El método de exploración dirigida del nivel fundamental

Cuando fue propuesto el concepto de red diluida [Vogel *et al.* 1994], se pudo determinar que, para $x = 0,5$, la tendencia hacia el límite termodinámico era $h = 0,5$. Es decir, la mitad de los enlaces pertenecen a la RD. La figura 3.3 muestra el resultado obtenido para redes rectangulares de hasta 64 espines.

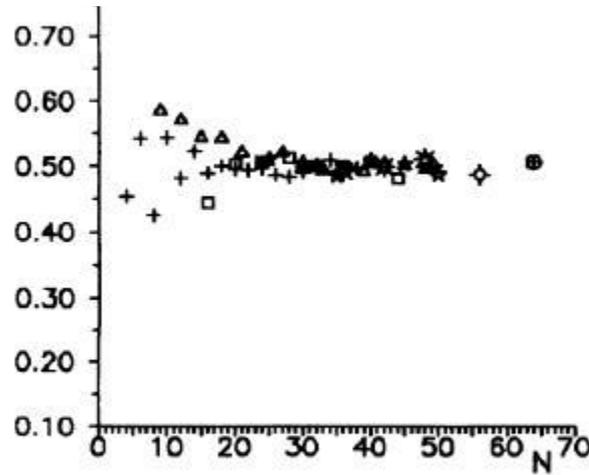


Figura 3.3. Parámetro h calculado exactamente para muestras rectangulares de tamaños $N = L_1 \times L_2$ entre $N = 4$ y $N = 64$. Cada tipo de símbolo representa los resultados obtenidos para un valor fijo de L_1 , y diferentes L_2 sin sobrepasar los 64 espines [Vogel *et al.* 1994].

Podemos apreciar que h converge suficientemente rápido como para asegurar el valor límite de 0,5. En este caso, pareciera ser innecesario realizar un esfuerzo por estudiar redes de mayor tamaño. Sin embargo, tenemos que considerar que el parámetro h no da mucha información estructural de la RD. Para la mayoría de las concentraciones, la red diluida se encuentra fraccionada en clusters de diferentes tamaños. La fracción de enlaces de la isla mayor, por ejemplo, es una cantidad que no converge incluso para $N = 256$, el mayor tamaño red para el que hemos calculado la RD. Para dar este salto en tamaño, fue necesario idear una nueva estrategia.

Ya en el capítulo 2, nos enfrentamos con el problema de determinar la degeneración del GM (o la entropía) para grandes tamaños de red. Como vimos, al

aumentar N el número total de estados crece exponencialmente, por lo que no es posible visitar cada uno de ellos. Para resolver este inconveniente, recurrimos a un método indirecto (el TIM) para calcular la entropía del GM. Ahora nos enfrentamos a un problema similar. De acuerdo a las definiciones de h y h_r , es necesario visitar *todos* los estados del fundamental, para determinar si un enlace está siempre satisfecho o siempre frustrado. Sin embargo, como el número total de enlaces es $2N$, debería existir un conjunto reducido de *configuraciones relevantes*, a las que bastaría con visitar para discriminar la estructura completa de la RD o la RR. Es decir, cada enlace que es desechado de la red diluida, debe estar frustrado en al menos una configuración del GM (la que es tomada como una configuración relevante). Si en una muestra son $2N - N_{ES}$ los enlaces que alguna vez se frustran entonces, no más de este número de configuraciones deberían ser suficientes para discriminar RD.

El razonamiento anterior sirve para estimular los esfuerzos por encontrar técnicas que sean capaces de visitar selectivamente las configuraciones del sistema, dando mayor prioridad a los estados relevantes. En este trabajo hemos diseñado un algoritmo de este tipo al que hemos llamado, *método de exploración dirigida* del nivel fundamental (MED) [Ramirez-Pastor *et al.* 2004]. Para entender sus fundamentos, tomemos como ejemplo para calcular la RD, una metodología de búsqueda totalmente *azarosa*, que sería el algoritmo más *ineficiente* que podemos diseñar. Supongamos que partimos desde una configuración tomada al azar y posteriormente permitimos que el sistema evolucione hacia el estado fundamental (mediante algún algoritmo de minimización de la energía). Una vez que llegamos a una configuración del GM, podemos determinar cuantos enlaces están satisfechos. Lo único que podemos asegurar es que la RD estará contenida en este conjunto. Si a continuación permitimos que el sistema explore (al azar o sistemáticamente, pero sin costo de energía) el GM, podremos ir descartando aquellos enlaces que al menos una vez se observen frustrados. El inconveniente que surge en este último paso es que, para una determinada dinámica de evolución, no todos los estados del fundamental serán accesibles. Si el mecanismo para explorar es del tipo spin flip (efectuado sin cambiar la energía del sistema), entonces el GM quedará dividido (desde el punto de vista de la dinámica) en conjuntos disjuntos, cada uno de ellos denominado LEG (Local Ensemble of Ground states) [Ramirez-Pastor *et al.* 2000]. Por lo tanto, el derrotero por el estado fundamental, sólo nos permite visitar una fracción de estados del mismo. Si esta muestra de configuraciones es representativa, habremos determinado la RD de un único LEG. Por supuesto, la red diluida del GM es la intersección de todas las RDs de cada uno de los LEGs. De allí que, para lograr nuestro objetivo siguiendo esta búsqueda azarosa, debemos repetir innumerables veces el proceso anterior. Una optimización considerable de la metodología esbozada para calcular la RD, es el algoritmo EFIS [Vogel *et al.* 2002]. Esta nueva técnica ha demostrado ser muy eficiente para determinar dicha estructura hasta muestras de $N = 81$ espines.

Debido a que el número de LEGs crece con el tamaño de red (sin que se halla determinado aún si es en forma exponencial o potencial [Vogel *et al.* 2002]), la búsqueda a partir de estados generados al azar (o por *expansión* como en EFIS), no permite realizar grandes progresos. Aunque no es necesario visitar todos los LEGs para discriminar cuál es la RD (también existe un conjunto de LEGs relevantes), puede suceder que aquellos que son realmente importantes sean muy difíciles de encontrar debido a su poca extensión. Para solucionar este inconveniente debemos implementar una búsqueda selectiva. Una vez que realizamos una primera incursión y exploración del GM como la descrita en el párrafo anterior, nos quedamos con la RD del LEG al cual arribamos. Este es nuestro *prototipo* de red diluida (RDP) y lo único que sabemos es que en ese conjunto hay enlaces que no forman parte de la red diluida real. Para discriminar cuáles son los que sobran en la RDP, podemos indagar a cada uno de ellos, partiendo del supuesto de que efectivamente pertenecen a la RD. Comenzamos fijando la orientación de los dos espines que vincula uno de tales enlaces de la RDP, para que el mismo permanezca frustrado en todo

momento (paralelos para un enlace AF y antiparalelos para un F). Entonces, si el enlace realmente pertenece a la RD, nunca podremos alcanzar el GM minimizando la energía del sistema. Por otro lado, si no pertenece a la RD, entonces no debería existir problema para llegar al estado fundamental manteniendo dicha frustración. Esta simple metodología, nos permite buscar los enlaces de la RD de entre aquellos de la RDP probando cada uno de ellos. Es decir, descartaremos aquellos que al ser mantenidos frustrados permiten el acceso al GM (por supuesto, si el enlace no pertenece a la RD, esta metodología nos llevará a visitar un nuevo LEG). El proceso descrito, corresponde al método de exploración dirigida del nivel fundamental.

Por supuesto, la metodología anterior puede ser implementada usando diferentes tipos de mecanismos de minimización de energía. Sin embargo, es importante destacar que hay dos condiciones que deben cumplirse. En primer lugar, el algoritmo usado para minimizar la energía, debe permitirnos alcanzar siempre el GM. En la práctica esto sucede hasta un cierto tamaño de red. En particular en este trabajo, hemos empleado el mismo tipo de simulación de MC usada para calcular la energía y entropía del estado fundamental (capítulo 2). Por otro lado, anteriormente hemos supuesto que es posible explorar un dado LEG y de allí determinar su RD (que luego tomamos como RDP). En la práctica, usando una dinámica de spin flip, este objetivo se alcanza rápidamente y sin inconvenientes, ya que una fracción muy pequeña de configuraciones de un LEG son relevantes para el cálculo de la red diluida. Por ello, nosotros hemos empleado una exploración de los LEGs, que consiste simplemente en cambiar el estado de los espines libres del sistema, los cuales son seleccionados al azar. Denominaremos a este proceso, *invasión* del LEG (una exploración sistemática del LEG es también posible [Vogel *et al.* 2002]). En lo que sigue, se exponen los pasos del algoritmo completo usado en este trabajo para calcular la RD de una dada muestra mediante el MED.

- 1- Se elige una configuración al azar de espines.
- 2- Con una dinámica de tipo Glauber, se disminuye la temperatura hasta alcanzar una configuración del nivel fundamental (se llega a un LEG).
- 3- Se registra la RDP incorporando todos los enlaces de la red que están satisfechos.
- 4- Se invade el LEG una dada cantidad de tiempo de MC, cambiando el estado de los espines libres que son seleccionados al azar. En cada uno de estos pasos se corrige la RDP, es decir, todo enlace que pertenece a la RDP se elimina si es observado frustrado al menos una vez.
- 5- Posteriormente, elegimos un enlace al azar J' que pertenezca a la RDP calculada en el punto anterior.
- 6- Se elige nuevamente una configuración al azar. Luego, si es necesario, se modifica la orientación de uno de los dos espines que vincula J' , procurando que el enlace quede frustrado.
- 7- Manteniendo fija la orientación de los dos espines conectados por J' , se disminuye nuevamente la temperatura tratando de acceder al GM.
- 8- Si arribamos efectivamente al GM, se descarta la posibilidad de que J' pertenezca a la RD. Decimos que el enlace J' ha sido *descartado*. Posteriormente, se *liberan* los dos espines conectados por J' y se procede a invadir el nuevo LEG corrigiendo a la vez la RDP.
- 9- Si en cambio no llegamos al GM (quedamos en un estado excitado), asumimos que J' pertenece a la RD. Decimos que el enlace J' ha sido *verificado*.
- 10- Si aun existen enlaces de la RDP que no han sido ni verificados ni descartados, se elige uno nuevo al azar y se regresa al punto 6.
- 11- En cambio, si todos los enlaces de la RDP ya han sido indagados, se construye la RD con todos los que fueron verificados.
- 12- Termina el código.

La técnica anterior puede usarse también para calcular la RR. Simplemente debemos realizar unas modificaciones. La red rígida prototipo (RRP), se formará con la RDP mas los enlaces siempre frustrados. Si el enlace seleccionado J' de la RRP está satisfecho, entonces procedemos como antes. Sin embargo, si esta frustrado, elegimos los dos espines que vincula para que permanezca satisfecho en todo momento (paralelos para un enlace F y antiparalelos para un AF). El resto del algoritmo es igual.

Al aumentar el tamaño de red, se hace cada vez más difícil acceder al estado fundamental. Por ejemplo, para $N = 256$, es necesario intentar varias veces para conseguir finalmente tocar el GM. Esto se debe a que a la dinámica de Glauber (del tipo spin flip) le es difícil escapar de estados metaestables próximos al fundamental cuando el tamaño crece. Para realizar cálculos hasta $N = 256$, se efectuó una mejora al MED en el punto 9):

- 9- Si en cambio no llegamos al GM (quedamos en un estado excitado), reintentamos nuevamente el mismo proceso, partiendo desde el punto 6- con el mismo enlace. Si luego de n_i repeticiones no hemos conseguido llegar al GM, asumimos que J' pertenece a la RD. Decimos que el enlace J' ha sido *verificado*. Por otro lado, si en algún intento logramos llegar al GM, entonces inmediatamente procedemos como en el punto 8-.

Como vemos, hemos introducido un nuevo parámetro que permite compensar, al menos probabilísticamente, la dificultad en el acceso al GM. En la próxima sección veremos los resultados obtenidos con esta metodología. También, analizaremos los vínculos entre la RD y la RR, así como la estructura interna de dichas redes.

3.3 Análisis topológico de la red diluida y la red rígida de enlaces

En la sección anterior hemos descripto el MED, el cual permite calcular la RD o la RR de una muestra del modelo de EA. Debido a que en el proceso usamos simulación de MC, los parámetros que debemos considerar son: los tiempos r_0 y r , las temperaturas inicial T_i y final T_f , así como la cantidad de estados de equilibrio entre ellas n , y el número de reintentos n_i . Como no deseamos obtener la entropía usando TIM, no es necesario calcular la energía para los estados intermedios ni partir de $T_i = \infty$. En su lugar, debemos arribar lo más rápido posible al GM. Ya que los inconvenientes se incrementan al aumentar el tamaño de red y al acercarnos a $x = 0,5$, también lo hacen algunos de los parámetros anteriores. Dejando fijas las temperaturas extremas en $T_i = 5$ y $T_f = 0,25$, elegimos los valores más adecuados de r (tomando siempre $r_0 = r$), n y n_i , para cada tamaño de red y para cada concentración. El caso más oneroso tratado aquí, $N = 256$ espines a $x = 0,5$, requirió de $r = 200$, $n = 30$ y $n_i = 50$ para completar 2.000 muestras en un tiempo aproximado de 1 mes, en cuatro procesadores Pentium III de 500 MHz. Hay que considerar que, para cada muestra, es necesario verificar aproximadamente N enlaces y descartar otros tanto (probando n_i veces). De allí que el número de incursiones sea del orden de $N n_i$, un valor de 12.800 en nuestro por caso. Veremos al final de este trabajo de tesis, que una serie de mejoras pueden introducirse en el futuro, para verificar más rápidamente los enlaces de la RD.

Comencemos por analizar cualitativamente los resultados obtenidos. Al igual que la figura 3.2, las figuras 3.4, 3.5 y 3.6 representan algunos ejemplos de redes diluidas y rígidas para muestras de diferentes concentraciones de enlaces AF. Como vimos en la sección 3.1 en los dos casos extremos (la muestra ferromagnética y la antiferromagnética), todos los enlaces pertenecen a la RR, la cual es idéntica a la RD (ver figura 3.4) y $h = h_r = 1$. Sin embargo, cuando aumentamos la concentración a partir de $x = 0$ (o la disminuimos a partir de $x = 1$), la RR comienza a deteriorarse perdiendo algunos de sus enlaces. Esto se puede apreciar al comparar las figuras 3.4 y 3.5. Esta última, muestra tres ejemplos de redes que están dentro de un rango aproximado de concentración de (0 - 0,1). Podemos apreciar que ahora la RR no es igual a la RD, ya que aparecen enlaces siempre frustrados

que, casi en su totalidad, son AF. También debemos observar que, para este pequeño tamaño de red, la RR forma una única estructura conectada. En el próximo capítulo veremos que, en este rango de concentración, el sistema experimenta una transición ferromagnética que se extingue a aproximadamente $x = 0,1$.

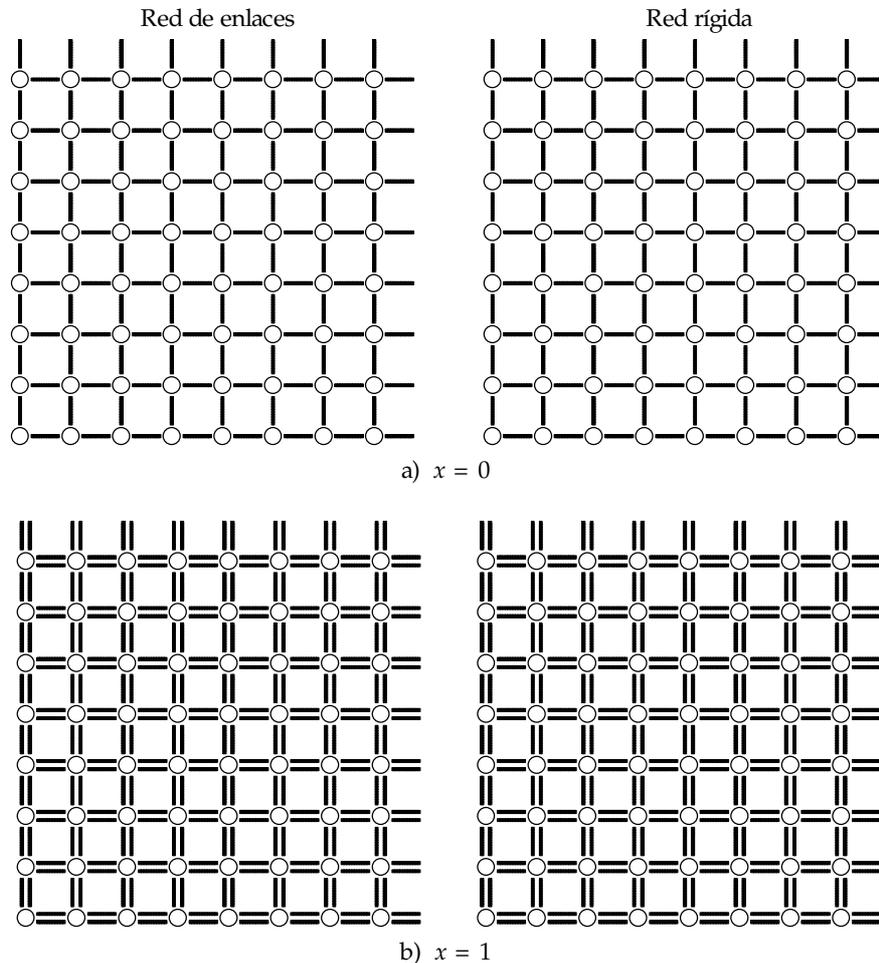


Figura 3.4. Muestras de concentración $x = 0$ (ferromagnética) y $x = 1$ (antiferromagnética) con su red rígida asociada. Notemos que la RR es idéntica a la RD y que $h = h_r = 1$.

Si seguimos aumentando la concentración observamos que aparecen cambios importantes (ver figura 3.6). El más notorio es el rápido fraccionamiento de la red rígida en islas de diversos tamaños. Para todas las concentraciones mostradas, los enlaces siempre satisfechos o siempre frustrados de estas islas, unen diferentes grupos de espines. Es decir, cada región conectada de la RR vincula a un conjunto de espines fuertemente ligados que *mantienen fijas sus orientaciones relativas* (en el GM). La importancia de estos vínculos tomará relevancia en el próximo capítulo, cuando intentemos describir una posible fase ordenada en el modelo de EA.

Podemos apreciar también que, los enlaces siempre frustrados tienen una participación despreciable en la formación de estas estructuras. De hecho, analizando las figuras 3.4, 3.5 y 3.6 podemos ver que, aunque no consideremos estos enlaces, es posible determinar el conjunto de espines fuertemente ligados. En pocas palabras, los conjuntos vinculados por la RR y la RD son exactamente iguales (isla a isla). Esto implica que *todo espín ligado por un enlace siempre frustrado, debe poseer otro vínculo a través de un enlace siempre satisfecho*. La afirmación anterior es fácil de demostrar y es válida para la red cuadrada. Si uno de los enlaces en el entorno de un espín está siempre frustrado, necesariamente los otros tres enlaces deben estar siempre satisfechos. De otra forma, un sólo enlace

satisfecho y tres frustrados (o los cuatro frustrados) implicaría un estado excitado (contradiciendo el hecho de que estamos en el GM), y dos enlaces satisfechos con dos frustrados, aunque posibles en el GM, darían vida a un espín libre que evidentemente no puede tener un enlace siempre frustrado. Por lo tanto, los espines vinculados por un enlace siempre frustrado a la RR, también lo están a la RD (por medio de los otros tres enlaces siempre satisfechos).

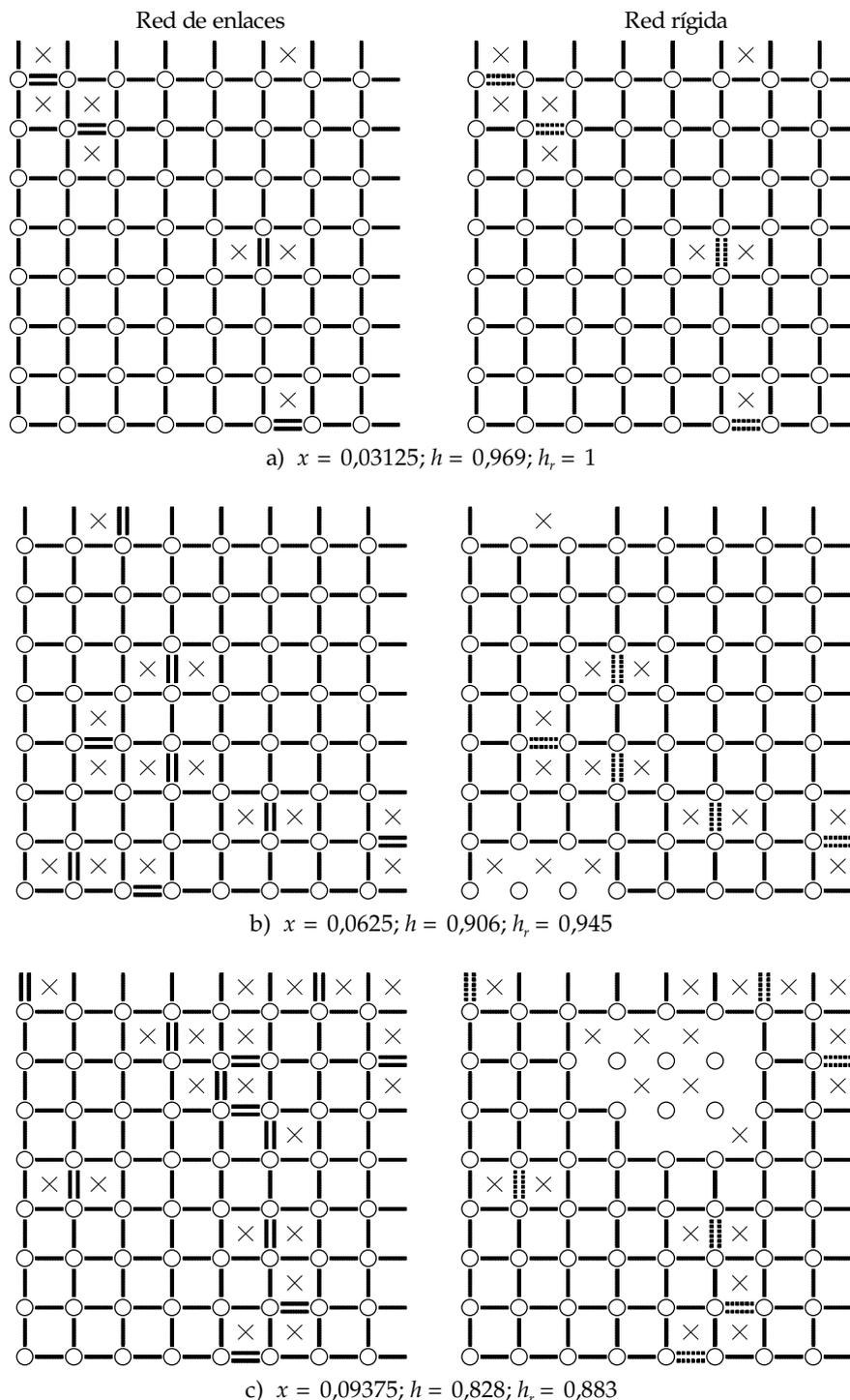


Figura 3.5. Muestras de concentración $x = 0,03125$, $x = 0,0625$ y $x = 0,09375$, con su red rígida asociada. Los enlaces punteados son aquellos que están siempre frustrados. Notemos que ahora la RR y la RD son diferentes pero siguen vinculando al mismo conjunto de espines.

Aunque esto completa nuestra demostración para la red cuadrada de sitios, debemos tener en cuenta que lo anterior depende de la conectividad del sistema. A pesar de que la regla sigue valiendo para una red hexagonal, para una triangular o una cúbica existe la posibilidad de que la RR vincule a un número mayor de espines que la RD.

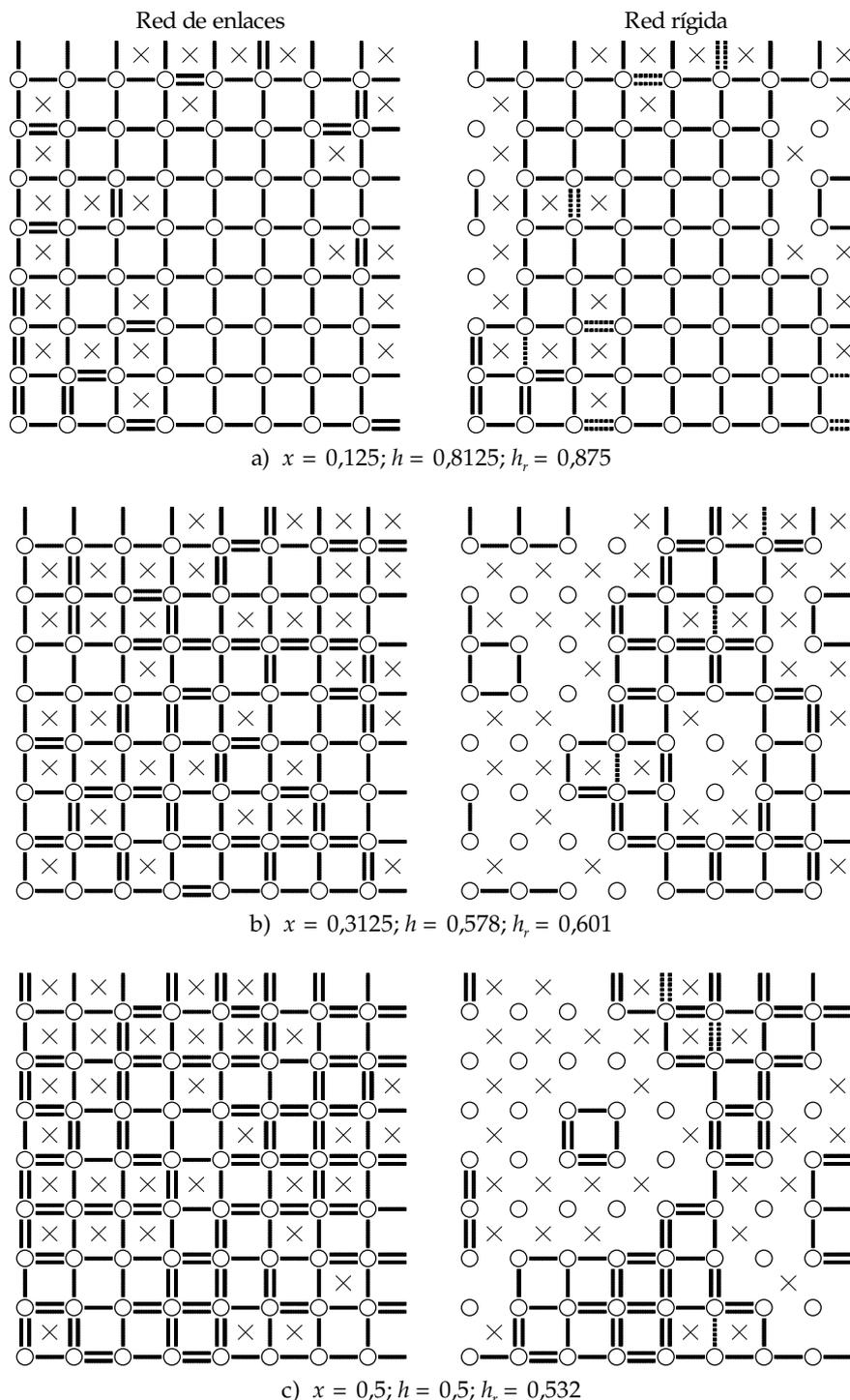


Figura 3.6. Muestras de concentración $x = 0,125$, $x = 0,3125$ y $x = 0,5$ con su red rígida asociada. Los enlaces punteados son aquellos que están siempre frustrados. Notemos que la RR se encuentra fraccionada en islas.

Otra característica importante de la RR (para una red cuadrada) es que, todos los enlaces siempre frustrados forman una estructura inconexa y se encuentran dispersos en toda la red. La explicación de ellos es que *no es posible tener un espín con dos enlaces siempre frustrados*. Como antes, esto implicaría tres posibilidades: que los otros dos enlaces estén

frustrados, que sólo uno de ellos lo esté o que ambos estén satisfechos. En los dos primeros casos estaríamos en un estado excitado y en el último tendríamos un espín libre, contradiciendo cada uno de estos casos el hecho de que estamos en el GM y que dos de los enlaces están siempre frustrados.

Realicemos ahora un análisis cuantitativo. Para ello definimos los parámetros h_{im} y h_{rr} como, la fracción de enlaces de la red que pertenecen, respectivamente, a la isla mayor de la RD y a la isla mayor de la RR. Por otro lado, también tendremos en cuenta el mayor conjunto de espines *solidarios*, es decir, aquellos que mantienen fijas sus orientaciones relativas en el GM. Para una red de N espines, definimos la fracción p [Vogel *et al.* 1994] como

$$p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\{ \left[\sum_{\omega}^W |\sigma_i^{\omega}| \right] \text{div} W \right\}, \quad (3.8)$$

donde la suma interior se efectúa sobre $W = G/2$ configuraciones del GM. La elección del conjunto W implica una separación ergódica del estado fundamental que puede realizarse de diferentes maneras. Como deseamos conocer la mayor fracción de espines solidarios, nos quedaremos con aquella división del GM que maximice p . Sin embargo, en este trabajo hemos tomado otro camino para estimar el valor de dicho parámetro. De acuerdo a lo discutido anteriormente, es lógico suponer que la isla mayor de la RR vincula al máximo número posible de espines solidarios. Si esto es correcto, podemos calcular p con posterioridad a la determinación de la red rígida o la red diluida. De hecho, esta ha sido la metodología seguida en el presente trabajo. Sin embargo, la suposición anterior no es correcta. Para ser precisos, la fracción de espines que vincula la RR es una cota inferior del valor real de p .

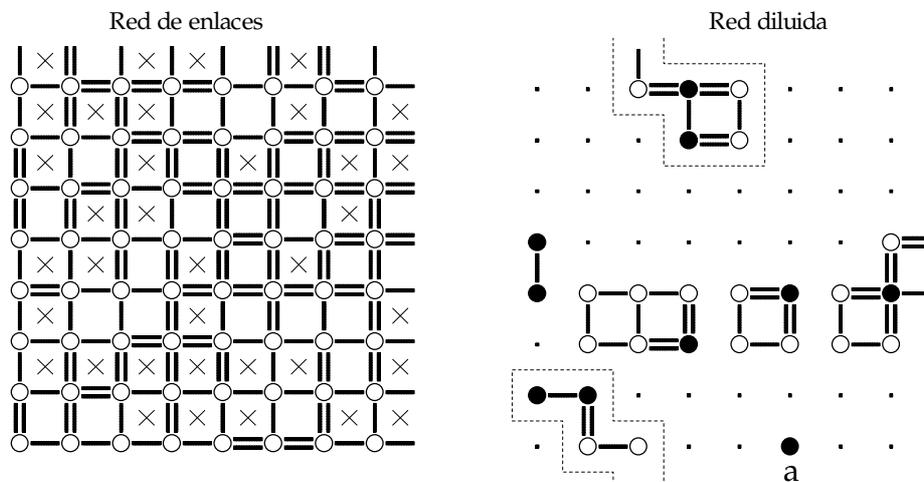


Figura 3.7. A la izquierda, muestra de $N = 64$ espines y $x = 0,5$. A la derecha se puede observar la RD. Los puntos representan los sitios y los círculos los estados de espín en el GM (los círculos negros corresponden a un estado de espín opuesto al de los blancos). El espín señalado con **a** permanece solidario a la isla mayor (delimitada con trazo punteado).

La figura 3.7 es un ejemplo adecuado que nos servirá para corroborar la afirmación anterior. Notemos que la muestra elegida posee una RD fraccionada en 4 islas, de las cuales predomina una de 9 espines (delimitada con línea punteada). Los puntos son los sitios de la red y los círculos los espines vinculados por cada isla. Estos últimos se encuentran pintados de negro y blanco, para representar los dos posibles estados de espín. Por lo tanto, la figura 3.7 muestra para cada isla, una de las posibles orientaciones relativas de estos espines en el estado fundamental. De allí que el parámetro p debería valer $9/64$. Sin embargo, empleando el algoritmo EFIS y una separación ergódica basada en los LEGs,

se determinó que el espín señalado con la letra **a**, y a pesar de que ninguno de los enlaces de su entorno pertenecen a la RD, es solidario con aquellos espines ligado por la isla mayor. Para entender a que se debe este fenómeno, veamos la figura 3.8 que muestra las redes diluidas para cada uno de los cuatro LEGs que posee el sistema (es decir, los enlaces que permanecen satisfechos si restringimos los estados a cada LEG). La RD definitiva se formará por aquellos enlaces que pertenezcan a todas y cada una de dichas redes.

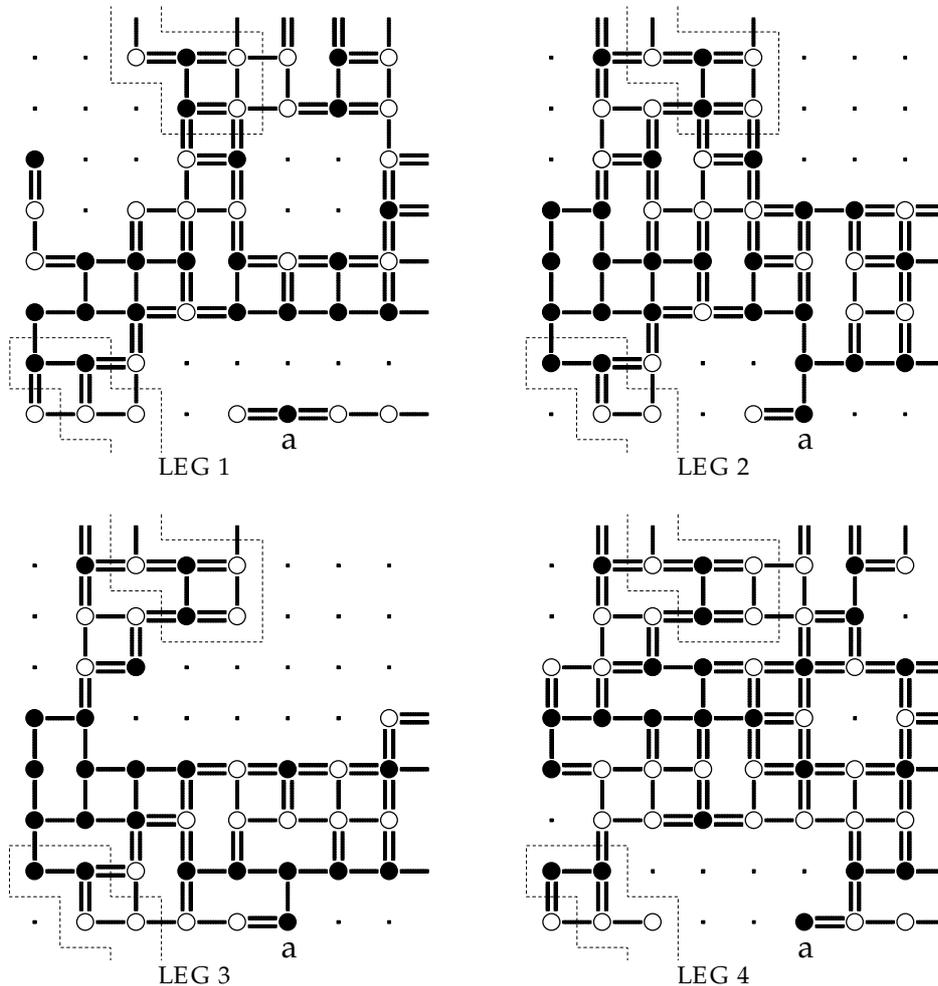


Figura 3.8. Redes diluidas para cada uno de los cuatro LEGs, de la muestra de la figura 3.7. Podemos apreciar que **a** siempre es solidario con los espines vinculados por la isla mayor.

Podemos apreciar que **a** siempre logra mantener un vínculo con los espines de la isla mayor. Aunque esta conexión es diferente de un LEG a otro, es suficiente para ligar su orientación (en relación a la isla mayor). Por lo tanto, el parámetro p tiene un valor de $10/64$, mayor que el calculado anteriormente.

A pesar de que estas dificultades existen, en la práctica p puede estimarse como la fracción de espines vinculados por la isla mayor de la RD sin cometer un grave error. De hecho, luego de comparar los resultados obtenidos con EFIS sobre 3.000 muestras entre $N = 16$ y $N = 81$, con los determinados en este trabajo con el MED, se encontró una única muestra (# 15) de tamaño $N = 64$ para la cual p poseía un valor mayor. Precisamente, la muestra del ejemplo anterior.

La figura 3.9 muestra un ejemplo de la dependencia de h , h_{im} , h_r , h_{rim} y p , con el tamaño de red N para muestras (300 para cada tamaño) de $x = 0,0833$ (concentración que está dentro del rango $0 - 0,1$). Notemos que todos los parámetros se estabilizan rápidamente, manteniéndose una diferencia apreciable de aproximadamente $0,007$ entre la fracción de enlaces de la RD y la correspondiente a su isla mayor (lo mismo sucede para la

RR). Debido a que $h \approx 0,856$, tenemos que menos del 1% de los enlaces de la RD no pertenecen a su isla mayor. Es decir, a estas concentraciones tan bajas, podemos pensar que la red diluida está formada por una única estructura compacta. De hecho, si adicionalmente consideramos la dependencia del número medio de islas N_{is} con el tamaño del sistema, figura 3.10, llegamos a la conclusión de que la región de la RD que no pertenecen a su estructura mayor, se encuentra diseminada en islas formadas por un número muy pequeño de enlaces.

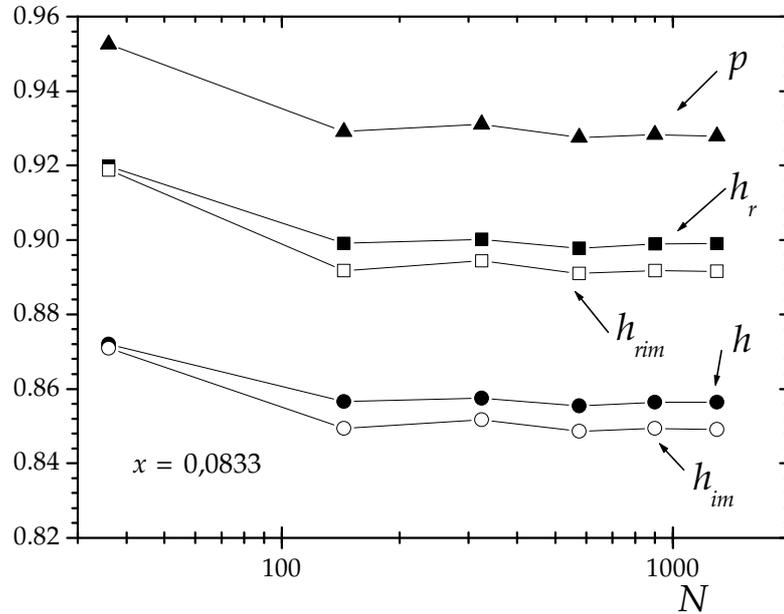


Figura 3.9. Dependencia de h , h_{im} , h_r , h_{rim} y p con el tamaño de red N , para muestras de concentración $x = 0,0833$.

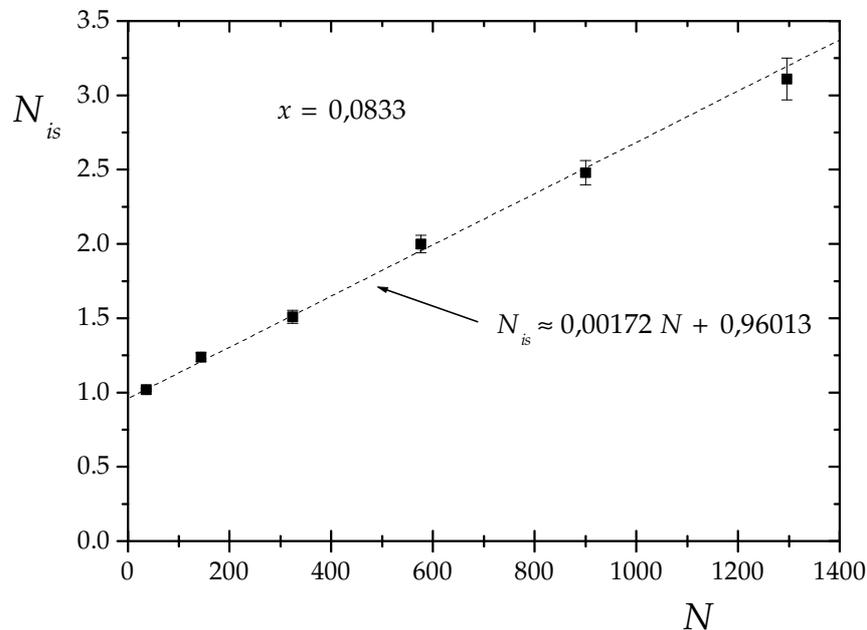


Figura 3.10. Número medio de islas de la RD y la RR como función del tamaño de red para una concentración $x = 0,0833$.

Una comportamiento diferente surge al analizar la estructura de la RD a $x = 0,5$. Al igual que las figuras anteriores, 3.11 y 3.12 muestran la dependencia con el tamaño de red de h , h_{im} , h_r , h_{rim} , p y N_{is} para esta concentración. Estos valores fueron obtenidos por medio del MED para un rango de $N = 16$ a $N = 256$ y 2.000 muestras para cada tamaño de red. Podemos observar que, a pesar de que la fracción de enlaces de la RD y la RR tienden

rápida a valores constantes ($h \approx 0,5$ y $h_r \approx 0,533$), el tamaño de sus islas mayores continúa decreciendo, al menos, hasta el mayor tamaño estudiado aquí. Lo mismo sucede con el parámetro p . Debemos tener en cuenta que, existe la posibilidad de que estas cantidades tiendan a cero en el límite termodinámico, lo que implicaría no sólo un fraccionamiento de la RD, sino la desaparición del cluster de tamaño infinito (isla mayor) que teníamos para bajas concentraciones de enlaces AF.

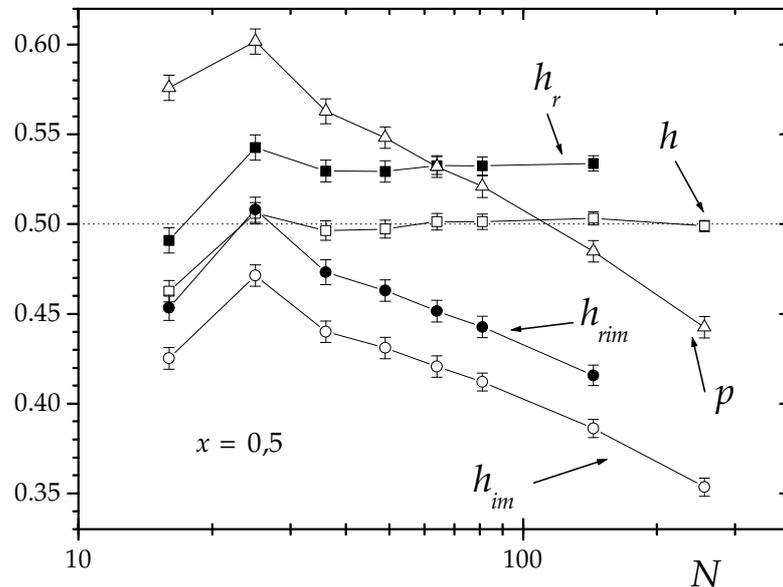


Figura 3.11. Dependencia de h , h_{im} , h_r , h_{rim} y p con el tamaño de red N , para muestras de concentración $x = 0,5$.

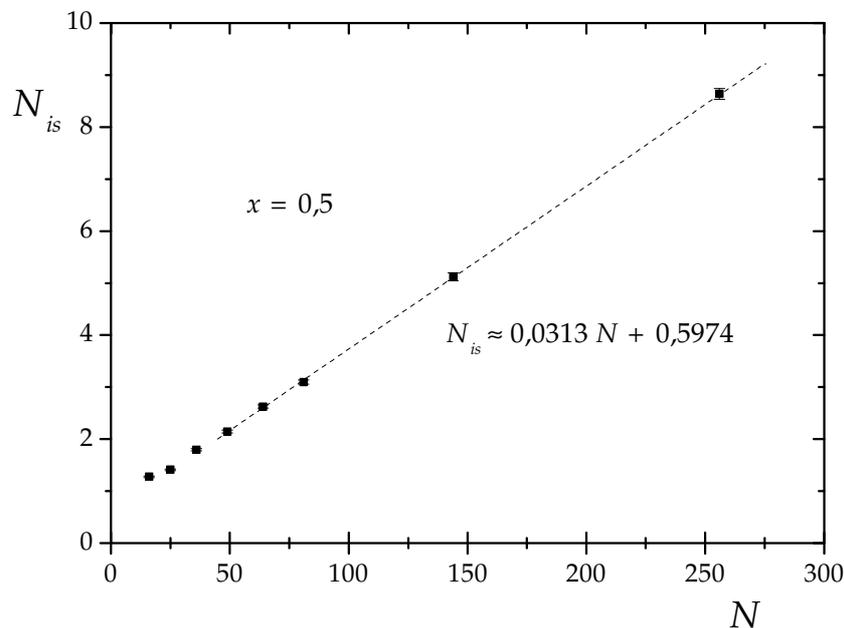


Figura 3.12. Número medio de islas de la RD y la RR como función del tamaño de red para una concentración $x = 0,5$.

Finalmente, consideramos un posible comportamiento de h y h_{im} para todo el rango de concentración ($0 - 0,5$). La figura 3.13 muestra los valores precisos de estas cantidades para el rango aproximado ($0 - 0,1$) y para la concentración $0,5$. Las líneas punteadas son pura especulación y se basan en los resultados preliminares obtenidos en el rango completo de concentración. De acuerdo a toda la información analizada, podemos pensar que en el límite termodinámico y por debajo de $x = 0,1$, existe una isla mayor cuya dimensión lineal es igual a la del sistema, la cual se encuentra rodeada por infinitas islas de menor tamaño.

Al aumentar la concentración, esta estructura mayor probablemente desaparece y la RD (que aún existe pues $h > 0$) se fracciona en infinitas islas menores. Este comportamiento se manifiesta con una caída repentina a cero de h_m y un punto de inflexión de h (ver figura 3.13). Como veremos en el próximo capítulo, la estructura de la RD tiene una conexión muy estrecha con el comportamiento crítico del sistema.

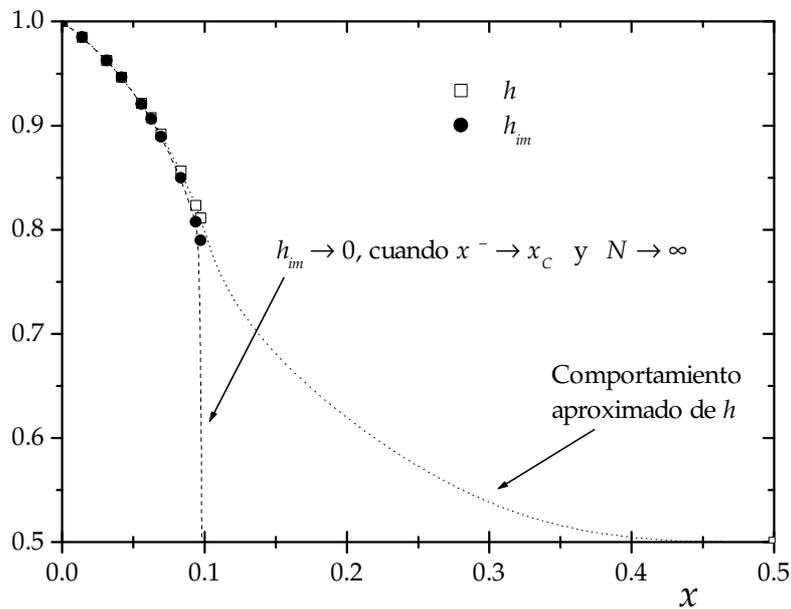


Figura 3.13. Dependencia de h y h_m con la concentración. Los puntos corresponden a cálculos de MC y las líneas son una especulación del comportamiento global de estas cantidades.

Capítulo 4

Comportamiento crítico del modelo de Edwards y Anderson $\pm J$

Cuando la temperatura disminuye por debajo de T_f , el sistema experimenta una transición que lo lleva a un estado de congelado, en el cual los momentos magnéticos se encuentran orientados aparentemente al azar. Por muchos años, este ha sido el único intento por describir la fase vidrio de espín. Como vimos anteriormente, los estudios topológicos muestran que existe un cierto grado de orden magnético en el nivel fundamental. Basándonos en esta información, en este capítulo comenzaremos proponiendo una nueva descripción de la fase a $T = 0$. Esto nos permitirá más tarde, definir un único parámetro de orden para todo el rango de concentración, cuya características serán evaluadas al estudiar la transición ferromagnética a bajas concentraciones. Posteriormente, analizaremos la posibilidad de que exista una transición continua a $x = 0,5$ y a una temperatura finita.

4.1 La fase termodinámica a $T = 0$

Cuando deseamos estudiar el comportamiento crítico de un sistema, usualmente el punto de partida que elegimos es la descripción de la fase. A partir de allí, podemos fácilmente definir una función que pueda ser usada como parámetro de orden. Afortunadamente, para las concentraciones extremas $x = 0$ y $x = 1$, el modelo de EA ha sido muy estudiado. Aunque la transición ferromagnética y la antiferromagnética comparten la misma universalidad, la estructura de la fase no es la misma para ambas y por ende los parámetros de orden son diferentes. Por un lado, sabemos que el ferromagnetismo se caracteriza por la alineación espontánea (con la misma orientación) de todos los espines cuando la temperatura es menor que la crítica. Intuitivamente, es fácil arribar a la conclusión de que en este caso la magnetización es el parámetro de orden adecuado. Por otro lado, en la transición antiferromagnética, la característica que sobresale es la alineación antiparalela entre los espines primeros vecinos. El parámetro de orden empleado usualmente, es la diferencia de magnetización entre las dos subredes (ver figura 1.4 a).

A pesar de que las fases ferromagnética y antiferromagnética aparentemente son diferentes, comparten un vínculo común que permite realizar una descripción unificada de tales fenómenos: en el estado fundamental todos los espines son solidarios. Es decir, encontramos que la totalidad de los espines poseen una orientación relativa que no cambia en los dos únicos estados del GM. Como vimos en el capítulo anterior, a pesar de la elevada degeneración del estado fundamental, a cualquier concentración existen conjuntos de espines que poseen esta misma propiedad. Evidentemente, desde este punto de vista podemos realizar una descripción completa de la fase en todo el rango de concentración. Más precisamente proponemos que, para cualquier concentración, *la fase está formada por islas de espines que son solidarios en el estado fundamental*. Como podemos apreciar, esta visión del problema permite analizar de la misma forma cualquier transición termodinámica que suceda en el modelo de EA. Cada muestra poseerá una fase constituida por espines que son solidarios entre sí, los cuales forman una estructura fraccionada en islas. A medida que el desorden se incorpore al sistema (aumentando la concentración a partir de cero), sólo algunos de los espines mantendrán el orden magnético, mediante una alineación entre primeros vecinos que será tanto ferromagnética como antiferromagnética.

Indudablemente, el punto de vista anterior, establece una generalización muy útil. Como veremos en las siguientes secciones, es posible definir adecuadamente un nuevo parámetro de orden para el estudio del comportamiento crítico en todo el rango de

concentración. Dicha función nos será de gran utilidad para estudiar la transición ferromagnética a bajas concentraciones y la que supuestamente existe a $x = 0,5$.

4.2 El parámetro de orden

Continuando con el razonamiento anterior, definiremos un nuevo parámetro de orden que permita pesar el daño causado por el desorden térmico en la fase termodinámica. Como sabemos, en la transición ferromagnética usamos como parámetro de orden la magnetización del sistema (m), usualmente normalizada al número total de espines. Esta función mide de alguna forma el deterioro de la fase. Si todos los espines están alineados, entonces $m = +1$ o $m = -1$, lo que indica un orden completo. Por otro lado, si la fase se desordena apreciablemente, $-1 < m < +1$, pudiendo incluso ser igual a cero (lo que indica un estado con un desorden total). Estas son cualitativamente las propiedades que un parámetro de orden debe tener para señalar adecuadamente la formación de la fase.

Más precisamente, en la sección 1.2, enunciamos las características que debe poseer una función para ser un buen parámetro de orden. Debido a que, como consecuencia de una transición continua el espacio fase se subdivide en componentes ergódicas, es evidente que una propiedad significativa que debería tener un parámetro de orden, es la habilidad de señalar unívocamente dichas componentes o estados termodinámicos, permitiéndonos discriminar entre las diferentes cuencas ergódicas. De acuerdo a esto, un espacio fase muy complejo puede requerir de un conjunto de observables o parámetros de orden, que cumplan con la propiedad enunciada anteriormente [van Enter and van Hemmen 1984]. Este podría ser nuestro caso al haber identificado la fase ordenada con los espines solidarios en el GM. De hecho, si consideramos que esta estructura se encuentra dividida en islas, podemos llegar a la conclusión de que posiblemente las cuencas ergódicas (de existir) se diferencien unas de otras, por medio de cada una de las diferentes orientaciones relativas entre las islas (notemos que cada isla tiene dos orientaciones en las que se puede ordenar). Es decir, si tenemos n islas, tendremos 2^n cuencas ergódicas posibles.

Consideremos una muestra arbitraria de una dada concentración. Si exploramos el estado fundamental, podemos determinar cuales son los espines que son solidarios entre sí y como se arreglan en islas. Para dar una descripción cuantitativa de lo expuesto anteriormente, consideremos el conjunto Λ_i al cual pertenecen todos los espines de la isla i -ésima. Una posible función ϕ_i (quizás la más simple) que determina el grado de orden de esta isla, se puede definir como

$$\phi_i = \frac{1}{N_i} \sum_{j \in \Lambda_i} \sigma_j^* \sigma_j, \quad (4.1)$$

donde N_i es el número de espines de dicha isla y σ_j la variable de espín del sitio j -ésimo. La función (4.1) constituye simplemente un promedio de las variables de espín, pesado por la constante σ_j^* , la cual toma los valores $+1$ o -1 de acuerdo a la orientación de dicho espín cuando la isla se encuentra ordenada en una de sus dos orientaciones posibles. Es decir, asignamos a los pesos σ_j^* los valores que toman las variables de espín en una de las dos orientaciones posibles de la isla (orientación que es elegida arbitrariamente para ser tomada como referencia). La función (4.1) así definida, indica el grado de orden de la isla en cualquier estado accesible del sistema. Cuando ϕ_i toma el valor $+1$ (-1), nos indica simplemente que los espines han recuperado la misma (opuesta) orientación que tenían en la configuración de la isla tomada como referencia.

Como ejemplo consideremos una muestra de $N = 64$ espines y concentración $0,5$. En la figura 4.1 podemos apreciar tanto la distribución espacial de enlaces como cada una de las tres islas que forman la fase. De acuerdo a lo discutido anteriormente, podemos definir tres funciones ϕ_1 , ϕ_2 y ϕ_3 , las cuales son capaces de acusar el grado de orden de

toda la fase. De hecho, en el estado fundamental tenemos únicamente $2^3 = 8$ posibles conjuntos de valores para estas funciones: $(+1,+1,+1)$, $(+1,+1,-1)$, $(+1,-1,+1)$, $(-1,+1,+1)$, $(+1,-1,-1)$, $(-1,+1,-1)$, $(-1,-1,+1)$ y $(-1,-1,-1)$, donde el paréntesis señala los valores (ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3) .

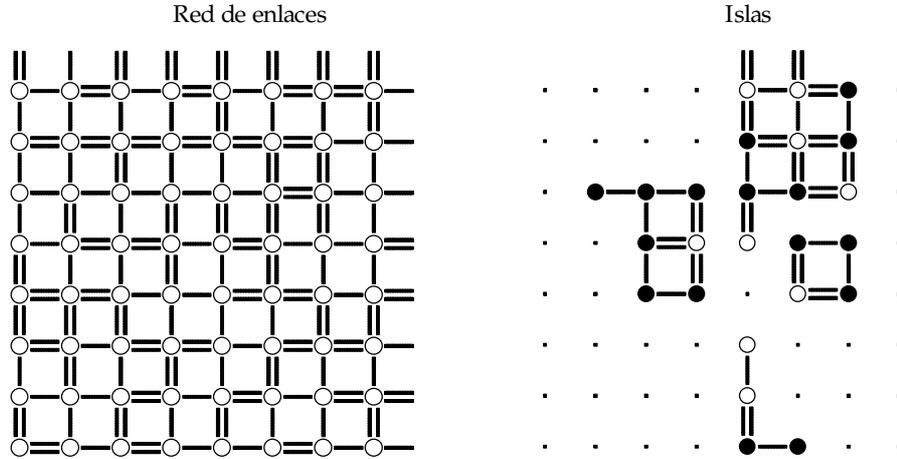


Figura 4.1. Muestra de concentración $x = 0,5$ cuya fase se encuentra dividida en tres islas. A la derecha, los círculos blancos y negros representan los dos posibles estados de espín.

Por supuesto, cuando la temperatura se eleva lo suficiente como para poblar los primeros estados excitados, las funciones ϕ_i toman valores distintos de ± 1 , acusando de esta forma el deterioro de la fase producido por el desorden térmico.

En la práctica, tener un conjunto de parámetros de orden para cada muestra no es lo más adecuado. Sin embargo, para realizar un estudio de tamaño finito, no necesitamos conocer exactamente en que cuenca ergódica nos encontramos. En su lugar, estamos interesados en una función que cambie de valor (de cero a uno) cuando pasamos del desorden total, a la fase completamente armada (sea cual sea la orientación de las islas entre sí). El siguiente parámetro de orden fue usado en este trabajo:

$$\Phi = \frac{1}{N_I} \sum_{i=1}^{n^{\circ} \text{ islas}} N_i |\phi_i|$$

$$\Phi = \sum_{i=1}^{n^{\circ} \text{ islas}} f_i |\phi_i|. \quad (4.2)$$

En la ecuación anterior,

$$N_I = \sum_{i=1}^{n^{\circ} \text{ islas}} N_i \quad (4.3)$$

es el número total de espines de la fase y

$$f_i = \frac{N_i}{N_I} \quad (4.4)$$

es la fracción de ellos que pertenecen a la isla i -ésima. Discutamos brevemente la forma de la función (4.2). En primer lugar, podemos apreciar que la misma incorpora el efecto de todos los ϕ_i , cada uno de ellos pesado por una constante que es proporcional al tamaño de la isla a la que pertenecen. Un promedio aritmético sin pesos incorporaría un

comportamiento no deseado. De hecho, si una isla es muy pequeña, los espines de la misma tendrían un efecto mayor sobre el parámetro de orden, que aquellos pertenecientes a una isla de gran tamaño. Por lo tanto, los pesos aseguran que cambios iguales en los espines de diferentes islas (por ejemplo, que el mismo número de espines cambien su orientación), repercutan de la misma forma en el parámetro de orden. Un análisis similar muestra que, definir el parámetro de orden como el producto de los ϕ_i , incorporaría el mismo tipo de problema. Por último, debemos destacar que en (4.2) hemos tomado el valor absoluto de ϕ_i . Esto permite que el parámetro de orden cambie entre cero y uno acusando la formación de la fase.

Una característica sobresaliente de la función (4.2), es que la misma se reduce a los parámetros de orden clásicos empleados para caracterizar las transiciones ferromagnética y antiferromagnética. De hecho, si todos los enlaces son F, tendremos una única isla y

$$\sigma_j^* = +1 \quad \text{para } j = 1, \dots, N. \quad (4.5)$$

Es decir, todos los espines formarán la fase y tendrán la misma orientación (en la ecuación anterior podríamos haber tomado la orientación opuesta, $\sigma_j^* = -1$ para todo j). Es fácil constatar que, el parámetro de orden (4.2), se reduce al valor absoluto de la magnetización del sistema por espín:

$$\Phi = |\phi_1| = \left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j \right| = |m|. \quad (4.6)$$

Por otro lado, si todos los enlaces son AF, tendremos también una única isla con

$$\begin{aligned} \sigma_j^* &= +1 & \text{para } j \in \text{subred 1} \\ \sigma_j^* &= -1 & \text{para } j \in \text{subred 2} \end{aligned} \quad (4.7)$$

De allí que el parámetro de orden sea

$$\Phi = |\phi_1| = \frac{1}{2} \left| \frac{2}{N} \sum_{j \in \text{subred 1}} \sigma_j - \frac{2}{N} \sum_{j \in \text{subred 2}} \sigma_j \right| = \frac{|m_1 - m_2|}{2}, \quad (4.8)$$

es decir, la diferencia de magnetización entre las dos subredes de espines.

Es necesario ahora realizar un análisis de la información reportada en la literatura en relación al parámetro de orden. Nuestro punto de partida es el *Reviews of Modern Physics* publicado en el año 1986 por Binder y Young [Binder and Young 1986]. A pesar que innumerables funciones han sido definidas, la mayoría de ellas son simplemente diferentes implementaciones del parámetro de orden de Edwards y Anderson [Edwards and Anderson 1975]. Originalmente, estos autores propusieron un parámetro de orden magnético (para una muestra) de la forma

$$q = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \langle \sigma_j \rangle_T^2, \quad (4.9)$$

donde N es el número total de espines del sistema y $\langle \dots \rangle_T$ representa un promedio térmico realizado a la temperatura T . Es fácil interpretar (4.9): los espines que mantengan una orientación definida la mayor cantidad del tiempo que emplea el sistema cuando recorre su trayectoria en el equilibrio, tendrán un aporte importante a dicha función. Es decir, este

parámetro de orden debería tener un valor apreciable en un estado de freezing. A pesar de que un análisis cuidadoso demuestra que (4.9) no satisface los requisitos para ser un buen parámetro de orden [van Enter and van Hemmen 1984], esta función y sus diversas versiones han sido ampliamente usadas para estudiar el comportamiento crítico de una variedad de modelos de vidrios de espín. De hecho, tanto los cálculos que han llevado a reportar la existencia de una transición de fase en el modelo de EA en tres dimensiones [Bhatt and Young 1985; Ogielski and Morgenstern 1985], como la presunción de que lo mismo sucede en dos dimensiones [Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000], se han realizado usando una de tales implementaciones del parámetro de orden de Edwards y Anderson. La más popular de ellas, se basa en una función que mide la superposición entre un par de configuraciones w y z , visitadas por el sistema en su derrotero por el espacio fase:

$$Q_{w,z} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_{j,w} \sigma_{j,z} . \quad (4.10)$$

La ecuación anterior, compara los estados que tiene un mismo espín a lo largo de las configuraciones típicas del equilibrio. La distribución de estos valores se puede expresar como

$$P(Q, T) = \frac{2}{Y(Y-1)} \sum_w^Y \sum_{z(>w)}^Y \delta(Q - Q_{w,z}), \quad (4.11)$$

donde Y es el número total de configuraciones visitadas en la trayectoria. La distribución anterior, contempla todos los solapamientos posibles entre pares de estados visitados. Debemos recalcar que, (4.10) mide la habilidad del sistema (para una muestra) para memorizar un estado de freezing a una dada temperatura T .

Como ejemplo, consideremos la figura 4.2 que representa la distribución (4.11) para una única muestra del modelo de EA en dos dimensiones a $T = 0,2$ [Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000], determinada con dos métodos numéricos de cálculo diferentes (más tarde hablaremos de este problema). Podemos apreciar que, a esta temperatura, aparecen dos máximos muy pronunciados cerca de ± 1 , indicando un gran solapamiento entre las configuraciones visitadas por el sistema.

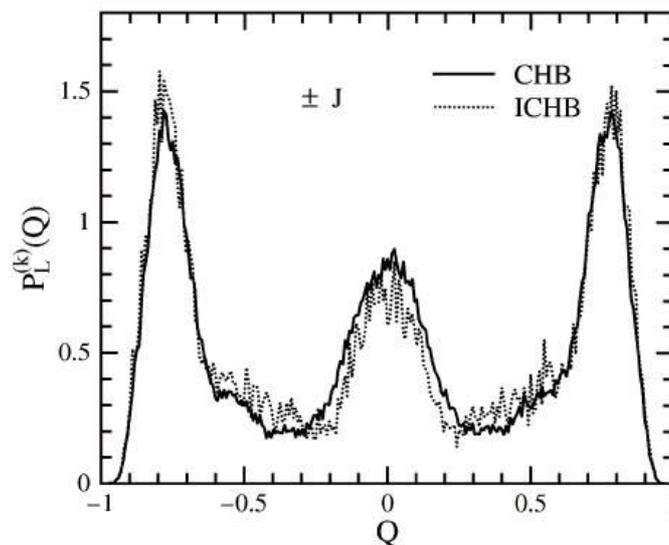


Figura 4.2. Distribución del parámetro de orden (4.10) para una muestra del modelo de EA a $T = 0,2$ [Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000].

Es de destacar la aparición de otro máximo más extenso en torno a $Q = 0$. Esto indica que, una cantidad importante de configuraciones no se solapan en lo absoluto, a pesar de

que a esta temperatura el sistema debería estar en una fase prácticamente en estado puro. Incluso, si se realiza un promedio en el desorden, la distribución sigue manteniendo esta perturbación cercana a $Q = 0$. La figura 4.3 representa un promedio sobre 600 muestras de la distribución (4.11) para diferentes tamaños de red (debido a que esta función es simétrica, sólo se muestra una única rama).

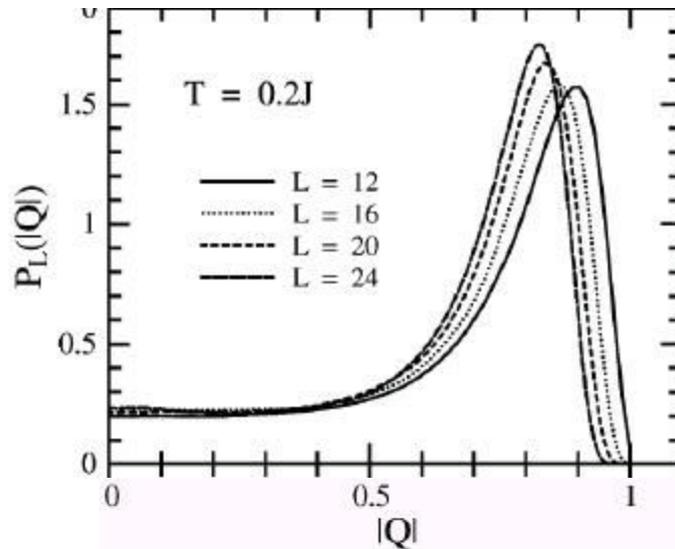


Figura 4.3. Distribución promedio del parámetro de orden (4.10) para 600 muestras del modelo de EA a $T = 0,2$ [Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000].

Hay que destacar que, una distribución como la mostrada en la figura 4.2, no puede ser fácilmente calculada con un algoritmo cuya dinámica sea la de Glauber, ya que sólo seríamos capaces de observar configuraciones de una sola cuenca ergódica. En su lugar, se debe emplear una metodología que permita muestrear todas las configuraciones del equilibrio, sin que las grandes barreras de energía libre que separan las regiones del sistema lo impidan. En los últimos años, ésta ha sido la motivación para diseñar diferentes técnicas de cálculo [Berg and Neuhaus 1992; Berg and Celik 1992; Kerler and Rehberg 1994; Hukushima and Nemoto 1996; Matsubara *et al.* 1997; Berg and Janke 1998].

La idea más importante propuesta en este trabajo, es la de restringir el conjunto de espines que son utilizados para describir el orden del sistema. Mientras la función (4.10) contiene a todos los espines, el nuevo parámetro de orden se basa sólo en aquellos que tienen la propiedad de ser solidarios en el estado fundamental. Esto permite que la distribución de (4.2), no presente los mismos comportamientos anómalos que (4.11) (ver figuras 4.2 y 4.3). De hecho, debido a que en el estado fundamental las islas se ordenan completamente (y a sus espines les es imposible cambiar de estado), la distribución del nuevo parámetro de orden a $T = 0$ es exactamente una delta de Dirac centrada en uno.

Veamos un ejemplo. Hemos elegido una muestra de $N = 1024$ espines y concentración $x = 0,09375$, cuya fase está dividida únicamente en dos islas. A pesar de que no es un sistema típico (a ese tamaño y concentración el número medio de islas es de 4,4), nos servirá para visualizar en una forma sencilla las predicciones del nuevo parámetro de orden. La figura 4.4 representa la fase, en la que se han diferenciado los espines de las dos islas (por simplicidad se han eliminado los enlaces).

En primer lugar, consideremos la densidad de probabilidad P de que el sistema tenga un determinado orden dado por las funciones ϕ_1 y ϕ_2 , las cuales están definidas por la ecuación (4.1) (las islas 1 y 2 poseen, respectivamente, 940 y 17 espines). La figura 4.5 muestra, para diferentes temperaturas, una secuencia de esta distribución. En la próxima sección veremos que a esta concentración, el sistema experimenta una transición de fase continua a una temperatura crítica $T_c \approx 1,4$. El análisis de dicha figura es como sigue. A temperaturas mayores a T_c ($T = 100$ y $T = 3$), la distribución tiene la forma de una función

normal bivariada, con valores medios de ϕ_1 y ϕ_2 iguales a cero y diferentes dispersiones. Que el ancho de la distribución en la variable ϕ_2 sea mayor que en ϕ_1 no es nada extraño. Recordemos (ver sección 2.3), que la dispersión de una dada cantidad extensiva normalizada al tamaño del sistema N (que es el caso del parámetro de orden), es proporcional a $N^{-1/2}$. En este caso, como hay una gran diferencia de tamaño entre las dos islas que conforman la fase, debe existir una mayor dispersión para cualquier cantidad medida sobre la estructura más pequeña.

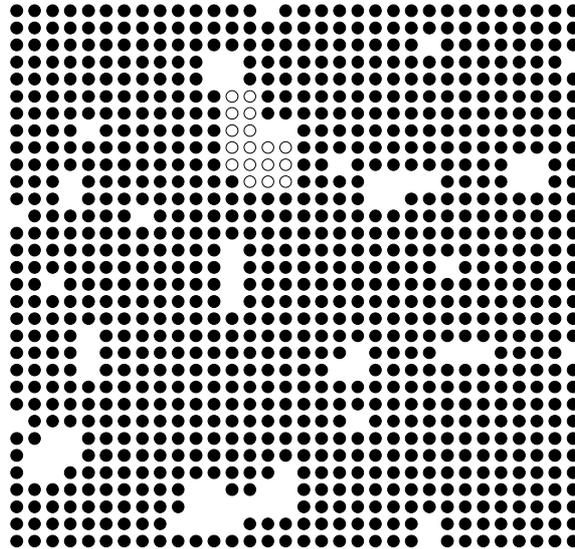


Figura 4.4. Fase de una muestra de $N = 1024$ espines y concentración $x = 0,09375$. Los espines de las dos islas se han diferenciado con círculos blancos y negros (940 y 17 para cada isla).

Si continuamos descendiendo la temperatura, encontramos que la distribución desarrolla dos máximos bien definidos. Esto se puede apreciar claramente en la figura 4.5 para $T = 1,8$ y $T = 1,7$. Como vemos, la distribución se ha partido a lo largo de ϕ_2 mientras, la proyección en la variable ϕ_1 , mantiene la forma de una función normal centrada en cero. Es decir, a esta temperatura, existe una probabilidad apreciable de encontrar a la isla menor con un grado elevado de orden ($\phi_2 \approx \pm 1$), mientras la mayor permanece desordenada. Esta primera separación no sugiere la existencia de una transición de fase, ya que la temperatura del sistema se encuentra muy por arriba de T_c . En cambio, estamos presenciando como el desorden comienza a afectar a la dinámica del sistema. En otros términos podemos decir que, bajo estas circunstancias, la superficie de energía libre debería presentar dos mínimos separados por una barrera de altura finita.

A medida que nos acercamos a la temperatura crítica, la distribución comienza a desarrollar cuatro máximos que indican una alta probabilidad de encontrar al sistema con ambas islas ordenadas ($\phi_1 \approx \pm 1$ y $\phi_2 \approx \pm 1$). Es decir, cada máximo corresponde aproximadamente a una de las cuatro orientaciones posibles del conjunto de dos islas. En la figura 4.5 este comportamiento se muestra para $T = 1,6$ y $T = 1,5$. Notemos que, aún existe la posibilidad de encontrar a la fase desordenada, ya que la distribución posee una probabilidad apreciable para $\phi_1 \approx 0$ y $\phi_2 \approx 0$. Esta situación cambia drásticamente cuando alcanzamos T_c . De hecho, analizando cuidadosamente la distribución para $T = 1,4$ mostrada en la figura 4.5, podemos apreciar que ahora la probabilidad de encontrar a la isla mayor desordenada es prácticamente cero (mientras que a la isla menor aún podemos observarla desordenada). Esto sugiere que en el sistema se ha producido un quiebre en la ergodicidad. Este comportamiento se acentúa más cuando alcanzamos $T = 1,2$. Sin embargo, todavía la isla menor puede ser observada totalmente desordenada.

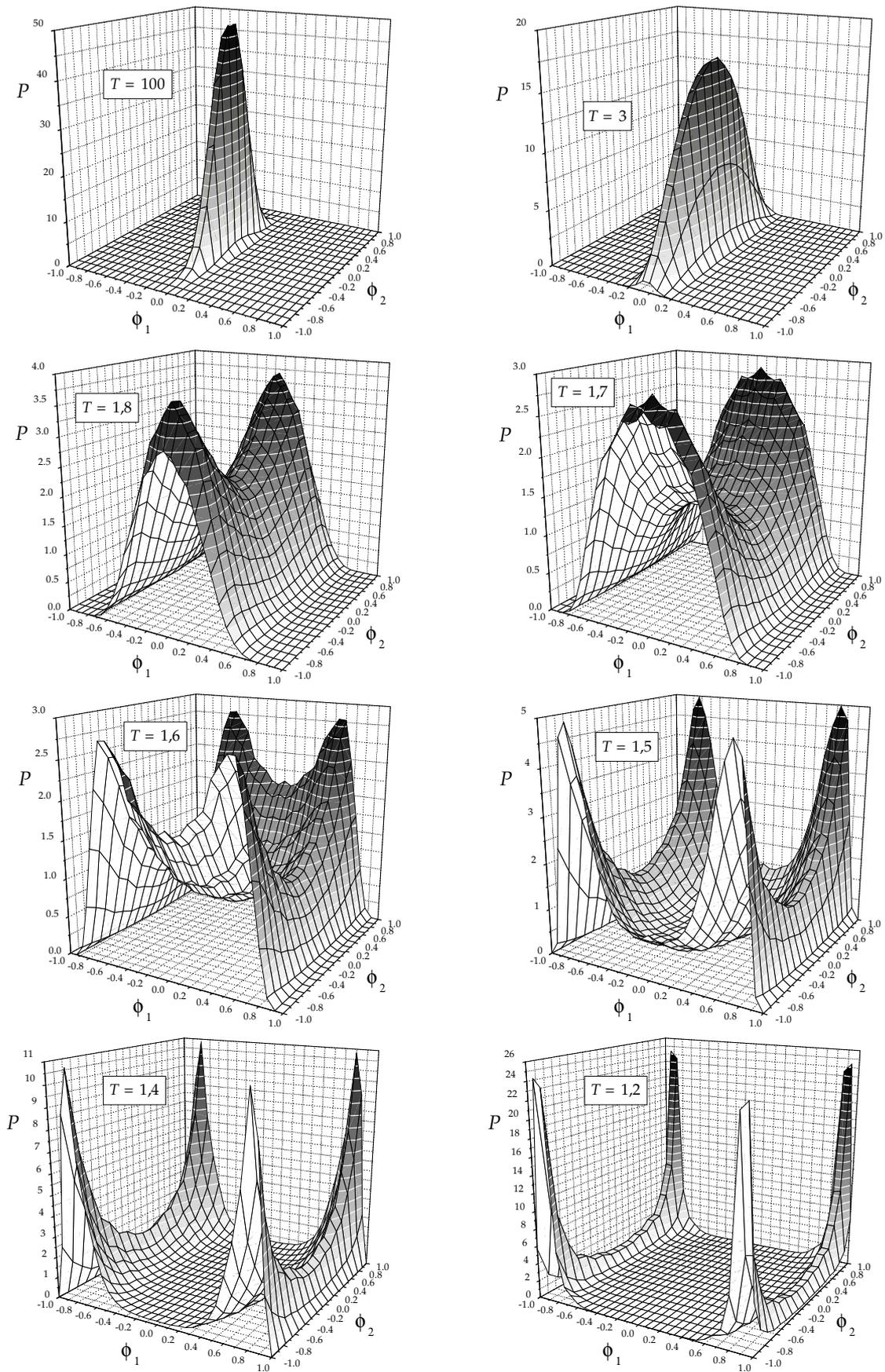


Figura 4.5. Densidad de probabilidad de los parámetros de orden ϕ_1 y ϕ_2 , para una muestra de $N = 1024$ y concentración $x = 0,09375$, cuya fase se encuentra dividida en dos islas de 940 y 17 espines.

Finalmente, la figura 4.6 presenta las distribuciones del parámetro de orden (4.2) (aquel que suma el efecto de todas las islas) para la muestra de la figura 4.4 y para diferentes temperaturas. Podemos apreciar que aquí, han desaparecido los efectos espurios manifestados en la distribución del parámetro de Edwards y Anderson (ver figuras 4.2 y 4.3).

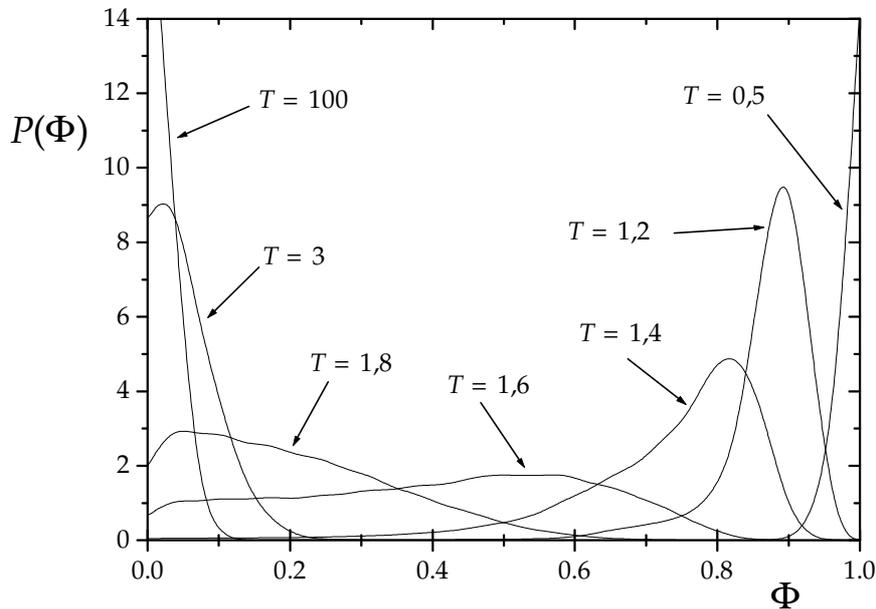


Figura 4.6. Densidad de probabilidad del parámetro de orden (4.2) para la muestra de la figura 4.4.

Debemos tener en cuenta que el análisis anterior se efectuó para una muestra de tamaño finito. Sin embargo, el ejemplo sugiere que al producirse la transición, el espacio fase se divide en sólo dos cuencas ergódicas (señaladas con $\phi_1 \approx \pm 1$). A su vez, cada una de estas se encuentran divididas en dos regiones (cada una señalada con $\phi_2 \approx \pm 1$), separadas por una barrera de altura finita (situada a $\phi_1 \approx \pm 1$ y $\phi_2 \approx 0$). Si ahora suponemos que en el límite termodinámico, la fase está formada por una estructura mayor infinita (que percola), rodeada de un número infinito de pequeñas islas, entonces la descripción anterior es aún válida: tendremos dos cuencas ergódicas (identificadas con cada una de las dos orientaciones de la isla mayor), divididas cada una en infinitas regiones separadas por barreras de altura finita (cada región identificada con una orientación posible de las islas menores).

Los cálculos realizados en el capítulo 3, sirven para apuntalar aún más las suposiciones realizadas en el párrafo anterior. Recordemos que determinamos que $h \geq 0,5$. Esto implica que la fase siempre estará presente, ya que la RD se encargará de ligar a una fracción importante de espines. Sin embargo, los estudios topológicos también indicaron que su estructura interna cambia con la concentración. De hecho, sabemos que por debajo de $x \approx 0,1$ predomina una isla mayor (de entre infinitas islas), mientras a $x = 0,5$ esta misma formación tiende a desaparecer. Consideramos lógico suponer que, todos los conjuntos de espines solidarios cuya extensión sea mucho menor que la del sistema, no aportarán a la estabilidad de la fase. Las orientaciones relativas entre dichas estructuras, deberían indicar únicamente la presencia de un mínimo local en la superficie de energía libre. Por otro lado, si alguna de las islas de espines solidarios llega a ser suficientemente grande como para percolar a través del sistema, podría ser la responsable de mantener la cohesión o el orden magnético incluso a una temperatura finita mayor que cero. De allí que, su orientación serviría para indicar en qué cuenca ergódica nos encontramos.

A pesar de que el método de exploración dirigida descrito en el capítulo anterior, fue diseñado para determinar los enlaces de la RD y la RR, es posible readecuarlo para poder calcular directamente la fase de espines solidarios. Aunque esta tarea no ha sido

abordada en este trabajo, en la conclusiones y perspectivas futuras, daremos los lineamientos básicos que deberían tenerse en cuenta para realizar tales modificaciones.

Finalmente, debemos señalar que las ideas descritas en este trabajo no son nuevas. Aunque los parámetros de orden (4.2) y (4.10) describen la memoria magnética del sistema comparando estados, se diferencian en un punto muy importante. Mientras el de Edwards y Anderson lo hace entre configuraciones típicas del equilibrio, el nuevo parámetro de orden introducido aquí, proyecta cada uno de estos estados, en configuraciones del GM que caracterizan la fase. En 1977, Binder propuso un parámetro con características similares a (4.2) [Binder 1977b]. Esta función, se definió como una proyección de las configuraciones del sistema en un estado *promedio*, calculado sobre una de las cuencas ergódicas en el estado fundamental. Dicho parámetro no tomó gran trascendencia, quizás por carecer de una descripción clara de la fase a $T = 0$.

4.3 Estudio de la transición ferromagnética a bajas concentraciones

Como vimos anteriormente, se conoce que a bajas concentraciones el modelo de EA muestra una transición de fase ferromagnética (lo mismo sucede con una transición antiferromagnética a altas concentraciones). Diversos trabajos se han realizado para trazar el diagrama de fase, usando diferentes técnicas numéricas [Morgenstern and Binder 1980; Nishimori 1986; Ozeki and Nishimori 1987]. Debido a que se espera que la fase sea predominantemente ferromagnética, usualmente se ha empleado la susceptibilidad magnética para encontrar la temperatura crítica a una dada concentración. En lo que sigue, recuperaremos el mismo diagrama de fase usando el nuevo parámetro de orden (4.2). La finalidad es obvia: deseamos poner a prueba el marco teórico introducido en la sección anterior.

Describiremos ahora, cómo se realizó el estudio de tamaño finito del sistema [Binder 1979; Nieto 1998; Ramírez-Pastor 1998]. Para cada una de las concentraciones, las cantidades analizadas fueron calculadas sobre un amplio rango de temperaturas, para diferentes muestras y para varios tamaños de red, usando siempre simulación de MC (empleando la misma estrategia descrita en el sección 2.2). Entre las más importantes tenemos: la capacidad calorífica por sitio de red (en unidades de k_B)

$$C(N, T) = \frac{\left[\langle H^2 \rangle_T - \langle H \rangle_T^2 \right]_M}{N T^2} \quad (4.12)$$

y el parámetro de orden

$$\Phi(N, T) = \left[\left\langle \sum_{i=1}^{n^\circ \text{ islas}} f_i |\phi_i| \right\rangle_T \right]_M, \quad (4.13)$$

donde H es el hamiltoniano y los subíndices T y M representan, respectivamente, un promedio térmico y uno en el desorden. A su vez, es usual también determinar la dispersión del parámetro de orden (o susceptibilidad)

$$\chi(N, T) = \frac{N}{T} \left[\langle \Phi^2 \rangle_T - \langle \Phi \rangle_T^2 \right]_M \quad (4.14)$$

y su cumulante de Binder [Binder 1981, 1984]

$$\Psi(N, T) = 1 - \frac{\left[\langle \Phi^4 \rangle_T \right]_M}{3 \left[\langle \Phi^2 \rangle_T \right]_M^2}. \quad (4.15)$$

Como es bien conocido, en el límite termodinámico cantidades como (4.12) y (4.14) o las derivadas primeras con respecto a la temperatura de (4.13) y (4.15), divergen cuando $T \rightarrow T_c$. Sin embargo, para un tamaño de red finito $N = L \times L$, sólo desarrollan un máximo a una temperatura que denominaremos $T_c(L)$. Se espera que dichas cantidades, tengan una dependencia con el tamaño lineal del sistema de la forma:

$$K_c(L) = K_c + \frac{ce}{L^{1/\nu}}, \quad (4.16)$$

donde $K_c = 1/T_c$, ν es el exponente asociado a la divergencia de la longitud de correlación en el punto crítico y la constante depende de la cantidad analizada. Si consideramos que la universalidad de la transición ferromagnética no cambia, podemos tomar el valor de $\nu = 1$. La ecuación (4.16) nos permite realizar una extrapolación para determinar la temperatura crítica del sistema. Otra forma de calcular T_c , consiste en determinar el punto de corte de los cumulantes para los diferentes tamaños de red. Esta metodología, propuesta originalmente por Binder [Binder 1981], es ampliamente usada para estudiar las transiciones de fase continuas.

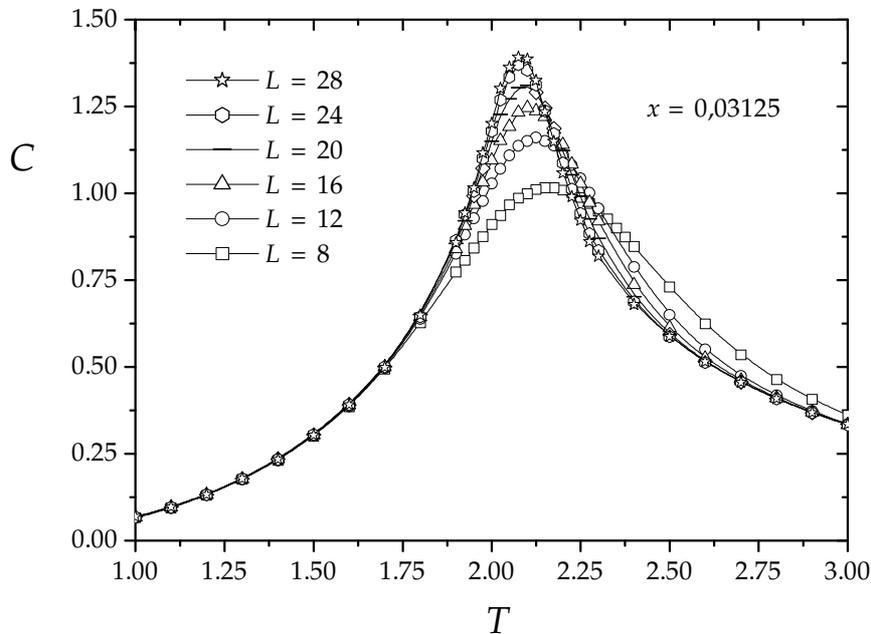


Figura 4.7. Capacidad calorífica para una concentración $x = 0,03125$, promediada sobre 100 muestras de red.

Consideremos un ejemplo. La figura 4.7 representa la capacidad calorífica para una concentración $x = 0,03125$ y para diferentes tamaños de red (promediada sobre 100 muestras). Vemos que la temperatura a la que se desarrolla el máximo $T_c(L)$ cambia con L . Usando la ley de escalo (4.16), podemos determinar la temperatura crítica del sistema luego de extrapolar el valor de K_c al límite $L \rightarrow \infty$. Este proceso es mostrado en la figura 4.8 tanto para la capacidad calorífica, como para la susceptibilidad y las derivadas primeras del parámetro de orden y el cumulante de Binder.

Podemos apreciar en dicha figura que, debido a los errores estadísticos y de simulación, la intersección con la ordenada no es única. Por lo tanto, para obtener un primer estimador de la temperatura crítica mediante este método, hemos elegido calcular simplemente un promedio aritmético de las diferentes ordenadas al origen (cada una asociada a un valor de K_c). Siguiendo este proceso obtuvimos $T_c \approx 2,05$.

Un segundo valor de la temperatura crítica se obtienen de la intersección de los cumulantes Binder. Siguiendo con el ejemplo anterior, la figura 4.9 muestra la función

(4.15) para diferentes tamaños de red. Como podemos apreciar, las curvas se cortan en un punto universal $\Psi^* \approx 0,6123$ a $T_C \approx 2,03$.

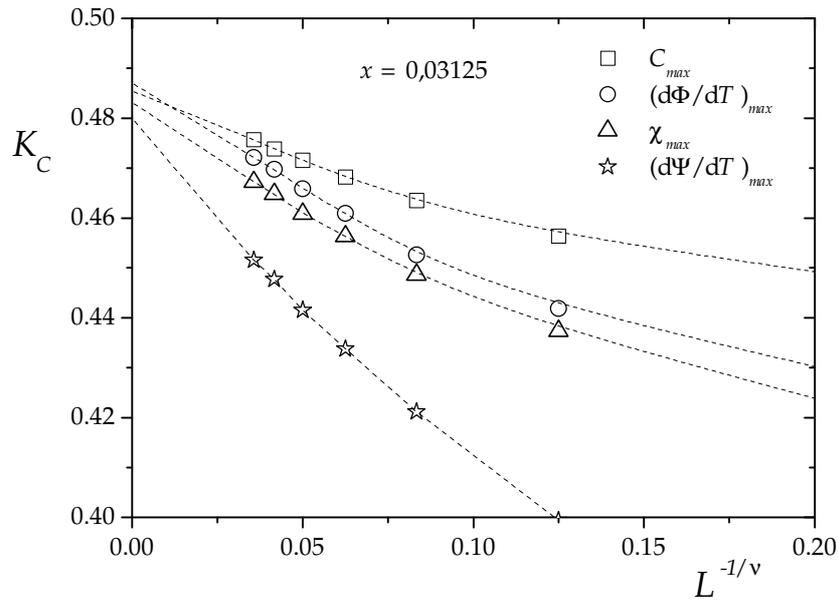


Figura 4.8. Dependencia con el tamaño de lineal de la red, de la inversa de la temperatura a la que se producen los máximos de C , χ y de las derivadas primeras de Φ y Ψ .

Para obtener un estimador definitivo de la temperatura crítica, realizamos simplemente un promedio aritmético de los valores calculados con las dos metodologías: $T_C = 2,04 \pm 0,02$. El intervalo de confianza anterior, fue elegido igual a la diferencia entre dichos valores. Finalmente, la figura 4.10 muestra la convergencia del parámetro de orden hacia una curva límite, señalada con línea punteada.

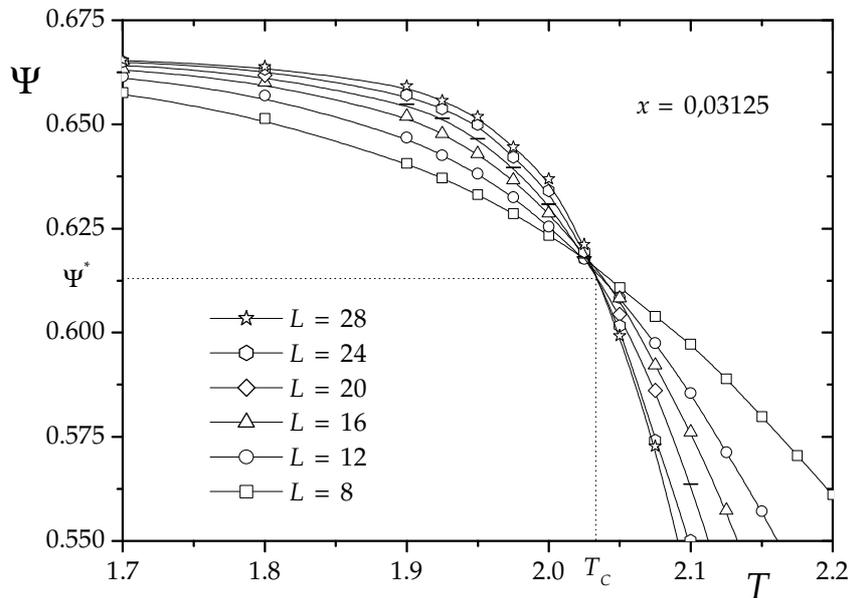


Figura 4.9. Cumulantes de Binder Ψ para diferentes tamaños de red. Podemos apreciar que las curvas se interceptan a la temperatura crítica en un punto universal $\Psi^* \approx 0,6123$.

La tabla 4.1 presenta los valores de T_C calculados para bajas concentraciones de enlaces AF. A su vez, se reportan también el rango de L usado, ΔL , y el número total de muestras estudiadas. Para $x = 0$ tenemos la temperatura crítica exacta del modelo de Ising

ferromagnético [Onsager 1944]. El resto de los valores de T_c fueron calculados siguiendo el mismo esquema mostrado en el ejemplo anterior.

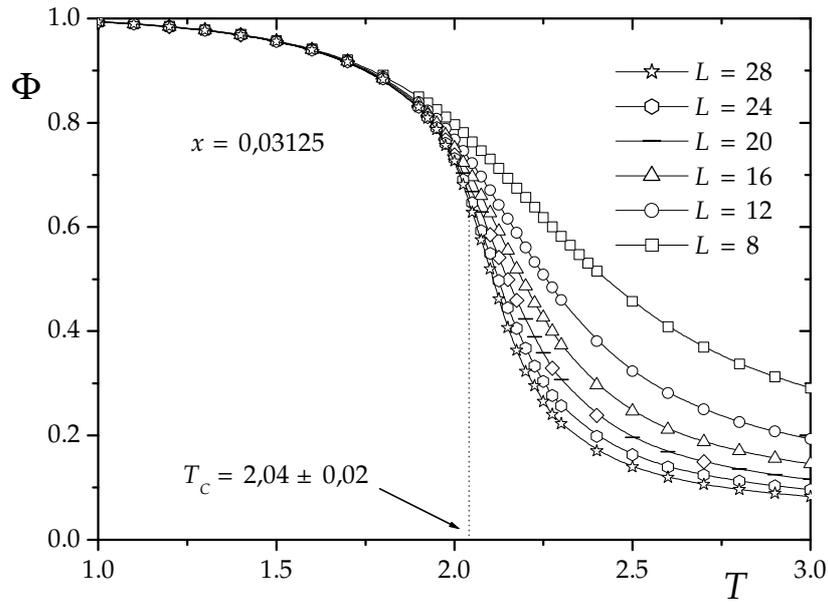


Figura 4.10. Parámetro de orden para diferentes tamaños de red.

Podemos observar en la tabla que, el número de muestras que debieron considerarse se incrementó al aumentar x . Esto se debe a que el número de realizaciones posibles del desorden, crece a medida que aumenta la concentración.

x	T_c	ΔL	Nº muestras
0	2,2692
0,0139	$2,17 \pm 0,01$	6 - 30	500
0,0312	$2,04 \pm 0,02$	8 - 28	600
0,0417	$1,95 \pm 0,02$	6 - 36	900
0,0555	$1,84 \pm 0,03$	6 - 36	900
0,0625	$1,78 \pm 0,04$	8 - 32	1.400
0,0694	$1,70 \pm 0,04$	6 - 36	1.200
0,0833	$1,56 \pm 0,05$	6 - 36	1.660
0,0937	$1,46 \pm 0,10$	8 - 32	3.215
0,0972	6 - 30	3.000

Tabla 4.1. Temperatura crítica para diferentes concentraciones de enlaces AF. Las dos últimas columnas indican, el rango de tamaño ΔL y el número total de muestras estudiadas.

Por otro lado, los efectos de tamaño finito también aumentan con el incremento de x . Esto obliga a usar redes y tiempos de MC cada vez más grandes, dificultando los estudios a concentraciones mayores. De hecho, la temperatura crítica a $x = 0,0972$ no pudo ser calculada adecuadamente. La figura 4.11 muestra el cruce de cumulantes para diversas concentraciones dentro del rango aproximado 0 - 0,1. Apreciamos que, al incrementar la concentración, los cumulantes se interceptan en un valor mayor que Ψ^* . Esto nos dice que la universalidad de la transición podría estar cambiando (si se mantuviera la universalidad de la transición ferromagnética, los cumulantes siempre deberían cruzarse en Ψ^*). Sin embargo, debido a que han sido analizadas una cantidad de muestras suficientes como para descartar los errores muestrales, atribuimos este comportamiento

directamente a los efectos de tamaño. De hecho, por cada incremento en N , observamos que el punto de cruce desciende con una tendencia hacia Ψ^* .

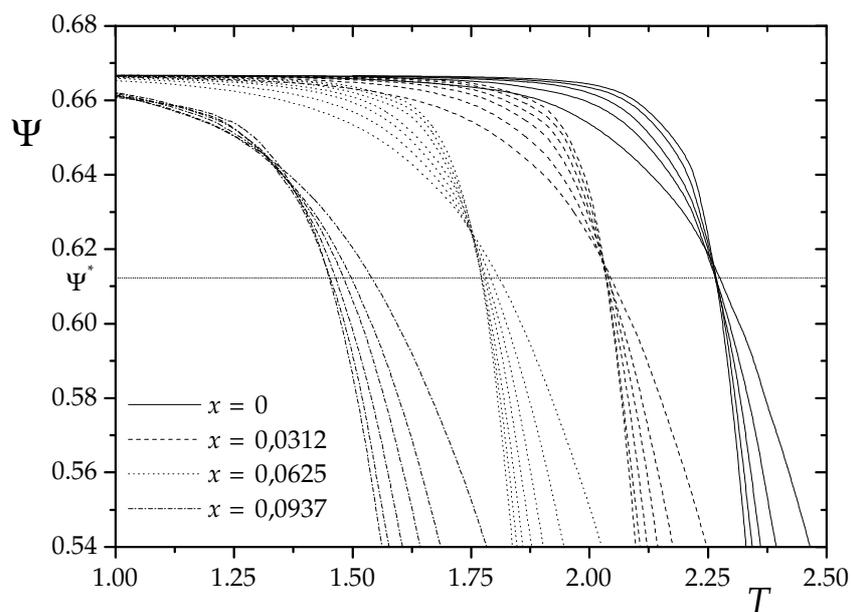


Figura 4.11. Cruce de cumulantes de Binder Ψ para diferentes concentraciones. Podemos apreciar que, debido a los efectos de tamaño, las curvas no se interceptan en el punto universal Ψ^* .

La figura 4.12 muestra el diagrama de fase para la transición ferromagnética obtenido en este trabajo. Los círculos con sus barras de error corresponden a los valores reportados en la tabla 4.1. Debido a los efectos de tamaño, no se pudo cerrar adecuadamente el diagrama de fase con la metodología empleada en este trabajo.

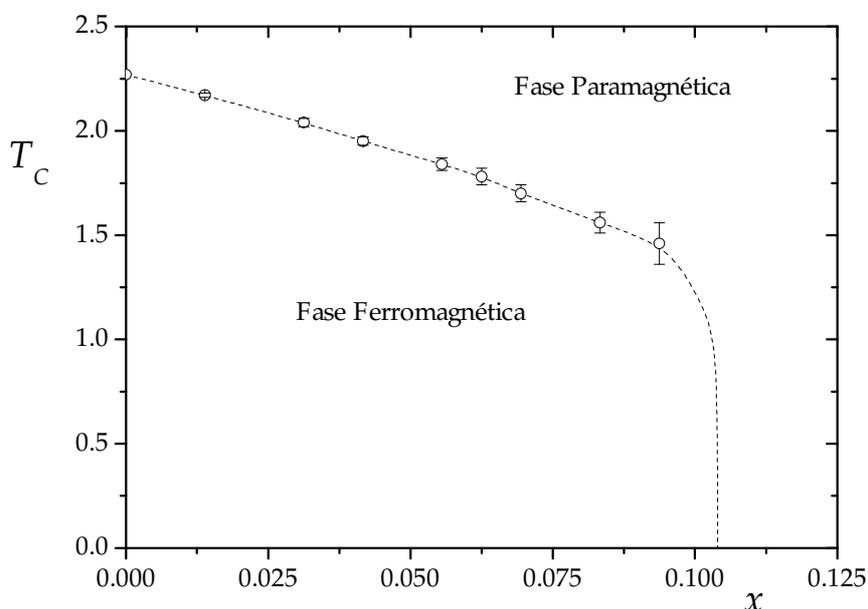


Figura 4.12. Diagrama de fase a bajas concentraciones para el modelo de EA. Los círculos con sus barras de error corresponden a los resultados de MC. En cambio, la línea punteada, es sólo una especulación.

La ausencia de un corte en los cumulantes a $x = 0,0972$ nos dice únicamente que, en el entorno de ese valor debería encontrarse la concentración crítica x_c (la concentración para la cual $T_c = 0$). Para completar el diagrama (línea punteada en la figura 4.12), se recurrió a la información disponible en la literatura. Por un lado, estudios numéricos recientes sobre

la estabilidad de la fase (donde toman la fase como todos los espines del sistema) en el estado fundamental, sitúan la concentración crítica en $x_c = 0,104 \pm 0,001$ [Kawashima and Rieger 1987]. Por otro lado, cálculos de grupo de renormalización, sugieren que la presencia de una singularidad en la distribución de entropía de frustración, es causada por un diagrama de fase que se cierra con una línea vertical [Nishimori 1986]. Dicha recta se extiende entre el punto que se forma por la intersección de la función

$$x = \frac{1}{1 + \exp(2/T)} \quad (4.17)$$

con el borde de la fase, y $T = 0$. Si esto es correcto, podemos cerrar el diagrama trazando una recta vertical desde $x_c = 0,104$ y $T_c = 0$, hasta que la misma intercepte a la función (4.17). Este ha sido el criterio seguido para dibujar la línea de fase en la figura 4.12 (línea punteada).

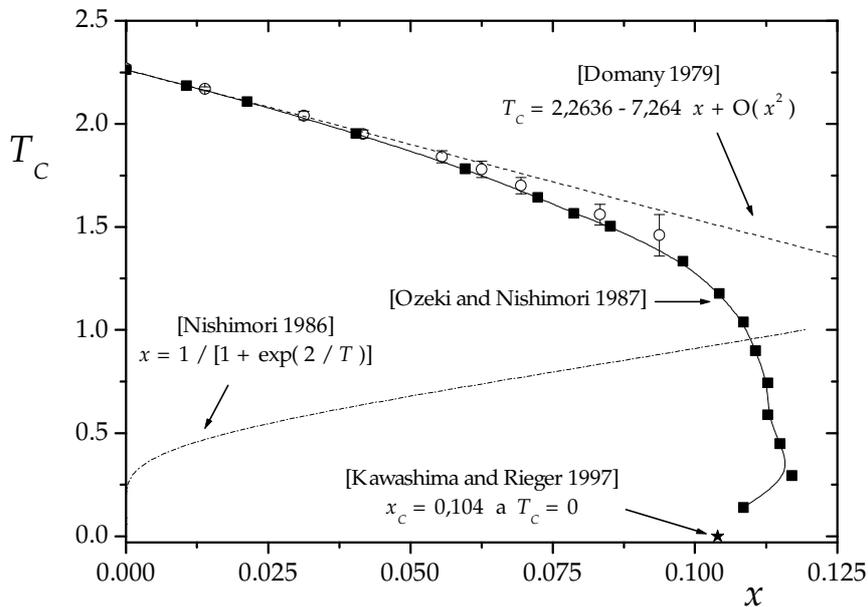


Figura 4.13. Información disponible en la literatura relacionada con el diagrama de fase a bajas concentraciones para el modelo de EA. Los círculos con sus barras de error corresponden a los resultados de MC.

La figura 4.13 muestra tanto la información obtenida aquí, como aquella disponible en la literatura. Podemos apreciar un buen acuerdo entre la simulación de MC, y el calculado realizado mediante matriz de transferencia hace ya unos años (éste es uno de los reportes más recientes) [Ozeki and Nishimori 1987]. A su vez, también vemos que la línea tangente al diagrama para exactamente $x = 0$, coincide con la determinada por medio de cálculos variacionales [Domany 1979].

Finalmente, debemos destacar que el diagrama de fase reportado por Ozeki y Nishimori (ver figura 4.13), fue obtenido analizando la susceptibilidad magnética. Aunque la magnetización no es el mejor parámetro de orden (ya que no tiene un único valor en el estado fundamental), esta función es capaz de acusar la transición de fase. De hecho, sus cumulantes son idénticos al del nuevo parámetro de orden. Esto es lógico, ya que la transición es predominantemente ferromagnética. Sin embargo, superada x_c , la magnetización ya no puede ser usada como parámetro de orden. Como veremos en la siguiente sección, es a partir de esta concentración que el nuevo esquema teórico cobra su mayor importancia.

4.4 Análisis del comportamiento crítico a $x = 0,5$

A diferencia de lo que sucede para bajas concentraciones, el comportamiento crítico del modelo de EA a $x = 0,5$ aún sigue siendo un tema controversial. Aunque la mayoría de los trabajos publicados sugieren la existencia de una transición de fase en dos dimensiones a $T_c = 0$, las evidencias aportadas no son suficientemente convincentes como para arribar a conclusiones definitivas. En esta sección, comenzaremos revisando la información reportada en la literatura. Posteriormente, analizaremos todos los datos obtenidos en este trabajo de tesis. Veremos que, una vez más, a pesar de que todo indica la existencia de una transición continua a temperatura cero, aún quedan suficientes interrogantes por responder antes de cerrar definitivamente esta discusión.

Uno de los caminos elegidos para estudiar el comportamiento crítico ha sido el de calcular numéricamente el parámetro de orden de Edwards y Anderson (4.10) y su acumulante. Como indicábamos anteriormente, las diferentes conclusiones a las que se han arribando están encontradas. Mientras algunos sostienen la existencia de una transición de fase a $T_c = 0$ [Morgenstern and Binder 1979; Singh and Chakravarty 1986; Bhatt and Young 1988] otros, recientemente, han reportado evidencias que señalan que la misma sucede a una temperatura finita mayor que cero, $T_c \approx 0,25$ [Shirakura and Matsubara 1996, 1997; Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000]. Ambas posturas pueden ser cuestionadas. En primer lugar, los trabajos más modernos en los que se calcula el parámetro de orden de Edwards y Anderson (aquellos que reportan $T_c \approx 0,25$) son evidentemente más exhaustivos. De hecho, la implementación de nuevos algoritmos y computadores más veloces, ha permitido alcanzar temperaturas de hasta $T = 0,1$ y tamaños de red de $N = 400$ espines [Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000]. De allí que una cuota de confianza debería depositarse sobre estas publicaciones. Sin embargo, tanto los nuevos como los viejos trabajos carecen de algo muy importante: un parámetro de orden bien comportado.

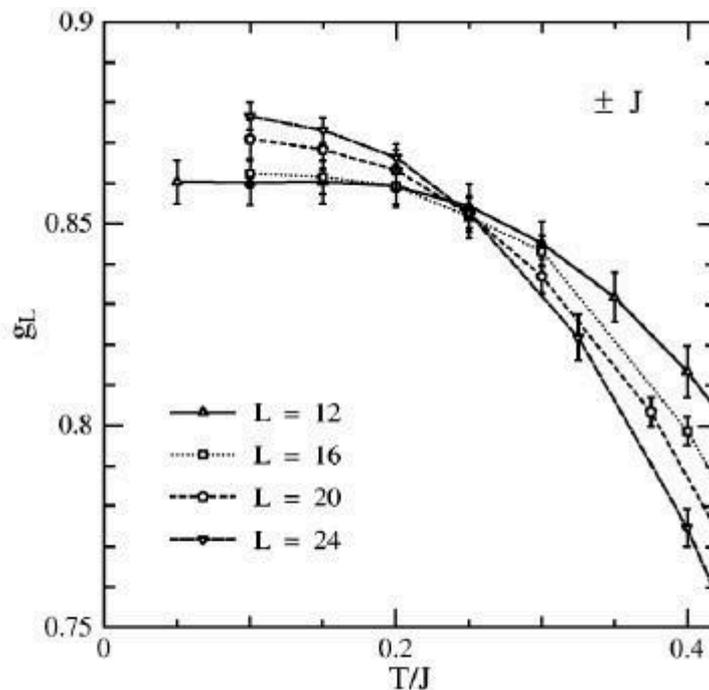


Figura 4.14. Cruce de cumulantes (g_L en la figura) que sugiere la existencia de un punto universal a $T_c \approx 0,25$ [Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000].

Como señalamos en la sección 4.2 (ver figuras 4.2 y 4.3), la distribución del parámetro de orden de Edwards y Anderson a muy bajas temperaturas, tiene un valor finito para $Q \approx 0$. Este comportamiento no deseado persiste incluso en el límite termodinámico [Bhatt and Young 1988; Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000]. Es posible que, estos efectos espurios introduzcan suficiente perturbación como para

observar un cruce de cumulantes (que realmente no exista). La figura 4.14 muestra los cumulantes de Binder del parámetro de orden de Edwards y Anderson reportados por Shiomi *et al.* [Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000]. Podemos observar un cruce de cumulantes que indica, aparentemente, la existencia de un punto universal a $T_c \approx 0,25$. Sin embargo, debemos destacar un grave inconveniente. Usualmente, cuando el sistema alcanza el estado fundamental, la distribución del parámetro de orden tiende a una función delta de Dirac (o a dos deltas centradas en ± 1 , como en el caso de la magnetización), originando que el cumulante de Binder tome aproximadamente el valor $2/3$ (ver figura 4.9). Debido a que Shiomi *et al.* utilizan un cumulante normalizado a uno (en nuestro caso deberíamos multiplicar la ecuación (4.15) por $3/2$), entonces se debería observar que $\Psi \rightarrow 1$ cuando $T \rightarrow 0$. En su lugar, si extrapolamos, vemos que difícilmente se pueda cumplir esta propiedad.

Este comportamiento anómalo, tiene su origen en la gran degeneración del estado fundamental. De hecho, si la distribución de enlaces es gaussiana, el cumulante de Binder del parámetro de orden de Edwards y Anderson $\Psi \rightarrow 1$ cuando $T \rightarrow 0$ [Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000]. Esto se debe a que su estado fundamental es único (en comparación, el fundamental para la distribución $\pm J$ es degenerado). En este caso, Shiomi *et al.* llegan a la conclusión de que $T_c = 0$, resultado que acuerda con el resto de los reportes citados.

Probablemente, estos inconvenientes con la distribución del parámetro de orden de Edwards y Anderson, puedan ser la causa de que existan pocos reportes con esta información. La gran mayoría de los trabajos centran su atención en estudiar la estabilidad de la fase (se consideran a todos los espines como pertenecientes a la fase). Comúnmente, las metodologías usadas permiten no sólo determinar la existencia o no de una transición, sino también calcular la temperatura a la que sucede. La idea básica fue tomada prestada de una aplicación de la teoría de grupo de renormalización [Bray and Moore 1984; McMillan 1984]. Cuando se renormaliza una red en bloques de dimensión L , se obtiene un acoplamiento efectivo entre éstos, J_L . Usualmente, se encuentra que la dependencia de esta cantidad con el tamaño lineal L sigue una ley de potencia:

$$J_L \sim L^{\theta_s}. \quad (4.18)$$

El exponente en (4.18) determina el comportamiento crítico del sistema. Si $\theta_s \leq 0$ ($\theta_s > 0$), se infiere que la transición de fase sucede a $T_c = 0$ ($T_c > 0$) [Bray and Moore 1984]. Cuando $\theta_s = 0$ el comportamiento es marginal. En este caso, decimos que la dimensión del sistema d , es igual que la dimensión crítica inferior d_c (d_c es la mayor dimensión para la cual aún $T_c = 0$). De allí que, $\theta_s < 0$ ($\theta_s > 0$) implica $d < d_c$ ($d > d_c$).

En la práctica, para estimar el acoplamiento J_L , se calcula el *defecto de energía* ΔE para una muestra de dimensión lineal L en su estado fundamental. Los diferentes autores difieren en la forma de llevar a cabo esta tarea. De hecho, los valores reportados del exponente θ_s , dependen de que criterio elegido. Una de las metodologías más usadas para estimar ΔE , consiste en calcular la diferencia de energía del estado fundamental entre dos muestras idénticas (es decir, con la misma distribución de enlaces), a las que se han incorporado diferentes condiciones de borde. Por ejemplo, es usual elegir para una de ellas condiciones de borde periódicas en las dos direcciones y, para la restante, condiciones de borde periódicas en una dirección y antiperiódicas en la otra [Matsubara, Shirakura and Shiomi 1998; Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000]. La dependencia de ΔE (o J_L) con L , permite tener una idea de cuán estable es el estado fundamental.

Para el caso del modelo de EA en la red cuadrada ($d = 2$) con una distribución de enlaces gaussiana, los diferentes autores arriban a la conclusión de que $T_c = 0$ y $d < d_c$, ya que al menos coinciden en que el exponente θ_s es negativo (los valores reportados están entre $\theta_s \approx -0,28$ y $\theta_s \approx -0,2$) [Bray and Moore 1984; Matsubara, Shirakura and Shiomi 1998;

Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000; Hartmann and Young 2001; Amoruso *et al.* 2003]. Sin embargo, no hay un acuerdo entre ellos cuando la distribución de enlaces es discreta (cuando tenemos igual cantidad de dos tipos de enlaces $\pm J$).

Si nos independizamos de la idea original de la teoría de grupo de renormalización, podemos determinar la estabilidad de la fase a una temperatura finita, calculando la diferencia de energía libre ΔF entre dos muestras idénticas, mediante el mismo proceso utilizado para estimar el defecto de energía [Matsubara, Shirakura and Shiomi 1998]. Entonces, la generalización de (4.18) para una dada T sería:

$$\Delta F \sim L^{\theta_s}. \quad (4.19)$$

Es lógico suponer que para $T < T_c$ y $T > T_c$ deberíamos tener, respectivamente, $\theta_s > 0$ y $\theta_s < 0$ (notemos que ΔF se reduce al defecto de energía cuando $T = 0$). Esta metodología permite estimar la temperatura crítica: para $T = T_c$ debemos esperar $\theta_s = 0$ (si $d \geq d_c$). Este es el camino seguido por Shiomi *et al.* para consolidar el cruce de cumulantes mostrado en la figura 4.14 [Matsubara, Shirakura and Shiomi 1998; Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000]. Estos autores encuentran que $\theta_s > 0$ para $T = 0$ y $\theta_s \approx 0$ para $T \approx 0,2$ (valor que es muy cercano al estimado por el cruce de cumulantes, $T_c \approx 0,25$).

Hace ya unos años se han puesto en duda estas conclusiones. Cálculos realizados exhaustivamente, parecen indicar que $\theta_s = 0$ en el estado fundamental (lo que implicaría directamente que $T_c = 0$) [Hartmann and Young 2001]. El argumento esbozado por Hartmann y Young es que, probablemente, las conjeturas dadas por Shiomi *et al.* son prematuras. Dicha crítica se basa en que estos autores usaron redes pequeñas de hasta $L = 24$, estudiando el estado fundamental mediante simulaciones de Monte Carlo, en lugar de hacerlo con un algoritmo de cálculo exacto [Hartmann y Young han estudiado miles de redes de hasta $L = 480$ a $T = 0$].

Sumándose a la controversia, recientemente se ha propuesto que el valor de $\theta_s = 0$ determinado para el estado fundamental (calculando el defecto de energía) no implica directamente que $d = d_c$ [Amoruso *et al.* 2003]. En su lugar, se debería interpretar que $d \leq d_c$. De hecho, diferentes estudios arriban a la conclusión de que la dimensión crítica es fractal: $d_c = 2,5$ [Franz, Parisi and Virasoro 1994; Rajiv, Sing and Fischer 1988]. Finalmente, los análisis efectuados sobre la función de correlación de pares indican que, su comportamiento es consistente con la idea de una transición termodinámica a temperatura cero [Morgenstern and Horner 1982; Morgenstern 1983; McMillan 1983]. A su vez se ha observado que, el tiempo de MC necesario para alcanzar el equilibrio (con una dinámica tipo spin flip), muestra una ley tipo Arrhenius [McMillan 1983] a partir de la cual se infiere que la altura promedio de las barreras de energía que separan los distintos valles deberían ser finitas ($\approx 16 J$) [Morgenstern 1983]. Como podemos apreciar, todo parece indicar que en el modelo de EA en dos dimensiones a $x = 0,5$, la temperatura crítica es cero. En lo que sigue, veremos que nuestro trabajo es un nuevo aporte que señala en esa misma dirección.

Comenzamos considerando el nuevo parámetro de orden (4.2). La figura 4.15 muestra que, hasta un tamaño lineal de $L = 12$, no se observa evidencia de un cruce de cumulantes a una temperatura finita. Los cálculos se realizaron exhaustivamente, empleándose un tiempo de MC de $r = 5 \times 10^4$ para cada temperatura (y una cantidad igual para alcanzar el equilibrio, $r_0 = 5 \times 10^4$), valor que es mucho mayor que el usado para determinar la entropía del estado fundamental (ver capítulo 2). Esto permitió alcanzar una temperatura más baja de $T = 0,2$ (del orden de la temperatura crítica reportada por Shiomi *et al.*). Aunque este valor es mayor que el mínimo alcanzado por Shiomi *et al.* ($T = 0,1$ ver figura 4.14), creemos que es muy improbable que cualquier mejora en el algoritmo, permita observar un cruce de cumulantes.

Si la dimensión crítica inferior es igual o menor que $d = 2$ y la transición de fase ocurre a una $T_c \geq 0$, el cumulante de Binder debería escalar como

$$\Psi_L = \bar{\Psi}(\varepsilon L^{1/\nu}), \quad (4.20)$$

donde $\varepsilon = T - T_c$, ν el exponente de la longitud de correlación y $\bar{\Psi}$ una función universal de *saling* [Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000].

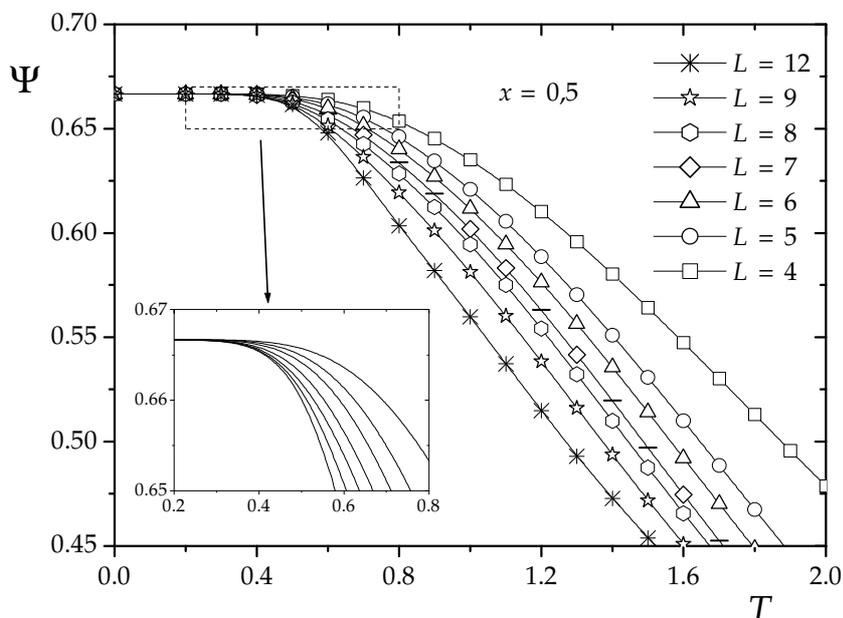


Figura 4.15. Cumulantes de Binder del parámetro de orden (4.2), para diferentes tamaños de red (2.000 muestras por cada N). En el insert podemos observar que, no se registra evidencia de la existencia de un punto universal de cruce.

En el reporte más reciente [Bhatt and Young 1988] que señala que $T_c = 0$, se logra colapsar los cumulantes del parámetro de Edwards y Anderson, tomando $\nu = 2,6$.

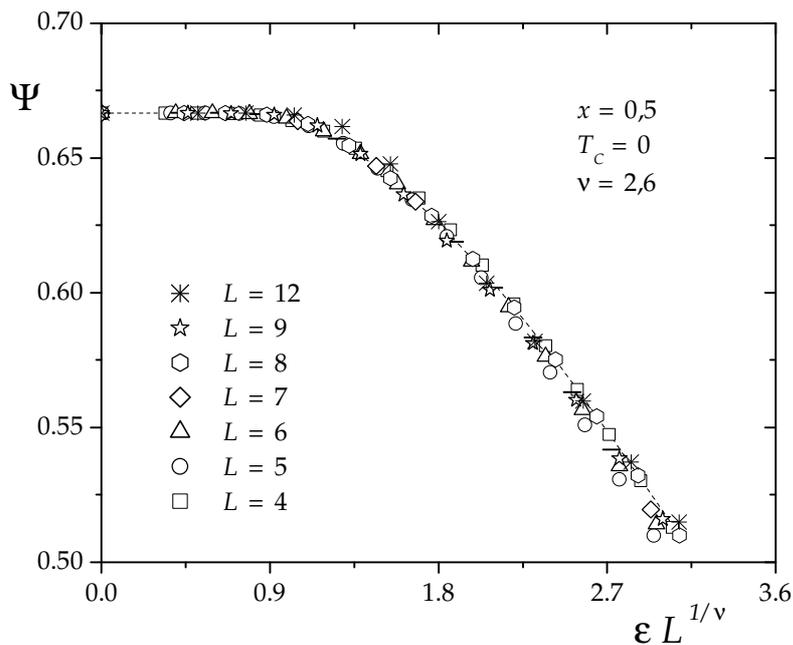


Figura 4.16. Colapso de los cumulantes de Binder del parámetro de orden (4.2), tomando $T_c = 0$ y $\nu = 2,6$.

Este valor del exponente, acuerda muy bien con el obtenido analizando directamente la función de correlación de pares: $\nu = 2,64 \pm 0,23$ [McMillan 1983]. En la figura 4.16 podemos apreciar que, para nuestro parámetro de orden, también es posible lograr un colapso de los cumulantes con esos mismos valores.

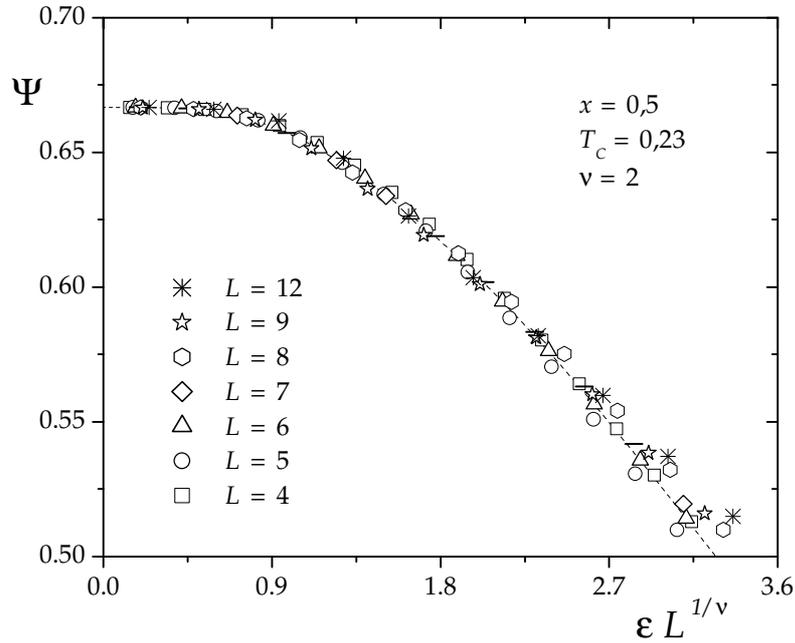


Figura 4.17. Colapso de los cumulantes de Binder del parámetro de orden (4.2), tomando $T_c = 0,23$ y $\nu = 2$.

Con la intención de realizar una comparación, en la figura 4.17 podemos apreciar un nuevo colapso, esta vez tomando $T_c = 0,23$ y $\nu = 2$. Esto fue lo reportado por Shiomi *et al.* [Shiomi, Matsubara and Shirakura 2000], como el mejor par encontrado para colapsar los cumulantes de Binder del parámetro de Edwards y Anderson (el valor de $T_c \approx 0,25$ reportado por los autores, proviene tanto del análisis del colapso de los cumulantes como de la estabilidad de la fase). Considerando que los datos de simulación acarrean errores numéricos y muestrales, concluimos que ambos colapsos son aceptables.

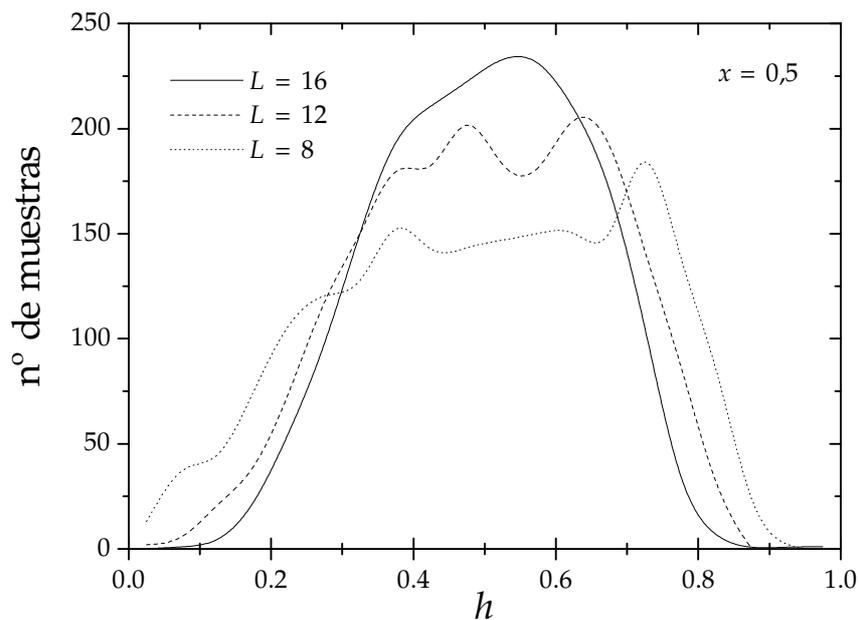


Figura 4.18. Distribución de los valores de h para los tamaños $L = 8, 12$ y 16 (se han tomado 2.000 por tamaño).

Así expuesta, esta información es muy ambigua. De hecho, aún es posible colapsar los cumulantes de la figura 4.15 usando $T_c = 0,1$ y $v \approx 2,4$ o, incluso, $T_c = 0,3$ y $v \approx 1,9$. Sin embargo, el colapso mostrado en la figura 4.16, tiene una particularidad muy importante: en él se ha usado un valor para el exponente v , calculado independientemente (analizando la función de correlación de pares). Esto le da claramente una ventaja frente a los otros análisis.

Otra forma de determinar el comportamiento crítico del sistema, es analizando directamente la RD (la cual está íntimamente relacionada con la fase). Recordemos que a una concentración de $x = 0,5$, tanto h_{im} como p mostraban una tendencia descendente con N , a pesar de que h convergía rápidamente a $0,5$ (ver figura 3.11). Esto parece indicar que, en el límite termodinámico, la isla mayor de espines podría desaparecer. De confirmarse esta especulación, nos quedaríamos con una fase notoriamente debilitada. Una información más detallada de la estructura de la RD, se muestra en las figuras 4.18 y 4.19. En la primera de ellas, se observa cómo se distribuye el valor de h para tamaños $L = 8, 12$ y 16 (2.000 muestras por cada tamaño de red). Podemos apreciar que, lentamente, esta distribución comienza a centrarse y a volverse menos extensa, confirmando la convergencia de h hacia un valor distinto de cero. Por otro lado, la figura 4.19 muestra el mismo tipo de información, esta vez para la isla mayor de la RD.

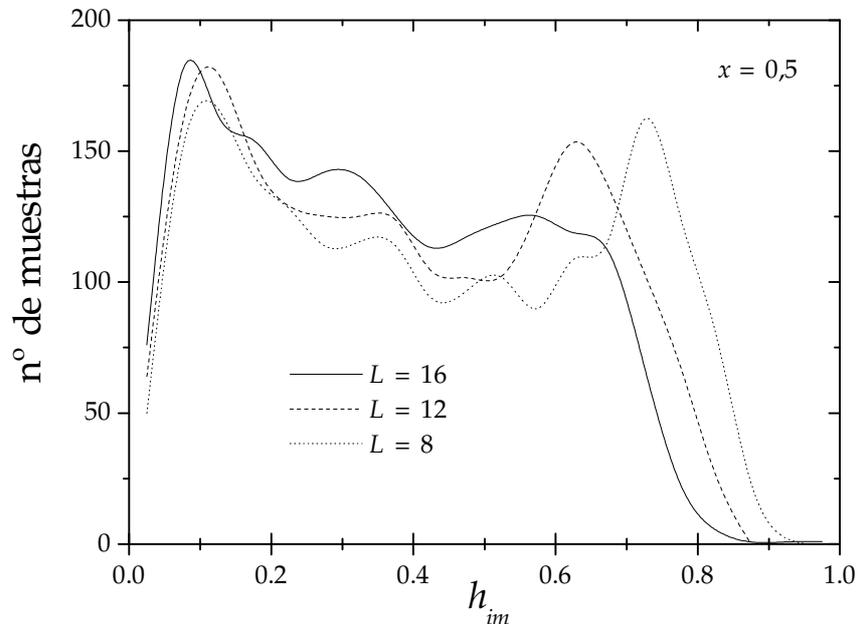


Figura 4.19. Distribución de los valores de h_{im} para los tamaños $L = 8, 12$ y 16 (se han tomado 2.000 por tamaño).

Para $L = 8$, vemos que la distribución presenta dos máximos bien definidos. Sin embargo, a medida que aumentamos el tamaño de red, observamos que el número de muestras que poseen una isla mayor de grandes dimensiones ($h_{im} > 0,5$), comienza a descender. La tendencia sugiere la desaparición de esta estructura dominante (tenemos en cuenta que, de existir otra isla en la muestra, no puede ser más extensa que la mayor).

Aunque el análisis de las distribuciones de h y h_{im} es superficial, los datos obtenidos hasta $L = 16$, sugieren que la fase es inestable e incapaz de mantener una correlación de largo alcance a una temperatura mayor que cero. Como vimos anteriormente, a partir del colapso de los cumulantes de Binder del parámetro de orden (4.2), llegamos a la misma conclusión: todo parece indicar que $T_c = 0$ para el modelo de EA en dos dimensiones con una distribución de enlaces discreta $\pm J$. Finalmente, en las perspectivas futuras, propondremos cómo proseguir este análisis, para dilucidar definitivamente el comportamiento crítico de este modelo de vidrio de espín.

Conclusiones y perspectivas futuras

En este trabajo hemos estudiado mediante simulación de MC el modelo de EA. En el capítulo 2, comenzamos explorando la factibilidad de calcular la entropía del estado fundamental con el método de integración termodinámica o MIT. Como vimos, esta técnica permitió estudiar hasta 2.000 muestras de tamaño $N = 400$. A su vez, realizamos un análisis de los errores más importantes que se cometen al implementar esta metodología. El valor de entropía obtenido, acuerda satisfactoriamente con aquellos reportados en la literatura. Esto demuestra que, es posible usar una dinámica de Glauber para calcular cantidades termodinámicas del estado fundamental de un sistema desordenado.

Posteriormente, desarrollamos una nueva técnica llamada MED, para determinar los parámetros de orden que caracterizan el estado fundamental (ver capítulo 3). Especialmente, calculamos la RD y la RR de miles de muestras de diferentes concentraciones y tamaños. Aunque centramos nuestro trabajo en la puesta a punto de esta nueva técnica, se realizaron los primeros estudios topológicos de la información obtenida. Esta sugiere que, a bajas concentraciones y en el límite termodinámico, la RD (o RR) está fraccionada en infinitas islas, predominando una estructura denominada isla mayor (la cual tiene una dimensión lineal igual a la del sistema). Más precisamente comprobamos que, para $x < x_c \approx 0,1$, la fracción de enlaces que la forman converge a un valor distinto de cero. Por arriba de esta concentración crítica, los cálculos preliminares indican que la isla mayor de la RD comienza a desaparecer. Este comportamiento fue verificado para $x = 0,5$. Esto sugiere que la RD percola sólo hasta x_c , manteniendo cohesionada la fase ferromagnética. Sin embargo, estudios recientes de precolación [Vogel *et al.* 1998], indican que dicho fenómeno sucede para $x = 0,5$. Nosotros pensamos que, este estudio debería realizarse nuevamente incorporando tamaños de red mayores, debido a que la información introducida en el presente trabajo, indica que en el límite termodinámico debería desaparecer la isla mayor (es decir, no tendría una extensión comparable a la del sistema), Probablemente se llegue a la conclusión de que, las RD que percolan se vuelven cada vez más improbables cuando $N \rightarrow \infty$. Como toda esta información fue almacenada, posteriores estudios de percolación podrían realizarse sobre este conjunto de redes.

Por otro lado, es necesario en el futuro introducir mejoras a MED. Como analizamos en el capítulo 3, existen un conjunto de configuraciones relevantes que deberían ser visitadas para resolver la estructura de la RD. En este trabajo, la metodología para encontrar esas configuraciones nos ha permitido avanzar considerablemente en el tamaño de las redes que pueden ser tratadas. Sin embargo, aún es posible realizar mejoras significativas. De hecho, con el MED indagamos cada uno de los enlaces de la RDP, lo cual no es necesario. Haciendo un análisis topológico previo de esta estructura provisoria, es posible delinear un búsqueda más precisa. En teoría, esto permitiría disminuir considerablemente los tiempos de simulación. Sin embargo, el inconveniente más importante que debemos solucionar en el futuro, es la mejora del algoritmo usado para acceder al estado fundamental. Recordemos que el MED, puede implementarse con cualquier técnica numérica que nos permita llegar al GM. En el futuro, podría usarse un algoritmo de tipo genético y búsqueda balística [Hartmann 2000], o dinámicas de tipo spin flip como el n-Fold-Way [Bortz, Kalos and Lebowitz 1975]. Estas mejoras repercutirán considerablemente en los cálculos en tres y cuatro dimensiones.

También debemos tener en cuenta que la RD no nos da exactamente la estructura de la fase. En la sección 3.3 (figura 3.7 y 3.8) pudimos comprobar que, existe la posibilidad de tener muestras con una isla mayor de espines, más grande que la identificada a través de la RD. Al incrementar el tamaño del sistema, estos mecanismos podrían llegar a ser más eficientes para establecer vínculos entre las diferentes islas de la red diluida. Entonces, esto originaría que la fase tuviera un número de islas menor que la RD. Por supuesto, el

estudio del fenómeno sería de gran importancia ya que, de existir, ayudaría a estabilizar la fase. Por otro lado, si comprobamos que el efecto no es notorio, afianzaríamos la idea de una temperatura crítica igual a cero.

Las diferencias entre la RD y la fase son muy importantes. Más allá del proceso de cálculo, la red diluida se construye observando el comportamiento de todos los pares de espines que son primeros vecinos, sobre todas las configuraciones del estado fundamental (o lo que es lo mismo, observando el estado de todos los enlaces). Por otro lado, el proceso de construcción (directo, sin usar la RD) de la fase es más complejo. Una forma idealizada de obtener esta información, consiste en recorrer todas las configuraciones del estado fundamental, observando el comportamiento de los espines desde la perspectiva de uno solo de ellos, el cual ha sido tomado como referencia. Esto permite discriminar cual es el conjunto que realmente es solidario al espín elegido. Repitiendo este esquema, podemos calcular la estructura de la fase. Como vemos, hay diferencias fundamentales en los procesos de construcción. Mientras para la RD se observa un comportamiento de corto alcance, para la fase hay que tener en cuenta en todo momento al sistema completo.

Estos son los motivos para avanzar en la modificación del MED, que permitan calcular directamente la fase (sin la RD como intermediario). Dichos cambios pueden realizarse fácilmente. Comenzamos usando como prototipo de fase a los espines que vincula la RD (en este caso el prototipo tiene menos componentes que la fase real ya que, sin duda, todos los espines que vincula la RD pertenecen a la misma). Podemos indagar al resto de los espines, para comprobar si mantienen vínculos con alguna de las islas. Una forma de hacerlo, sería congelando la orientación de un espín de una isla de la fase prototipo, en relación a la orientación de aquel que estamos indagando. Si para las dos orientaciones posibles de este par siempre podemos acceder al fundamental, entonces el vínculo no existe. Por otro lado, estos dos espines serán solidarios, si para una sola de las orientaciones relativas llegamos al GM. Este proceso puede ser repetido reiteradas veces, hasta resolver todos los vínculos que no conozcamos.

En el capítulo 4, estudiamos la transición ferromagnética a bajas concentraciones. Como vimos, con el nuevo parámetro de orden se puede recalculer el diagrama de fase. Este procedimiento debe repetirse para tres y cuatro dimensiones, ya que no existen suficientes trabajos que reporten esa información sobre el modelo de EA [Hartmann 1999]. Por otro lado, para estas mismas dimensiones y a $x = 0,5$, se ha establecido que existe una transición de fase a una temperatura finita mayor que cero. A pesar de que usando el nuevo parámetro de orden, nosotros esperamos obtener sólo correcciones insignificantes de la temperaturas críticas reportadas (aunque hay reportes contradictorios [Kawashima and Youg 1996]), la importancia de corroborar estos resultados sería otra. De obtenerse un cruce de cumulantes y un scaling adecuado que no diese lugar a dudas (los efectos espurios en la distribución del parámetro de orden de Edwards y Anderson, persisten en tres dimensiones), estaríamos corroborando que el esquema teórico introducido aquí, es capaz de disipar la controversia (mucho menor) que hay en tres y cuatros dimensiones. Por otro lado, indirectamente esto serviría para afirmar la conclusión de que la temperatura crítica en dos dimensiones es cero. Por último, la implementación de algoritmos más eficientes, hará posible todos estos estudio proyectados sobre el nuevo parámetro de orden.

Referencias

- Amoruso C., E. Marinari, O. C. Martin, and A. Pagnani, Phys. Rev. Lett. **91**, 087201 (2003).
- Berg B. A., and T. Neuhaus, Phys. Rev. Lett. **68**, 9 (1992).
- Berg B. A., and T. Celik, Phys. Rev. Lett. **69**, 2292 (1992).
- Berg B. A., and W. Janke, Phys. Rev. Lett. **80**, 4771 (1998).
- Bhatt R. N., and A. P. Young, Phys. Rev. Lett. **54**, 924 (1985).
- Bhatt R. N., and A. P. Young, Phys. Rev. B **37**, 5606 (1988).
- Binder K., and D. Stauffer, Adv. Phys. **25**, 343 (1976).
- Binder K., Z. Phys. B **26**, 339 (1977a).
- Binder K., Festkörperprobleme **17**, 55 (1977b).
- Binder K., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Vol. 7 of topics in current physics (Springer, Berlin 1979).
- Binder K., Z. Phys. B **43**, 119 (1981).
- Binder K., *Applications of the Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Vol. 36 of topics in current physics (Springer, Berlin 1984).
- Binder K., Journal of Computational Physics **59**, N° 1, mayo 30 (1985).
- Binder K., and A. P. Young, Rev. Mod. Phys. **58**, 801 (1986).
- Blackman J. A., and J. Poulter, Phys. Rev. B **44**, 4374 (1991).
- Blackman J. A., J. R. Gonçalves, and J. Poulter, Phys. Rev. E **58**, 1502 (1998).
- Bortz A. B., M. H. Kalos, and J. L. Lebowitz, J. of Comp. Phys. **17**, 10 (1975).
- Bray A. J., and M. A. Moore, J. Phys. C **17**, L463 (1984).
- Brout R., Phys. Rev. **115**, 824 (1959).
- Cheung H.-F., and W. L. McMillan, J. Phys. C **16**, 7027 (1983).
- Dekker C., A. F. M. Arts, and H. W. de Wijn, J. Appl. Phys. **63**, 4334 (1988a).
- Dekker C., A. F. M. Arts, and H. W. de Wijn, Phys. Rev. B **38**, 8985 (1988b).
- Domany E., J. Phys. C **12**, L119 (1979).
- Edwards S. F., and P. W. Anderson, J. Phys. F. **5**, 965 (1975).
- Franz S., G. Parisi, and M. A. Virasoro, J. Phys. (Francia) **4**, 1657 (1994).
- Glauber R. J., J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).
- Hartmann A. K., Phys. Rev. B **59**, 3617 (1999).
- Hartmann A. K., Phys. Rev. E **63**, 016106 (2000).
- Hartmann A. K., and A. P. Young, Phys. Rev. B **64**, 180404 (2001).
- Hukushima K., and K. Nemoto, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1604 (1996).
- Ising E., Z. Physik **31**, 253 (1925).
- Kasuya T., Prog. Theor. Phys. **16**, 45 (1956);
- Kawashima N., and A. P. Young, Phys. Rev. B **53**, R484 (1996).
- Kawashima N., and H. Rieger, Europhys. Lett. **39**, 85 (1997).
- Kerler W., and P. Rehberg, Phys. Rev. E **50**, 4220 (1994).
- Kinzel W., and K. Binder, Phys. Rev. B **24**, 2701 (1981).
- Kirkpatrick S., Phys. Rev. B **16**, 4630 (1977).
- Kittel C., *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons, 1976).
- Kolan A. J., and R. G. Palmer, J. Appl. Phys. **53**, 2198 (1982).
- Ma S-K., *Statistical Mechanics* (World Scientific, Singapur 1985).
- Matsubara F., A. Sato, O. Kosehi, and T. Shirakura, Phys. Rev. Lett. **78**, 3237 (1997).
- Matsubara F., T. Shirakura, and M. Shiomi, Phys. Rev. B **58**, R11821 (1998).
- McCoy B. M., and T. T. Wu, Phys. Rev. **176**, 631 (1968).
- McMillan W. L., Phys. Rev. B **28**, 5216 (1983).
- McMillan W. L., Phys. Rev. B **29**, 4026 (1984).
- Meirovitch, Chem. Phys. Lett. **45**, 389 (1977).

- Metropolis N., A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- Mezard M., G. Parisi, and M. A. Virasoro, *Spin glass theory and beyond* (World Scientific, Singapur 1987).
- Morgenstern I., and K. Binder, Phys. Rev. Lett. **43**, 1615 (1979).
- Morgenstern I., and K. Binder, Phys. Rev. B **22**, 288 (1980).
- Morgenstern I., and H. Horner, Phys. Rev. B **25**, 504 (1982).
- Morgenstern I., Phys. Rev. B **27**, 4522 (1983).
- Morgownik A. F. J., and J. Mydosh, Solid State Commun. **47**, 321 (1983).
- Nieto F., Tesis Doctoral, UNSL (1998).
- Nishimori H., J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 3305 (1986).
- Ogielski A. T., and I. Morgenstern, Phys. Rev. Lett. **54**, 928 (1985).
- Onsager L., Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- Ozeki Y., and H. Nishimori, J. Phys. Soc. Jpn. **56**, 3265 (1987).
- Palmer R. G., Adv. Phys. **31**, 669 (1982).
- Palmer R. G., *Proceedings of the Heidelberg Colloquium on Spin Glasses* (Lectures Notes in Physics Vol. 192, pag. 234, Berlin 1983).
- Palmer R. G., and J. Adler, Int. J. Mod. Phys. C **10**, 667 (1999).
- Press W. H., S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C++* (2nd edición, Cambridge University Press, London 2002).
- Ramirez-Pastor A. J., F. Nieto, and E. E. Vogel, Phys. Rev. B **55**, 14323 (1997).
- Ramirez-Pastor A. J., Tesis Doctoral, UNSL (1998).
- Ramirez-Pastor A. J., F. Nieto, S. Contreras, and E. E. Vogel, Physica A **283**, 94 (2000).
- Ramirez-Pastor A. J., F. Romá, F. Nieto, and E. E. Vogel, Physica A **336**, 454 (2004).
- Rajiv R., P. Sing, and M. E. Fischer, J. Appl. Phys. **63**, 3994 (1988).
- Romá F., A. J. Ramirez-Pastor, and J. L. Riccardo, Langmuir **16**, 9406 (2000).
- Romá F., A. J. Ramirez-Pastor, and J. L. Riccardo, J. Chem. Phys. **114**, 10932 (2001).
- Romá F., F. Nieto, E. E. Vogel, and A. J. Ramirez-Pastor, J. Stat. Phys. **114**, 1325 (2004).
- Ruderman M. A. and C. Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954).
- Samuelsen E. J., Phys. Rev. Lett. **31**, 936 (1973).
- Singh R. R. P., and S. Chakravarty, Phys. Rev. Lett. **57**, 245 (1986).
- Shiomi M., F. Matsubara, and T. Shirakura, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 2798 (2000).
- Shirakura T., and F. Matsubara, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 3138 (1996).
- Shirakura T., and F. Matsubara, Phys. Rev. Lett. **79**, 2887 (1997).
- Thorpe M. F., and D. Beeman, Phys. Rev. B **14**, 188 (1976).
- Toulouse G., Commun. Phys. **2**, 115 (1977).
- van Enter A. C. D., and J. L. van Hemmen, J. Stat. Phys. **32**, 141 (1983).
- van Enter A. C. D., and J. L. van Hemmen, Phys. Rev. A **29**, 355 (1984).
- van Hemmen J. L., and R. G. Palmer, J. Phys. A **15**, 3881 (1982).
- Vannimenus J., and G. Toulouse, J. Phys. C **10**, L537 (1977).
- Vogel E. E., J. Cartes, S. Contreras, W. Lebrecht, and J. Villegas, Phys. Rev. B **49**, 6018 (1994).
- Vogel E. E., S. Contreras, W. Lebrecht, and J. Cartes, J. Magn. Magn. Mater. **140-144**, 1793 (1995).
- Vogel E. E., S. Contreras, M. A. Osorio, J. Cartes, F. Nieto, and A. J. Ramirez-Pastor, Phys. Rev. B **58**, 8475(1998).
- Vogel E. E., A. J. Ramirez-Pastor, and F. Nieto, Physica A **310**, 384 (2002).
- Wang J.-S., and R. H. Swendsen, Phys. Rev. B **38**, 4840 (1988).
- Yamada I., J. Phys. Soc. Jpn. **33**, 979 (1972).

- Yosida K., Phys. Rev. **106**, 893 (1957).
- Zemansky M. W., *Calor y termodinámica* (Aguilar, 1968).

Nomenclatura

- **SG** vidrio de espín.
- T_f la temperatura de freezing.
- **RKKY** interacción de intercambio indirecta (Ruderman, Kittel, Kasuya y Yosida).
- **F** interacción ferromagnética.
- **AF** interacción antiferromagnética.
- **EA** modelo de Edwards y Anderson $\pm J$.
- **GM** estado fundamental.
- T temperatura del sistema.
- T_C temperatura crítica.
- x fracción de enlaces AF.
- k_B constante de Boltzmann.
- τ_{max} tiempo de relajación máximo.
- N número de grados de libertad o de espines.
- σ_i variable estadística o espín del sitio i -ésimo.
- γ_j variables que describen el desorden.
- τ_{flu} tiempo característico de evolución o fluctuación.
- τ_{exp} tiempo medio en el que se efectúa una medición experimental de un observable.
- F energía libre por grado de libertad.
- $\langle \dots \rangle$ promedio en el desorden.
- H hamiltoniano.
- Ω volumen del espacio fase.
- Z función de partición.
- l número de subsistemas.
- S entropía por grado de libertad o por enlace.
- G degeneración.
- Δ ancho de la distribución gaussiana.
- $\rho(S)$ distribución de entropía en el desorden.
- B campo magnético externo y SAE.
- J constante de intercambio.
- m magnetización por espín.
- L tamaño lineal del sistema.
- d dimensión del sistema.
- U energía media del sistema por grado de libertad o por enlace.
- ω estado del sistema.
- E_t un operador que representa la dinámica de evolución del sistema.
- **EAG** modelo de Edwards y Anderson gaussiano.
- J_{ij} energía de intercambio entre los sitios i y j primeros vecinos.
- $\delta(x-y)$ función delta de Dirac.
- Θ red de sitios.
- **MC** Monte Carlo.
- δQ diferencial inexacto de calor.
- R trayectoria en el espacio fase y camino reversible.
- δW diferencial inexacto de trabajo.
- **TIM** método de integración termodinámica.
- $\beta = 1/k_B T$.
- W_{if} probabilidad de aceptación de Metrópolis.
- r_0 cantidad de iteraciones que son despreciadas en el MC.

- r tiempo total de MC, para el cual el sistema ya está en el equilibrio termodinámico.
- ξ número generado al azar.
- n número de estados de equilibrio entre T_i y T_f (en TIM $T_f = \infty$ y $T_i = 0$).
- **MT** método trapezoidal.
- $f(y)$ función arbitraria de una sola variable.
- Δy separación entre puntos de integración.
- ε valor de la variable en un punto dentro del intervalo de integración.
- **IE** error de integración.
- **SE** error de simulación.
- **SAE** error de muestreo.
- C constante del IE.
- $\mu_k(T)$ dependencia de SE con k y T .
- A observable y constante del IE.
- $I_{k,n}$ integral calculada con el MT.
- $I_{k,n,r}$ integral calculada con el MT y MC.
- **EFIS** algoritmo de cálculo exacto.
- D constante del error muestral de la energía del GM.
- n_{sl} número medio de espines libres.
- **RD** red diluida de enlaces.
- h fracción de enlaces que nunca se frustran.
- N_{ES} es el número de enlaces siempre satisfechos.
- **div** división entera.
- $\delta(k,l)$ función delta de Kronecker.
- **RR** red rígida de enlaces.
- h_r fracción de enlaces que nunca se frustran o que siempre están frustrados.
- **MED** método de exploración dirigida del nivel fundamental.
- **LEG** conjunto de estados del GM, conectados por una dinámica de tipo spin flip efectuada sin costo de energía.
- **RDP** red diluida prototipo.
- **RRP** red rígida prototipo.
- n_i número máximo de reintentos efectuados en el MED.
- h_{im} fracción de enlaces de la red que pertenecen a la isla mayor de la RD.
- h_{rim} fracción de enlaces de la red que pertenecen a la isla mayor de la RR.
- p máxima fracción de espines que son solidarios en el GM.
- W conjunto que contiene la mitad de las configuraciones del GM luego de efectuar una separación ergódica determinada, o número que expresa la mitad de la degeneración: $W = G/2$.
- ϕ_i parámetro de orden de una isla.
- Φ parámetro de orden.
- σ_j^* valor que toma el espín del sitio j -ésimo, cuando la isla a la que pertenece se encuentra ordenada (en una de sus dos orientaciones posibles).
- N_i número de espines de la isla i -ésima.
- N_I número total de espines de la fase.
- q parámetro de orden de Edwards y Anderson.
- $Q_{n,m}$ superposición entre un par de configuraciones n y m .
- C capacidad calorífica.
- χ dispersión del parámetro de orden o susceptibilidad.
- Ψ cumulante del parámetro de orden.
- K_C inversa de la temperatura crítica.
- ν exponente asociado a la divergencia de la longitud de correlación en el punto crítico.

- J_L acoplamiento efectivo.
- ΔE defecto de energía.
- d_c dimensión crítica inferior.
- θ_s exponente que caracteriza la dependencia de J_L con el tamaño de la red.
- ΔF defecto de energía libre.
- ε temperatura reducida.