

Lucas Pili

Acoplamiento spin-red en el modelo de Ising en dos dimensiones

Tesis de Licenciatura en Física

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas Universidad Nacional de La Plata

Director

Santiago A. Grigera

Marzo 2017

Índice general

Ag	gradecimientos	III	
Re	esumen	v	
Abstract		VII	
1.	Introducción1.1. Modelo de Ising1.2. Solución al modelo de Ising en dos dimensiones $(D = 1, d = 2)$ 1.3. Distorsiones de la red	1 1 3 5	
2.	Modelos y desarrollo del algoritmo 2.1. Método Monte Carlo y algoritmo de Metropolis 2.1.1. Cadenas de Markov, ergodicidad, balance detallado y tasa de aceptación 2.1.2. Algoritmo de Metropolis 2.1.2. Modelo de red y sistema de osciladores armónicos 2.3. Modelo acoplado y chequeos de consistencia	9 9 11 12 14 17	
3.	Resultados3.1. Diagrama de fase $3.1.1.$ Fase FM $3.1.2.$ Fase CB $3.1.3.$ Sistema a $T = 0$ $3.1.4.$ Diagrama $3.2.$ Desplazamiento medio $3.3.$ Constante de intercambio $3.4.$ Excitaciones $3.5.$ Frustraciones $3.6.$ Antiferromagnetismo	 23 23 24 29 31 31 33 34 35 36 	
4.	Conclusiones	39	
Bi	Bibliografía		

Agradecimientos

A Santiago, por dirigir este trabajo, por su guía, paciencia y predisposición.

A Luciano, Santiago, Sofía y Valentino por su amistad durante estos años, las discusiones y las largas tardes de estudio.

A José, por su compañía y ánimo, en especial en este último trayecto.

Al resto de mis amigos, por siempre despejarme la cabeza con sus propias locuras.

A mi familia, en especial a mis padres, por esta oportunidad, su constante ánimo y apoyo.

A Ayelen, por ser y estar.

Resumen

El modelo de Ising es, sin lugar a dudas, el modelo magnético para sólidos aislantes más estudiado. Una de sus características más destacadas, es que cuenta con solución exacta para una y dos dimensiones. No obstante, la riqueza de comportamientos y fases en materiales reales, ha llevado a considerar modelos más complejos que tienen en cuenta, por ejemplo, interacciones dipolares o distorsiones de la red. En esto se ha trabajado en forma creciente en los últimos quince años y se han propuesto diversas extensiones al modelo de Ising para describir el acoplamiento entre los grados de libertad elásticos y magnéticos. En la mayoría de la investigaciones, la metodología ha sido integrar los grados de libertad elásticos, para obtener un Hamiltoniano efectivo más simple, que contiene sólo términos de spin. Sin embargo, este proceder impide conocer cómo se distorsiona la red o dar cuenta de configuraciones magnéticas, luego de posibles transiciones estructurales.

En este trabajo se considera un modelo magnético sencillo, como lo es Ising en dos dimensiones sobre una red cuadrada, con distorsiones tipo Einstein y se realizan simulaciones Monte Carlo, que tienen en cuenta ambos grados de libertad simultáneamente. Se encontró que por encima de cierto grado de acoplamiento, el sistema experimenta una transición de fase simultánea, estructural y magnética, en una fase tipo "tablero de damas" o "checkerboard". Se estudian también consecuencias adicionales de esta inestabilidad.

Abstract

The Ising model is, without a doubt, the most studied magnetic model for insulating solids. One of its most salient features is that it has an exact solution for one and two dimensions. Despite this, the richness of behaviours and phases on real materials has lead people to consider more complex models which take into account, for example, dipolar interactions or lattice distortions. The latter has been the subject of extensive work over the last fifteen years and several extensions to the Ising model have been proposed that describe the coupling between elastic and magnetic degrees of freedom. In most of this work, the methodology has been to integrate out the elastic degrees of freedom in order to obtain a simpler effective Hamiltonian, written solely in terms of spin degrees of freedom. One drawback from this methodology is that it does not allow one to obtain information about the lattice distortion or to account for magnetic scenarios occurring after a possible structural phase transitions.

In this work we consider a simple Ising magnetic model in two dimensions over a square lattice with Einstein-like distortions and do a Monte Carlo simulation that takes into account both degrees of freedom simultaneously. We find that at above a certain degree of coupling between the two degrees of freedom, the system undergoes a simultaneous structural and magnetic transition into a "checkerboard-like" phase. We have studied additional implications of this instability.

Capítulo 1 Introducción

"Nothing much of interest has happened [in physics during the war] except for Onsager's exact solution of the two-dimensional Ising model."

- Wolfang Pauli

En este capítulo se hace una breve revisión del modelo de Ising, se comentan sus características más importantes y se muestra gráficamente su solución en dos dimensiones para una red cuadrada. Asimismo, se revisan las principales formas de modelar las distorsiones de la red y su acoplamiento con los grados de libertad magnéticos.

1.1. Modelo de Ising

El modelo de Ising es un modelo magnético para sólidos aislantes, en el que los spines pueden orientarse sólo en dos direcciones e interactuar con sus vecinos más próximos (primeros vecinos). El sistema considerado es un arreglo de N sitios que forman una red n-dimensional (n = 1, 2, 3, ...), a los que se asocia una variable de spin S_i (i = 1, ..., N). Ésta puede tomar los valores +1 o -1 de acuerdo a las dos posibles orientaciones, que usualmente se las denomina 'up' y 'down' respectivamente [1]. Cabe aclarar que, cuando se trata con esta clase de modelos en Mecánica Estadística, frecuentemente se escribe al momento local como \mathbf{S} , sin importar si se trata realmente de \mathbf{S} , \mathbf{L} o \mathbf{J} . Es también convencional llamar a esta variable "spin", a pesar de que podría provenir del momento angular orbital en un materia real [2].

Un dado conjunto S_i especifica una configuración del sistema cuya energía E_I , si se considera campo aplicado en la dirección de cuantificación, está dada por

$$E_{I} = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J \; S_{i} S_{j} - B \sum_{i} S_{i}, \qquad (1.1)$$

donde J es la llamada constante de intercambio que pose
e unidades de energía y B es el campo magnético que, como se lo hace usualmente en este campo de estudio, también se lo expresa en unidades de E. El símbolo < i, j > se refiere a sumar sólo sobre primeros vecinos y el $\frac{1}{2}$ se lo coloca debido a que < i, j > es igual a < j, i >.

Por otro lado, la magnetización por spin se define como

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} S_i. \tag{1.2}$$

Hay materiales donde se desarrolla un orden magnético, aún en ausencia de campo aplicado, como consecuencia de la interacción magnética. Esto da lugar a clasificarlos en ferromagnetos y antiferromagnetos, según los spines se alineen en forma paralela o antiparalela respectivamente. En el primer caso, el material adquiere un momento magnético neto distinto de cero (Fig. 1.1(a)), mientras que en el segundo, a pesar de tener magnetización nula, se observa un claro orden que favorece el alineamiento antiparalelo (Fig. 1.1(b)). Sin embargo, esto sucede sólo si la temperatura es menor a una temperatura característica o crítica, conocida como temperatura de Curie en el caso ferromagnético y de Néel en el antiferromagnético. Por encima de esta temperatura, en ambos casos, los spines individuales están desordenados (Fig. 1.1(c)), dando lugar a una magnetización media nula. Lo mismo sucedería si no existiesen las interacciones ya que, en ausencia de campo, los momentos magnéticos individuales estarían térmicamente desordenados, apuntando en direcciones arbitrarias, y no podrían sumar un momento magnético neto distinto de cero [3].



Figura 1.1: Distribución de direcciones para los momentos magnéticos locales para el modelo de Ising sin campo aplicado (a) por encima de la temperatura crítica, (b) debajo de la temperatura crítica en un ferromagneto y (c) debajo de la temperatura crítica en un antiferromagneto.

En el caso específico de un ferromagneto, una única dirección es elegida por los spines para ordenarse por debajo de la temperatura crítica T_c . Este fenómeno de orden se conoce como ruptura espontánea de la simetría y su consecuencia más importante es que produce una transición de fase en T_c . Es posible definir un parámetro de orden, cuyo promedio térmico sea nulo para $T > T_c$ y distinto de cero para $T < T_c$ [4]. Esta cantidad actúa como indicador del orden del sistema, depende exclusivamente de la transición y puede ser escalar o vectorial, real o complejo, etc. En el caso del ferromagnetismo, el parámetro de orden es simplemente la magnetización. Es importante distinguir entre la dimensión d del sistema y la dimensión D del parámetro de orden, que en ningún sentido son necesariamente la misma. En el caso del modelo de Ising se cumple D = 1 y la dimensión del sistema puede ser $d = 1, 2, 3, \dots$

En la ec. 1.1 se observa que el tipo de orden que los spines tomarán, depende de la constante de intercambio J. En un ferromagneto (J < 0), es más favorable que dos spines vecinos estén alineados de forma paralela. Por ello, el estado de menor energía es como el de la fig. 1.1(a). En cambio, en un antiferromagneto (J > 0), dos spines minimizarán su energía de interacción al apuntar en direcciones opuestas. En este caso, es posible distinguir dos subredes intercaladas, cada una con un momento magnético no nulo, pero de signos opuestos. El estado fundamental será como el de la figura 1.1(b) y la magnetización neta, igual a cero [2].

El origen de J puede rastrearse a la interacción electrostática y al principio de exclusión de Pauli. Podría esperarse que la interacción magnética entre momentos discretos tenga su origen en los respectivos campos magnéticos, ya sea a través de la interacción dipolar o, menos directamente, por el acoplamiento spin-órbita. Sin embargo, éstas no son usualmente las interacciones magnéticas dominantes, sino que su mayor fuente es la interacción electrostática de Coulomb [3].

El modelo de Ising es el más simple para explicar la física subyacente a un material ferromagneto. No obstante, manifiesta las características más importantes de los complejos sistemas de la mecánica estadística [2]. En una dimensión (d = 1) fue resuelto por Ising en 1925 [5] y en dos (d = 2), por Onsager en 1944 [6], aunque la expresión para la magnetización espontánea fue publicada por Yang en 1952 [7]. El modelo en d = 2 es el único ejemplo no trivial de una transición de fase, que puede ser resuelto con rigor matemático. Su importancia también radica en que puede emular otros modelos, a través de un cambio de variables convenientes, entre los que se encuentran los denominados 'Gas de Red' y 'Aleación binaria'. El modelo de Ising también cuenta con solución exacta para dimensión infinita $(d \to \infty)$, pero en tres dimensiones d = 3 permanece sin solución.

La extensión natural del modelo de Ising es tratar a los spines como vectores, dando lugar a los modelos conocidos como XY (D = 2) y de Heisenberg (D = 3). Estos a su vez pueden tratarse de manera clásica o cuántica, a diferencia del modelo de Ising que, si se trata sin campo aplicado o con campo aplicado en la dirección de cuantificación de los spines, es un modelo intrínsecamente clásico. Asimismo, al presentar el modelo se supuso la homogeneidad del espacio. Sin embargo, otra manera de complejizar el problema es otorgarle una dependencia con el sitio a la constante de intercambio, i.e., $J \rightarrow J_{ij}$.

1.2. Solución al modelo de Ising en dos dimensiones (D = 1, d = 2)

Debido a que el modelo utilizado durante este trabajo, se basa en el modelo de Ising resuelto por Onsager, parece adecuado presentar al menos los puntos más importantes de dicha solución y mostrar gráficamente el comportamiento de algunas magnitudes físicas de interés, para el caso ferromagnético (J < 0).

Como ya se mencionó anteriormente, el sistema presenta una transición de fase.

Por encima de la temperatura crítica, los spines se encuentran orientados de forma arbitraria, por lo que el sistema posee una magnetización media neta igual a cero. Esta fase se la denomina paramagnética. Debajo de la temperatura crítica, en la fase ferromagnética, los spines se alinean dando lugar a un momento magnético macroscópico.

La transición de fase que tiene lugar en este sistema es de segundo orden. Se diferencian transiciones de primer y segundo orden. En aquellas, se presenta una discontinuidad en una derivada primera de la energía libre, mientras que en éstas, la discontinuidad está en alguna de las derivadas de orden mayor. Una característica de las transiciones de segundo orden, es que en T_c diverge la longitud de correlación. Ésta es la longitud a la cual las propiedades generales de un sistema comienzan a diferir, i.e., la distancia a la cual las fluctuaciones de los grados de libertad microscópicos están correlacionados unos con otros. Si dos partes de un sistema están separados por una longitud mucho mayor que la de correlación, sus fluctuaciones serán independientes. Como en T_c diverge la longitud de correlación, entonces divergen las fluctuaciones y, por tanto, divergen también cantidades físicas como el calor específico y la susceptibilidad magnética. Esto último se comprueba a través del teorema de fluctuación-disipación, sobre el que se volverá más adelante.

En el modelo de Ising en dos dimensiones, la temperatura crítica está dada por

$$T_c = \frac{2}{\log(1+\sqrt{2})} \frac{J}{k_B} \approx 2,269 \frac{J}{k_B}$$

En el gráfico de la figura 1.2(a) se muestra el calor específico c_v vs. T/T_c . A medida que la temperatura se acerca a T_c por ambos lados, el calor específico diverge, en este caso, de manera logarítmica [1][6].



Figura 1.2: Solución exacta del modelo de Ising en 2D para el calor específico (a) y la magnetización media por spin (b).

Por otra lado, en la figura 1.2(b) se observa la magnetización media por spin men función de T/T_c . Para $T < T_c$ el sistema adquiere un momento magnético neto distinto de cero. Asimismo, esto significa que aparece un orden de largo alcance, ya que la magnetización es el parámetro de orden del sistema.

1.3. Distorsiones de la red

Al sistema magnético subyace una red que usualmente se la considera rígida, estática. Sin embargo, si se desea tomar un modelo más realista, es necesario considerar posibles distorsiones de la misma, así como un acoplamiento entre los grados de libertad magnéticos y elásticos. Para ello, se continúa con el Hamiltoniano magnético de interacción a primeros vecinos, pero se le agrega un término relacionado a las distorsiones de la red. Además, se escribe una constante de intercambio que posee una dependencia con las deformaciones y, por lo tanto, con el sitio: $J \rightarrow J_{ij}$. Se distinguen al menos tres maneras de modelar la distorsiones de la red y el acoplamiento. El utilizar una u otra depende tanto del sistema, como del aspecto específico que se busca modelar.

El modelo más sencillo es el de fonón-enlace de Penc *et al.* [8] [9], que es introducido con el fin de mostrar la estabilidad en un modelo de Heisenberg antiferromagnético sobre una red pirocloro. Se define a \mathbf{u}_i como el desplazamiento del spin *i* desde su posición de equilibrio y a u_{ij} como la combinación lineal: $\mathbf{u}_{ij} = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j$. El modelo propone entonces, escribir la energía elástica como proporcional a la sumatoria de u_{ij}^2 sobre todos los sitios. En este planteo, los u_{ij} son parámetros independientes, i. e., el largo de cada enlace puede independientemente expandirse o contraerse. Además, se propone una constante de intercambio lineal en u_{ij} . Con estos supuestos, siendo $K_{\rm el}$ la constante elástica, el Hamiltoniano se escribe

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j [1 - u_{ij}] + \frac{K_{\text{el}}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} u_{ij}^2.$$
(1.3)

Este modelo es poco realista, ya que cambiar el largo de un enlace requiere mover uno o ambos de los átomos del mismo, por lo que los otros enlaces a los que estos están conectados, también se distorsionan. Un modelo más natural puede ser formulado en término de los desplazamientos individuales de cada átomo, con la longitud de los enlaces determinada trivialmente a partir de estos. Por este motivo, el segundo método considera un modelo tipo Einstein, donde la energía elástica es la suma de las fuerzas restauradoras para cada átomo [10]. También se propone una dependencia de la constante de intercambio con la distancia. Para ello, suponiendo desplazamientos atómicos pequeños en relación al parámetro de red *a*, se hace un desarrollo en función de $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$:

$$J_{ij} \equiv J(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \approx J_0 \ [1 - \alpha (r_{ij} - r_{ij}^0)], \tag{1.4}$$

donde r_{ij}^0 es el parámetro de red a, J_0 es la constante de intercambio evaluada en r_{ij}^0 y $\alpha = -\frac{\partial J}{\partial r_{ij}}\Big|_{r_{ij}=r_{ij}^0} > 0$ es la constante de acoplamiento. Por lo tanto, el Hamiltoniano entero toma la forma

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_0[1 - \alpha(r_{ij} - a)] \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{K_{\text{el}}}{2} \sum_i u_i^2.$$
(1.5)

Figura 1.3: Cadena dimerizada con constantes de intercambio alternadas. Figura extraída de [15].

Este modelo es más utilizado que el anterior, principalmente en investigaciones que estudian el acoplamiento magnetoelástico como mecanismo para levantar degeneración de estados en redes antiferromagnéticas, con frustración geométrica (triangular, kagome, pirocloro) [10] [11]. A su vez, en algunos trabajos se complejiza aún más el modelo mediante el agregado de interacciones dipolares [12].

En la gran mayoría de las investigaciones que utilizan alguno de los dos modelos arriba descritos, una vez planteado el Hamiltoniano, se realiza una integración gaussiana de los grados de libertad elásticos. Esto da lugar a un Hamiltoniano efectivo de spin, cuyos términos extras, respecto de la interacción magnética original, pueden interpretarse como interacción a segundos y terceros vecinos. Este procedimiento tiene como ventaja simplificar el Hamiltoniano y su tratamiento posterior, al depender sólo de la interacción entre los spines. Sin embargo, al no contar más con los términos elásticos, ya no hay manera de conocer cómo se deforma el sistema. El análisis energético se realiza sobre una configuración estática, perdiendo así información sobre las distorsiones del sistema y haciendo imposible, por ejemplo, analizar transiciones de fase estructurales. Es por tanto un tratamiento aproximado que, aunque facilita el análisis, produce la pérdida de información.

El último modelo consiste en considerar una red compresible con fonones tipo Debye, donde cada par de primeros vecinos comprime un resorte armónico de constante $K_{\rm el}$ y longitud de relajación *a*. Por otro lado, la constante de intercambio se escribe igual que en el modelo anterior. Entonces, se propone el siguiente Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[J_0 [1 - \alpha (r_{ij} - a)] \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{K_{\text{el}}}{2} (r_{ij} - a)^2 \right].$$
(1.6)

Se recurre a este modelo, por ejemplo, en los trabajos de Gu *et al.* [13] y Shokef *et al.* [14] para estudiar una red triangular antiferromagnética compresible. En ambos, a través de simulaciones computacionales, se estudia un Hamiltoniano acoplado como el descrito arriba. En la investigación de Gu *et al.* se muestra que mediante el agregado del acoplamiento se remueve la frustración del sistema rígido y se encuentra una fase ordenada. En cambio, en el trabajo de Shokef *et al.*, se recurre a este modelo de red triangular para explicar propiedades de un sistema coloidal frustrado. Lo interesante de estas investigaciones es que consideran al Hamiltoniano en su totalidad, sin realizar las integraciones gaussianas. A pesar de que los objetivos estos trabajos difieren de los nuestros, este tipo de análisis se asemeja en gran medida al que se pretende realizar en la presente investigación.

Otro antecedente a mencionar, que considera un sistema magnético en una red con deformaciones, es el estudio de un fenómeno conocido como 'Spin-Peierls' [15][16]. El sistema sobre el que se trabaja es un cadena antiferromagnética de spines en el

modelo XY. Se muestra que el antiferromagneto uniforme $(J_{ij} \equiv J)$ es inestable, respecto a una deformación de la red que dimeriza (junta de a pares) la cadena en un antiferromagneto alternado $(J_{ij} \rightarrow J_1 \text{ y } J_2)$ (Fig. 1.3).

Capítulo 2 Modelos y desarrollo del algoritmo

El sistema a estudiar es un modelo de Ising en dos dimensiones, sobre una red cuadrada con posibilidad de deformaciones. Asimismo, posee una constante de intercambio que depende de dichas distorsiones, lo que significa que los grados de libertad magnéticos y elásticos están acoplados.

Se utilizan simulaciones computacionales como herramienta de análisis. Por ello, este capítulo comienza con una discusión sobre el método Monte Carlo y las condiciones de ergodicidad y balance detallado. Además, se describe en particular el algoritmo de Metropolis y su implementación.

Seguidamente, se discute sobre el modelo de red elegido: de qué manera se modelan las distorsiones del sistema y cómo se escribe la energía elástica. Se comentan algunos detalles del algoritmo y se exponen las pruebas llevadas a cabo para corroborar su correcto funcionamiento.

A continuación, se presenta el Hamiltoniano acoplado. Se describe con detalle cómo se definió la dinámica del algoritmo en cuanto a los movidas magnéticas y elásticas y se muestran los chequeos de consistencia realizados. Finalmente, se termina con un comentario sobre las funcionalidades del programa.

2.1. Método Monte Carlo y algoritmo de Metropolis

Para un sistema en equilibrio térmico con un reservorio de temperatura o, lo que es lo mismo, para un sistema en el ensamble canónico, la probabilidad de que éste se encuentre en el estado μ de energía E_{μ} está dada por la distribución de Boltzmann:

$$p_{\mu} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta\mu}}{\sum_{\nu} \mathrm{e}^{-\beta\nu}} = \frac{1}{Z} \mathrm{e}^{-\beta\mu}, \qquad (2.1)$$

siendo $\beta = \frac{1}{k_{\rm B}T}$ y Z la función de partición, que en la ec. 2.1 aparece como constante de normalización.

En este ensamble es posible obtener el valor medio de funciones respuesta (calor específico, susceptibilidad magnética, etc.) a partir de la magnitud de las fluctuaciones, a través del teorema de fluctuación-disipación ya mencionado en el capítulo anterior. Para el calor específico y la susceptibilidad, este teorema, también conocido como teorema de respuesta lineal, muestra que se pueden calcular como

$$C_v = k_{\rm B} \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \tag{2.2}$$

$$\chi_{\rm M} = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \tag{2.3}$$

La idea básica detrás del método Monte Carlo, es simular la fluctuación térmica arbitraria de un sistema desde un estado a otro, en el transcurso de un experimento. Con la probabilidad de la ec. 2.1, el valor medio de una cantidad Q se calcula como

$$\langle Q \rangle = \sum_{\mu} Q_{\mu} p_{\mu} = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta\mu}, \qquad (2.4)$$

donde la suma es sobre todos los posibles estados del sistema. El método Monte Carlo consiste en elegir un subconjunto arbitrario de esos estados, a partir de alguna distribución de probabilidad ρ_{μ} , de manera de aproximar la ec. 2.4 por

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^{M} Q_{\mu_i} \rho_{\mu_i}^{-1} \mathrm{e}^{-\beta\mu_i}}{\sum_{j=1}^{M} \rho_{\mu_j}^{-1} \mathrm{e}^{-\beta\mu_j}},$$
(2.5)

siendo $\{\mu_1, ..., \mu_M\}$ los estados elegidos [17]. A Q_M se lo denomina estimador de Qy cumple que $Q_M \to \langle Q \rangle$ cuando $M \to \infty$.

El problema radica ahora en la elección de la distribución ρ_{μ} . Una posibilidad es el muestreo simple, que consiste en escoger todos los estados con igual probabilidad, i.e., hacer todos los ρ_{μ} iguales. Sin embargo, el estimador resulta ser una estimación poco precisa del valor esperado, excepto para M muy grande, lo cual es poco eficiente desde un punto de vista computacional. Además suele suceder que la suma de la ec. 2.4 es dominada por un número pequeño de estados. Esto acontece debido a que, como se mencionó antes, en un sistema real no todos los estados son recorridos con igual probabilidad, sino de acuerdo a la distribución de Boltzmann (ec. 2.1). Por ejemplo, a bajas temperaturas el sistema se encuentra casi todo el tiempo en el estado fundamental o, a lo sumo, en alguno de los primeros excitados, puesto que no hay energía térmica suficiente para promoverlo a niveles superiores.

La alternativa al muestreo simple es el denominado muestreo de importancia, donde en lugar de elegir los M estados con igual probabilidad, se los escoge de modo tal que se cumpla la distribución de Boltzmann, i.e., se hace $\rho_{\mu} = Z^{-1} e^{-\beta\mu}$. De esta manera, la ec. 2.5 se reduce a

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i}.$$
 (2.6)

Sin embargo, ahora surge la cuestión de cómo elegir los estados para que cada uno aparezca con la probabilidad de Boltzmann deseada. Para ello es necesario primero introducir algunos conceptos.

2.1.1. Cadenas de Markov, ergodicidad, balance detallado y tasa de aceptación

Un proceso de Markov es un mecanismo que, dado un sistema en un estado μ , genera un nuevo estado ν de ese sistema. Lo hace de manera aleatoria y con una probabilidad de transición $P(\mu \to \nu)$. Esta probabilidad debe ser independiente del tiempo y de la historia del sistema, i.e., depender sólo de los estados μ y ν y no de otros por los que el sistema haya pasado. Además debe satisfacer $\sum_{\nu} P(\mu \to \nu) = 1$. Cabe destacar que $P(\mu \to \mu)$ no debe ser necesariamente nula, por lo que el nuevo estado generado puede ser el mismo que el de partida.

En una simulación Monte Carlo se usa una sucesión de procesos de Markov, para ir de un estado arbitrario a otro cualquiera. Esto es lo que se denomina cadena de Markov. Si se cumplen las condiciones de ergodicidad y balance detallado, que se describirán más adelante, se garantiza que luego de una sucesión lo suficientemente grande de procesos de Markov, empezando desde cualquier estado del sistema, los nuevos estados aparecerán con una probabilidad dada por la distribución de Boltzmann (ec. 2.1). Se dice que en ese momento el sistema ha alcanzado el equilibrio.

La condición de ergodicidad consiste en que, dado el suficiente tiempo, debe ser posible para la cadena de Markov alcanzar cualquier estado del sistema desde cualquier otro. Esto es importante ya que si algún estado fuera inaccesible, sin importar cuanto tiempo pase, tendría probabilidad 0 y no p_{ν} como se desea. Esta condición implica que, aunque es posible hacer igual a cero algunas de las probabilidades de transición, siempre debe haber un camino que una dos estados cualesquiera con probabilidades de transición no nulas.

Por otro lado, la condición de balance detallado es la que asegura que sea la distribución de Boltzmann y no otra, la generada luego de que el sistema alcanza el equilibrio. Lo primero que debe cumplirse es que en promedio el sistema debe ir de μ a ν tanto como va de ν a μ . Esto queda garantizado si

$$p_{\mu}P(\mu \to \nu) = p_{\nu}P(\nu \to \mu). \tag{2.7}$$

Es posible encontrar una demostración de esta afirmación en [17]. Si se cumple la ec. 2.7, la cadena de Markov tenderá a una dada distribución p_{μ} . Como se desea que la distribución de equilibrio sea la de Boltzmann, se elige p_{μ} de acuerdo a la ec. 2.1. La ecuación de balance detallado (ec. 2.7) implica entonces

$$\frac{P(\mu \to \nu)}{P(\nu \to \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}.$$
(2.8)

Queda hacer un comentario sobre cómo elegir cada nuevo estado: estando el sistema en un estado μ cómo elijo el estado ν . Notar que la ec. 2.8 sólo fija el cociente $\frac{P(\mu \to \nu)}{P(\nu \to \mu)}$, lo cual otorga cierta libertad a la hora de elegir los nuevos estados. Para ver esto, se comienza por escribir a la transición de probabilidad como

$$P(\mu \to \nu) = g(\mu \to \nu) \ A(\mu \to \nu) \tag{2.9}$$

La cantidad $g(\mu \to \nu)$ se denomina probabilidad de selección y es la probabilidad de que, dado un estado inicial μ , el algoritmo genere un nuevo estado ν . Por otro lado, $A(\mu \to \nu)$ es la tasa de aceptación e indica que si el sistema inicia en un estado μ y el algoritmo genera un nuevo estado ν , se debe aceptar este nuevo estado y cambiar el sistema hacia el mismo, una fracción de tiempo $A(\mu \to \nu)$; el resto del tiempo se debe permanecer en el estado μ . Se puede elegir para la tasa de aceptación cualquier valor entre 0 y 1, lo cual brinda libertad para escoger las probabilidades $g(\mu \to \nu)$ como se prefiera, ya que la ec. 2.8 sólo fija el cociente

$$\frac{P(\mu \to \nu)}{P(\nu \to \mu)} = \frac{g(\mu \to \nu) \ A(\mu \to \nu)}{g(\nu \to \mu) \ A(\nu \to \mu)}.$$
(2.10)

 $P(\nu \to \mu) = g(\nu \to \mu) A(\nu \to \mu)$ El cociente $\frac{A(\mu \to \nu)}{A(\nu \to \mu)}$ puede tomar cualquier valor entre cero e infinito, lo que significa que tanto $g(\mu \to \nu)$ como $g(\nu \to \mu)$ pueden tomar el valor que se quiera. Por lo tanto, para el armado de un algoritmo Monte Carlo, se construye un algoritmo que, dados estados μ , genere nuevos estados ν arbitrarios con alguna probabilidad $g(\mu \to \nu)$, y luego se aceptan o rechazan al azar con una tasa de aceptación $A(\mu \to \nu)$, que se elige de forma tal de satisfacer la ec. 2.10.

2.1.2. Algoritmo de Metropolis

Se comentará ahora sobre la aplicación del método Monte Carlo, para el estudio del modelo de Ising (ec. 1.1) en dos dimensiones sobre una red cuadrada, a través del algoritmo de Metropolis. Como se mencionó anteriormente, en este modelo magnético cada spin puede tomar el valor +1 o -1, lo que en una red de N spines da un total de 2^N estados diferentes.

En primer lugar, es conveniente discutir sobre la forma de pasar de un estado a otro del sistema. Las energías de un sistema en equilibrio térmico permanecen dentro de un rango acotado, i.e., las fluctuaciones son pequeñas en comparación a la energía total. Esto indica que un mecanismo adecuado para cambiar de estado, es considerar sólo aquellos que difieren del actual en el giro de un solo spin. Un algoritmo que cumple con esto se dice que tiene una dinámica tipo *single-spin-flip*. [17]. El algoritmo de Metropolis que se describirá a continuación utiliza esta dinámica y ello asegura que se cumpla la condición de ergodicidad, ya que es posible llegar a cualquier estado desde cualquier otro, en una red de tamaño finito, girando uno por uno los spines en los que ambos estados difieren.

En el algoritmo de Metropolis todas las probabilidades de selección $g(\mu \rightarrow \nu)$ para cada uno de los nuevos estados posibles ν , que difieren en un giro de spin respecto del estado μ , tienen el mismo valor. Esto quiere decir que se utiliza una distribución de probabilidad uniforme para elegir el nuevo posible estado. La condición de detalle balanceado (ec. 2.8) se transforma entonces en

$$\frac{P(\mu \to \nu)}{P(\nu \to \mu)} = \frac{g(\mu \to \nu) \ A(\mu \to \nu)}{g(\nu \to \mu) \ A(\nu \to \mu)} = \frac{A(\mu \to \nu)}{A(\nu \to \mu)} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}.$$
(2.11)

Que da por definir la tasa de aceptación $A(\mu\to\nu),$ que en el algoritmo de Metropolis toma la forma

$$A(\mu \to \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})} & \text{si } E_{\nu} - E_{\mu} > 0, \\ 1 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$
(2.12)

La ec. 2.12 quiere decir que si se escoge un estado de energía igual o menor que la actual, se acepta siempre la transición a ese estado; en cambio, si éste posee energía mayor, puede que se acepte o no, de acuerdo a la probabilidad dada en la ecuación.

Con todos los elementos mencionados hasta ahora, se puede describir una implementación básica del algoritmo de Metropolis:

- 1. Se comienza desde un estado μ de energía E_{μ} a una temperatura T.
- 2. Se sortea un spin al azar.
- 3. Se calcula la diferencia de energía $\Delta E = E_{\nu} E_{\mu}$, entre el posible nuevo estado ν y el estado actual μ .
- 4. Si $\Delta E \leq 0$, se acepta la movida (se cambia el estado del sistema a ν) y se vuelve al paso 2.
- 5. Si $\Delta E > 0$, se genera un número aleatorio $r \in (0, 1)$ y se calcula $w = e^{-\beta \Delta E}$: si $r \leq w$ se acepta la movida, sino se permanece en el estado μ . Se vuelve al paso 2.

Se conoce como un paso del algoritmo, cuando se realizan desde los puntos 2 a 4. Asimismo, se entiende por paso Monte Carlo (PMC) a la ejecución de N pasos del algoritmo.

En el punto 3, el cálculo de ΔE se lleva a cabo de la siguiente manera:

$$\Delta E = E_{\nu} - E_{\mu} = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{\nu} S_{i}^{\nu} S_{j}^{\nu} - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{\mu} S_{i}^{\mu} S_{j}^{\mu}$$
$$= \sum_{i \text{ n.n. } k} J_{ik}^{\mu} S_{i}^{\mu} (S_{k}^{\nu} - S_{k}^{\mu})$$
$$= -2 S_{k}^{\mu} \sum_{i \text{ n.n. } k} J_{ik}^{\mu} S_{i}^{\mu}$$
(2.13)

donde en la segunda línea la suma es sobre los spines *i* vecinos del spin *k* que se pretende girar (*i* n.n. *k*) y se hace uso del hecho que sólo el spin *k* cambia su orientación, por lo que $S_i^{\nu} = S_i^{\mu}$. Para la expresión de la tercera línea, es sencillo mostrar que $S_k^{\nu} - S_k^{\mu} = -2S_k^{\mu}$.

Se realizan tantos PMC como sea necesario para alcanzar el equilibrio a esa temperatura y luego se continúa corriendo el algoritmo para la toma de medidas. En cada PMC se anotan magnitudes físicas de interés, como la energía y la magnetización del sistema. Completados todos los PMC se calculan valores medios con la ec. 2.6. También es conveniente anotar las cantidades al cuadrado, para luego poder hacer uso de las ecs. 2.2 y 2.3 y así calcular el calor específico y la susceptibilidad. Finalmente, se cambia ligeramente la temperatura y se comienza de nuevo desde el punto 1.

A continuación se presentan dos gráficos que muestran el calor específico por spin c_v (fig. 2.1(a)) y la susceptibilidad magnética por spin χ_M (fig. 2.1(b)), para redes de distintos tamaños $L \times L$, junto con la solución exacta. Se ha definido $k_{\rm B} = 1$, convención que se mantendrá a lo largo del trabajo. En ambas figuras se observa que los resultados obtenidos con el método Monte Carlo difieren respecto a la solución de Onsager y que, además, cuanto más pequeña es la red, mayor es esa diferencia. Esto se debe a que en toda simulación se trabaja con redes de tamaño finito, mientras que la solución de Onsager se refiere a un sistema infinito en el límite termodinámico. La diferencia más importante es que la solución exacta presenta una no analiticidad en T_c , como ya se mencionó en el capítulo anterior, que no es reproducida por la simulación. La técnica de análisis de tamaño finito o *finite* size scaling, por ejemplo, permite extrapolar resultados de simulaciones sobre redes finitas al límite de sistemas de tamaño infinito y extraer buenos resultados para el comportamiento en el límite termodinámico. Debido a falta de tiempo, en este trabajo no se recurrió a la mencionada técnica, por lo que fue necesario precisar un criterio para la determinación de la temperatura crítica. Se definieron dos valores para la misma: las temperaturas a la que el calor específico y la susceptibilidad alcanzan su máximo.

2.2. Modelo de red y sistema de osciladores armónicos

El primer paso para el desarrollo del algoritmo fue la elección del modelo de red. En el capítulo anterior se mencionaron los tres algoritmos más importantes de la literatura, a saber: fonón-enlace de Penc *et al.*, Einstein y Debye. El modelo fonónenlace de Penc *et al.*, como ya se comentó antes, es poco realista y sólo sirve como primer acercamiento a sistemas acoplados. Por otro lado, la razón para no optar por un modelo compresible tipo Debye, es que, a pesar de que en este trabajo se modelan sólo sitios magnéticos, se está pensando en una red intersticial, donde no todos los átomos interactúan magnéticamente. Además, ya se encuentra estudiado extensamente en la literatura (ver por ejemplo [13] o [14]). Por estos motivos, se escogió el modelo de Einstein. La energía elástica $E_{\rm el}$, que se corresponde con la de un sistema de N osciladores armónicos en dos dimensiones, se escribe entonces

$$E_{\rm el} = \frac{K_{\rm el}'}{2} \sum_{i=1}^{N} u_i'^2, \qquad (2.14)$$

donde $K'_{\rm el}$ es la constante elástica, cuyo valor fue necesario definir. Para ello, se comenzó por calcular el valor medio de algunas cantidades físicas de interés. Si se escribe la energía como la suma de 2N osciladores armónicos desacoplados y se



Figura 2.1: Calor específico (a) y magnetización media por spin (b) del modelo de Ising en dos dimensiones para varios tamaños LxL de red, obtenidos por simulaciones computacionales. La línea sólida es de guía para los ojos. También se muestra la solución exacta.

utiliza el teorema de equipartición, se obtiene

$$U = \langle E \rangle = \frac{K'_{\text{el}}}{2} \sum_{i=1}^{N} \langle u'^2_i \rangle$$

= $\frac{K'_{\text{el}}}{2} \sum_{k=1}^{2N} \langle \xi^2_k \rangle = NT.$ (2.15)

A continuación, a partir de la ec. 2.15, se calcula

$$c_v = \frac{1}{N} \frac{dU}{dT} = 1, \qquad (2.16)$$

$$\frac{K'_{\rm el}}{2}N\langle u'^2\rangle = NT \quad \Longrightarrow \quad \langle u'^2\rangle = \frac{2T}{K'_{\rm el}},\tag{2.17}$$

donde para obtener la ec. 2.17 se tuvo en cuenta la independencia de los osciladores. De modo de definir un valor para la constante elástica, una vez calculado $\langle u'^2 \rangle$ en función de T, se propuso que la temperatura de fusión T^* de la red, debería ser al menos 15 veces más grande que la temperatura crítica T_c del sistema magnético. Esto se debe a que desea estudiar al sistema en la configuración cristalina, lejos del punto de fusión. Para definir T^* se recurrió al criterio de Lindemann [18], que dice que un sólido funde cuando se cumple

$$\frac{\sqrt{\langle u'^2 \rangle}}{a} \approx 0.1 , \qquad (2.18)$$

donde a es el parámetro de red. Por lo tanto:

$$0.1 \approx \frac{\sqrt{\langle u'^2 \rangle}}{a} = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{2T^*}{K'_{\text{el}}}} \implies T^* \approx \frac{K'_{\text{el}}}{200} a^2.$$
(2.19)

Por otro lado, según se observa en la figura 2.1(a), para una red con L = 8, se cumple $T_c \approx 2.4 |J_0|$. Con lo expuesto hasta aquí, es ahora posible calcular un valor para $K'_{\rm el}$ de forma tal que se cumpla $T^* = 15 T_c$:

$$\frac{K'_{\rm el}}{200}a^2 = 15 \ T_c \quad \Longrightarrow \quad K_{\rm el} = \frac{K'_{\rm el}}{|J_0|}a^2 = 7200, \tag{2.20}$$

donde ahora $K_{\rm el}$ es una constante adimensional. Definiendo además $u_i = \frac{u'_i}{a}$ es posible escribir la ec. 2.14 como

$$E_{\rm el} = |J_0| \frac{K_{\rm el}}{2} \sum_{i=1}^{N} u_i^2.$$
(2.21)

Definidas estas cantidades, se escribió un programa en Fortran para simular, mediante el algoritmo de Metropolis, un sistema con energía de acuerdo a la ec. 2.14. Para el movimiento de los átomos, se escogió un desplazamiento fijo δ con valor igual al 1% de la constante de red. Se discretizó también la distribución angular del espacio en 360 unidades. La elección de δ se hizo en principio con cierta arbitrariedad y se justificó a posteriori. De esta forma, cada paso se realiza de la siguiente manera: se sortea un sitio k (k = 1, ..., N), un ángulo θ ($\theta = 1, ..., 360$) y se propone un movida en las coordenadas $x \in y$ que sea

$$\Delta u_x = \delta \, \cos(\theta), \tag{2.22}$$

$$\Delta u_y = \delta \, \sin(\theta). \tag{2.23}$$

Con las ecs. 2.22 y 2.23, se calcula la diferencia entre las energías del estado propuesto E_{ν} y del estado actual E_{μ} :

$$\Delta E_{\rm el} = E_{\nu} - E_{\mu} = |J_0| \frac{K_{\rm el}}{2} \sum_i (u_i^{\nu})^2 - |J_0| \frac{K_{\rm el}}{2} \sum_i (u_i^{\mu})^2$$

$$= |J_0| \frac{K_{\rm el}}{2} \Big[(u^{\nu})^2 - (u^{\mu})^2 \Big]$$

$$= |J_0| \frac{K_{\rm el}}{2} \Big[(\Delta u_x)^2 + (\Delta u_y)^2 + 2 (u_x^{\mu} \Delta u_x + u_y^{\mu} \Delta u_y) \Big], \qquad (2.24)$$

donde en la segunda y tercera línea se utilizó que sólo el átomo del sitio k cambia su posición $(u \equiv u_k)$ y que u^{ν} puede escribirse, por ejemplo en la coordenada x, como $u_x^{\nu} = u_x^{\mu} + \Delta u_x$.

A continuación, se acepta o rechaza la movida, se calculan las magnitudes físicas de interés y se repite. Se realizaron corridas de 10^6 PMC. Como ejemplo, en la figs. 2.2(a) y 2.2(b), se muestran el calor específico y el desplazamiento cuadrático medio. Los resultados concuerdan con lo calculado analíticamente (ecs. 2.16 y 2.17). Por este motivo, se concluye que la elección de un δ fijo es adecuada.

Como último punto, falta verificar si es posible tomar un mejor valor para δ . Para ello, se realizaron corridas con distintos valores de δ y se graficó el desplazamiento medio en función de la temperatura (fig. 2.3). Se observa que a medida que disminuye T, las curvas de mayor δ se separan del comportamiento esperado ($\langle u \rangle \sim T^{1/2}$). En el rango de temperaturas graficado, son $\delta = 0,001$ y $\delta = 0,01$ los dos valores de δ para los que se conserva la tendencia. Sin embargo, para $\delta = 0,001$ las demás magnitudes como c_v presentan mayor ruido estadístico. Por esta razón, se confirmó la elección de $\delta = 0,01$.

2.3. Modelo acoplado y chequeos de consistencia

Como se mencionó en la introducción, el sistema que acopla los grados de libertad magnéticos y elásticos, se identifica por poseer una constante de intercambio que depende de las distorsiones de la red y, por lo tanto, del sitio. Para deformaciones pequeñas, en comparación al parámetro de red ($u \ll a$), se espera una dependencia lineal en J_{ij} [10]. Por consiguiente, en el modelo elegido, toma la forma

$$J_{ij} = J_0 \left[1 - \alpha'(r'_{ij} - a) \right] = J_0 \left[1 - \alpha(r_{ij} - 1) \right], \tag{2.25}$$



(b) Desplazamiento cuadrático medio.

Figura 2.2: Calor específico (a) y desplazamiento cuadrático medio (b) para un sistema de osciladores armónicos en dos dimensiones, sobre una red 8x8. La línea sólida corresponde a la expresión analítica: ecs. 2.16. y 2.17 respectivamente.



Figura 2.3: Desplazamiento medio para un sistema de osciladores armónicos en dos dimensiones sobre una red 8x8. La línea sólida es de guía para los ojos.

con $\alpha = \alpha' a$ como constante de acoplamiento adimensional y $r_{ij} = \frac{r'_{ij}}{a}$ también variable adimensional. El Hamiltoniano completo se escribe

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_0[1 - \alpha(r_{ij} - 1)] \ S_i \cdot S_j + |J_0| \frac{K_{\text{el}}}{2} \sum_i u_i^2.$$
(2.26)

Como la constante de intercambio depende de las posiciones de los spines, la diferencia de energía, al proponer una movida de distorsión, incluye ahora otros términos que provienen de la interacción magnética. Por lo tanto, el ΔE total es la suma de $\Delta E_{\rm el}$ (ec. 2.24) y un $\Delta E_{\rm spin}$, que se calcula:

$$\Delta E_{\rm spin} = E_{\nu} - E_{\mu} = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{\nu} S_{i}^{\nu} S_{j}^{\nu} - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{\mu} S_{i}^{\mu} S_{j}^{\mu}$$

$$= S_{k}^{\mu} \sum_{i \text{ n.n. } k} S_{i}^{\mu} (J_{ik}^{\nu} - J_{ik}^{\mu}), \qquad (2.27)$$

donde nuevamente se usó que sólo el átomo del sitio k cambia su posición.

Para la construcción de la dinámica del algoritmo, se recurrió a la aproximación de Born-Oppenheimer (BO). Como la masa del núcleo es mucho mayor que la de los electrones, puede aproximarse que estos se adaptan casi instantáneamente a cualquier posición de aquellos [19]. En síntesis, se propone que los tiempos característicos electrónicos son muchos más cortos que los nucleares. En la simulación esto se traduce en que las movidas de distorsión deben realizarse con la parte magnética equilibrada. Para mayor simplicidad, de ahora en adelante, se denominará pasos de red a las movidas de distorsión y pasos de spin a las movidas magnéticas. Con esto en cuenta, utilizar la aproximación de BO significa que por cada paso de red, deben realizarse varios de spin.



Figura 2.4: Magnetización media por spin para $\alpha = 0$ y K = 0, sobre una red 8x8. La línea sólida es de guía para los ojos.

Se comenzó con un número alto de PMC de spin (300) por cada paso de red. A continuación, se fue disminuyendo esta cantidad y se observó que los resultados no sufrían modificación. Esto es ventajoso, ya que indica que el comportamiento del sistema tiene poca dependencia con la dinámica elegida. Finalmente, se decidió que por cada paso de red, se realizara un PMC de spin, lo cual concuerda con la aproximación de BO realizada y otorga los mismos resultados que para números mayores de PMC de spin.

Una vez armado el algoritmo, se realizaron chequeos de consistencia para corroborar que simulase adecuadamente el sistema. Se comenzó por hacer corridas con el Hamiltoniano de la ec. 2.26 completo, pero sin acoplamiento, i.e., $\alpha = 0$. En primer lugar, en la fig. 2.4 se muestra el resultado para la magnetización media por spin para $\alpha = 0$ y para el modelo de Ising. Como era deseado, se observa que ambas curvas coinciden.

Por otro lado, en la fig. 2.5 se muestra el calor específico, donde se ve que la curva obtenida para $\alpha = 0$ se corresponde, como era esperado, con la suma de un sistema de osciladores armónicos (ec. 2.16) y el modelo de Ising.

Por último, en la fig. 2.6 se encuentra graficado el desplazamiento medio para $\alpha = 0$ y para el sistema de osciladores armónicos ($J_0 = 0$). Nuevamente, como es deseado, se observa que las curvas coinciden.

Para concluir este capítulo, cabe mencionar a modo de síntesis, que el programa desarrollado durante este trabajo emplea el método Monte Carlo con el algoritmo de Metropolis y permite realizar barridos en temperatura (a campo magnético fijo) o en campo (a temperatura fija).



Figura 2.5: Calor específico para $\alpha = 0$ y K = 0 sobre una red 8x8. La línea sólida es de guía para los ojos.



Figura 2.6: Desplazamiento medio para el Hamiltoniano completo con $\alpha = 0$ sobre una red 8x8. La línea sólida es de guía para los ojos.

Capítulo 3 Resultados

Se comenzó por estudiar un sistema ferromagnético $(J_0 < 0)$. Para ello se realizaron corridas con distintos valores de la constante de acoplamiento α entre 0 y 120, para redes con condiciones de contorno periódicas de 8×8 y 16×16 . En ambos casos se observó que por encima de cierto grado de acoplamiento, en lugar de la usual transición ferromagnética (FM), el sistema experimenta una transición de fase simultánea, estructural y magnética, en una fase tipo *checkeboard* (CB). Por lo tanto, es necesario dividir los datos a analizar en dos grupos: con α mayor o menor a 60. Este valor de α , obtenido tanto a través de la simulaciones como de manera analítica, es para el cual ambas fases poseen la misma energía a T = 0, lo que significa que para $\alpha < 60$ se obtiene la fase FM y para $\alpha > 60$, la fase CB.

La sección empieza con el análisis llevado a cabo para la construcción del diagrama de fase y continúa con el estudio de algunas propiedades de cada fase. Seguidamente, se habla sobre excitaciones halladas respecto del estado fundamental CB y posibles frustraciones. Se termina haciendo un breve comentario sobre lo que sucede en un sistema antiferromagnético $(J_0 > 0)$. Todos los resultados corresponden a los obtenidos con la red 8×8 , salvo que se indique lo contrario.

3.1. Diagrama de fase

Se dividirá esta sección en cuatro partes: análisis de la fase FM, análisis de la fase CB, sistema a T = 0 y diagrama propiamente dicho.

3.1.1. Fase FM

Para $\alpha < 60$ se recolectaron datos durante 10⁶ PMC, luego de 10⁴ PMC para termalización, para valores de $\alpha = 10, 20, 30, 40$ y 50. Se observó que, en este caso, el sistema continúa sufriendo la misma transición ferromagnética que el sistema desacoplado. Como ejemplo, en la fig. 3.1 se puede ver una configuración para un sistema con $\alpha = 40$ debajo de T_c .

Para determinar la temperatura crítica T_c se recurrió al criterio mencionado en el capítulo anterior, observando los máximos en el calor específico por spin y la susceptibilidad magnética por spin. En las figs. 3.2(a) y 3.2(b) se encuentran graficadas,



Figura 3.1: Fase FM para $\alpha = 40 \operatorname{con} T/|J_0| = 0,1$. La cuadrícula punteada, que sirve de guía a los ojos, pasa por las posiciones de equilibrio del sistema desacoplado. El color de las flechas y la dirección en que apuntan hace referencia a las dos posibles orientaciones de los spines. Los puntos de colores representan los valores de J_{ij} , de acuerdo a la leyenda presente en la figura.

como ejemplo, estas magnitudes para $\alpha = 20$ y $\alpha = 40$, junto con las curvas para el sistema desacoplado ($\alpha = 0$) como referencia. Se observa que la temperatura crítica cambia, debido a la forma en que se modifica J_{ij} con α , siendo cada vez menor a medida que aumenta α .

3.1.2. Fase CB

Por encima de $\alpha = 60$ se vio que el sistema experimenta una transición de fase diferente, en una fase tipo *checkeboard* (CB). En este caso, se recolectaron datos durante 10^7 PMC, con igual tiempo de termalización que antes, para valores de $\alpha = 70, 80, 90, 100, 110$ y 120. En la fig. 3.3 se muestra una configuración para un sistema con $\alpha = 100$ debajo de T_c . Lo primero que se ve es que la fase está compuesta por bloques ferromagnéticos, ordenados a su vez, de forma antiferromagnética entre sí. Esto da lugar a la existencia de dos J característicos: J_1 para los spines dentro de cada bloque y J_2 para los spines entre bloques contiguos. Otro punto a destacar, es que las posiciones de equilibrio de esta fase están desplazadas respecto a las de un sistema desacoplado, lo cual caracteriza a la transición estructural. La transición de fase completa es, como se dijo previamente, una combinación de una transición magnética y otra estructural que ocurren simultáneamente. La conveniencia energética de esta fase proviene justamente, del alargamiento de los enlaces antiferromagnéticos y la contracción de los ferromagnéticos.

Nuevamente para la determinación de la temperatura crítica se usó el mismo criterio que antes. Sin embargo, como la magnetización de la fase CB es idénticamente



(b) Susceptibilidad magnética.

Figura 3.2: Calor específico (a) y susceptibilidad magnética (b) para $\alpha = 20$ y $\alpha = 40$. También se muestra como referencia las curvas para el sistema desacoplado ($\alpha = 0$). La línea sólida es de guía para los ojos.



Figura 3.3: Fase CB para $\alpha = 100 \text{ con } T/|J_0| = 0,1$. La cuadrícula punteada, que sirve de guía a los ojos, pasa por las posiciones de equilibrio del sistema desacoplado. El color de las flechas y la dirección en que apuntan hace referencia a las dos posibles orientaciones de los spines. Los puntos de colores representan los valores de J_{ij} , de acuerdo a la leyenda presente en la figura.

nula (ver fig. 3.3), fue necesario definir un parámetro de orden distinto. Para ello se consideró en primer lugar, que hay cuatro posibles configuraciones en el estado fundamental, tal como se muestra en los recortes de las figs. 3.4(a), 3.4(b), 3.4(c) y 3.4(d). En cada una se representan 16 spines, ubicados en el extremo inferior izquierdo de la red.

Se toma por ejemplo la configuración de la fig. 3.4(a) y se define una función CB_1 que dependa de la enumeración dada a los spines (i = 1, ..., N), que sume +1 cuando *i* corresponde a un spin *up* de esta configuración y reste -1 en un spin *down* (restar -1 equivale a sumar 1). Esta función dará 1 como resultado, al dividirla por el número de spines, si se aplica a esa configuración. Si en cambio, esta misma función se aplica a cualquiera de las otras configuraciones, dará 0. De manera análoga, se definen funciones CB_2 , CB_3 y CB_4 que den 1, si se las aplica a las configuraciones de las figs. 3.4(b), 3.4(c) y 3.4(d) respectivamente, y 0, si se las evalúa en cualquiera de las otras. Con estas funciones se definió entonces el parámetro de orden

$$PO = (|CB_1| + |CB_2|) - (|CB_3| + |CB_4|).$$
(3.1)

Esta cantidad tiene la cualidad de que, si se calcula por spin, da 1 como resultado si el sistema se encuentra en la fase CB (en cualquiera de sus configuraciones) y es idénticamente nula en la fase FM. Se escogió esa forma en particular, pues se desea que también de 0 si se la aplica sobre otras configuraciones con orden de largo alcance, consideradas excitaciones de la fase CB, de las que se hablará más adelante. Asimismo, da como resultado en promedio 0 para la fase paramagnética, siendo entonces una buena elección como parámetro de orden. Seguidamente, se



Figura 3.4: Posibles configuraciones en el estado fundamental de la fase CB. Cada figura corresponde a un recorte que incluye a 16 spines ubicados en el extremo inferior izquierdo de la red. Los desplazamientos están exagerados para mayor claridad. La cuadrícula punteada, que sirve de guía a los ojos, pasa por las posiciones de equilibrio del sistema desacoplado. Se ha anotado explícitamente la posición (0,0) como referencia.

definió la susceptibilidad χ_{CB} , calculada de la misma manera que χ_M , pero con *PO* en lugar de *M*. En las figs. 3.5(a) y 3.5(b) se encuentran graficadas, para $\alpha = 80$ y $\alpha = 100$, el calor específico y la susceptibilidad χ_{CB} .



Figura 3.5: Calor específico (a) y susceptibilidad (b) para $\alpha = 80$ y $\alpha = 100$. La línea sólida es de guía para los ojos.

Para terminar con este primer análisis de la fase CB, se muestra en la fig. 3.6 el calor específico por spin para dos redes con L = 8 y L = 16. Como se comentó en el capítulo anterior, se observa que el pico para la red de mayor tamaño es más estrecho y de mayor altura.



Figura 3.6: Calor específico para redes de 8×8 y 16×16 con $\alpha = 100$.

3.1.3. Sistema a T = 0

Como último elemento para la construcción del diagrama de fase, se determinó para qué valor de α , a T = 0, las fases CB y FM poseen igual energía. En la fig. 3.7 se esquematiza un recorte de la fase CB, que representa la celda utilizada para el cálculo de la energía.



Figura 3.7: Esquema de la celda utilizada para el cálculo de la energía.

Se supone en principio que a T = 0, $\vec{u_i}$ es tal que sus proyecciones sobre los ejes x e y son iguales, de esta manera es sencillo calcular

$$r_{ij}^1 = 1 - 2\frac{u}{\sqrt{2}},\tag{3.2}$$

$$r_{ij}^2 = 1 + 2\frac{u}{\sqrt{2}},\tag{3.3}$$

donde $u \equiv u_i = |\vec{u_i}|$. Con estas cantidades es posible calcular

$$J_1 = J_0[1 - \alpha(1 - 2\frac{u}{\sqrt{2}} - 1)] = J_0(1 + \alpha\sqrt{2}u) \quad \text{con} \quad S_i S_j = 1,$$
(3.4)

$$J_2 = J_0[1 - \alpha(1 + 2\frac{u}{\sqrt{2}} - 1)] = J_0(1 - \alpha\sqrt{2}u) \quad \text{con} \quad S_i S_j = -1.$$
(3.5)

De esta manera, la energía por spin, considerando la celda indicada (fig. 3.7), toma el valor

$$\mathcal{E}^{\rm CB} = \frac{E^{\rm CB}}{N} = \frac{4J_1 - 4J_2 + 4|J_0|\frac{K_{\rm el}}{2}u^2}{4} = 2\sqrt{2} \ J_0 \ \alpha \ u + |J_0|\frac{K_{\rm el}}{2}u^2. \tag{3.6}$$

Como el sistema está a T = 0, minimizar la energía libre F = E - TS (con S la entropía), significa minimizar E. Se busca entonces el mínimo de ε^{CB} respecto del desplazamiento u:

$$\frac{\partial \mathcal{E}^{\rm CB}}{\partial u}\Big|_{u_{\rm min}} = 0 \quad \Longrightarrow \quad u_{\rm min} = \sqrt{8}\frac{\alpha}{K_{\rm el}},\tag{3.7}$$

donde u_{\min} es el valor de u que minimiza ε^{CB} . Si se evalúa ε^{CB} en u_{\min} se tiene

$$\mathcal{E}_{\min}^{CB} \equiv \mathcal{E}^{CB}(u_{\min}) = -4 \frac{\alpha^2}{K_{el}} |J_0|.$$
(3.8)

Por otro lado, la energía por spin de la fase ferromagnética a T = 0 es trivialmente

$$\mathcal{E}_{\min}^{\text{FM}} = \frac{E_{\min}^{\text{FM}}}{N} = -2|J_0|.$$
 (3.9)

Igualando las ecs. 3.8 y 3.9 se obtiene el valor de α buscado:

$$\mathcal{E}_{\min}^{\text{CB}} = \mathcal{E}_{\min}^{\text{FM}} \implies \alpha = \sqrt{\frac{K_{\text{el}}}{2}} = 60$$
 (3.10)

Por lo tanto, se obtiene que para $\alpha = 60$ las energías de las fases FM y CB son iguales a T = 0. Para concluir con este análisis, cabe destacar que si S_iS_j de J_2 no fuese -1, entonces $J_1 + J_2 = 2J_0$, lo que significaría que con un J_{ij} lineal nunca sería estable que el sistema se deforme, puesto que no se minimizaría la parte magnética de la energía y aumentaría la elástica.

3.1.4. Diagrama

Ya con todos los elementos necesarios, se construyó el diagrama de fase que se muestra en la fig. 3.8, a partir de los valores de T_c obtenidos tanto del calor específico como de la susceptibilidad. Se observa que la temperatura crítica decrece hasta $\alpha = 60$ y a partir de allí aumenta. Además, se ve que para $\alpha > 60$, específicamente desde $\alpha = 80$, los dos valores de T_c para cada valor de α no coinciden. Esto se debe a que en esta región, los efectos de tamaño finito son más importantes.



Figura 3.8: Diagrama de fase del sistema para una red 8×8 . Se muestran dos curvas, una obtenida a partir del calor específico y otra de la susceptibilidad. La línea sólida es de guía para los ojos. En miniatura se muestran las configuraciones para cada región.

3.2. Desplazamiento medio

Otro aspecto a analizar fue el desplazamiento medio. Por un lado, en la fig. 3.9, se muestra $\langle u \rangle$ para todos los valores de α menores a 60, junto al resultado para $\alpha = 0$. Se observa que todas las curvas tienden a la del sistema desacoplado ($\alpha = 0$), uniéndose a ella luego de la transición de fase para cada valor de α .

Por otro lado, en la fig. 3.10 se encuentra graficado el desplazamiento medio para $\alpha = 70$ y $\alpha = 80$. Se presentan varias diferencias respecto a las curvas de $\alpha < 60$. Por un lado, se distingue un claro comportamiento lineal a izquierda y derecha de T_c , que no se observa para ningún valor de α menor a 60, y se nota un comportamiento más brusco en T_c . Por otro lado, se ve que las curvas no tienden a cero a medida que $T \rightarrow 0$. En realidad, se esperaba que ello sucediera de acuerdo a la ec. 3.7, donde se muestra que el valor del desplazamiento medio para T = 0 depende de α y es distinto de cero.



Figura 3.9: Desplazamiento medio para todos los valores de α menores a 60. También se muestra como referencia la curva para el sistema desacoplado ($\alpha = 0$). La línea sólida es de guía para los ojos.



Figura 3.10: Desplazamiento medio para $\alpha = 70$ y $\alpha = 80$. La línea sólida es de guía para los ojos.

Para corroborar lo anterior, se realizó un ajuste lineal de las curvas $\langle u \rangle$ vs. T por debajo de T_c y se obtuvo así el valor $\langle u(T = 0) \rangle$ para cada valor de $\alpha > 60$. En la fig. 3.11 se muestran los resultados junto a la recta esperada por la ec. 3.7 y se observa que el acuerdo es muy bueno.



Figura 3.11: Desplazamiento medio a T = 0 para cada valor de $\alpha > 60$. La recta es el comportamiento esperado de acuerdo a la ec. 3.7

3.3. Constante de intercambio

Respecto a la constante de intercambio, se separa el análisis para $\alpha < 60$ y $\alpha > 60$, como en la sección anterior. En la fig. 3.12 se muestra $\langle J_{ij} \rangle$ vs. T para todos los valores de $\alpha < 60$. En primer lugar se observa un ligero cambio en el comportamiento cuando se alcanza T_c , el cual se intensifica a medida que α aumenta. También se ve que $\frac{\langle J_{ij} \rangle}{|J_0|} \rightarrow -1$ a media que $T \rightarrow 0$. Esto era de esperarse, ya que $\langle u \rangle \rightarrow 0$ cuando $T \rightarrow 0$ y por lo tanto la configuración para cualquier valor de $\alpha < 60$ es la misma que para el sistema desacoplado.



Figura 3.12: Constante de intercambio para cada valor de $\alpha < 60$. La línea sólida es de guía para los ojos.

Por otro lado, en la fig. 3.13 está graficada el valor medio de la constante de intercambio en función de la temperatura para $\alpha = 70$ y $\alpha = 80$. Se distingue un comportamiento muy brusco a la altura de T_c pero, no obstante, se mantiene la tendencia $\frac{\langle J_{ij} \rangle}{|J_0|} \rightarrow -1$ cuando $T \rightarrow 0$. Esto sucede porque, como se dijo antes, si se suman los valores de J_1 y J_2 de la fase CB, sin tener en cuenta cómo cambia $S_i S_j$ en cada caso, se obtiene $-2|J_0|$, tal como se deduce a partir de las ecs. 3.4 y 3.5.



Figura 3.13: Constante de intercambio para $\alpha = 70$ y $\alpha = 80$. La línea sólida es de guía para los ojos.

3.4. Excitaciones

Al llevar a cabo las corridas se observó que, algunas veces, al ordenarse el sistema con $\alpha > 60$, éste elegía una fase diferente, tipo tiras o *stripes* (ST) (fig. 3.14), manteniendo el mismo valor de T_c .

Se considera una fase pues posee orden de largo alcance pero, al mismo tiempo, representa una excitación respecto a la fase CB, ya que posee energía mayor. Para comprobar esto último se realizaron medidas de recocido para ambas fases, CB y ST. Éstas consisten en tomar una configuración con el sistema ya ordenado en una de las dos fases ($T < T_c$) y enfriar con un paso ΔT pequeño (menor al utilizado en las corridas usuales). En la fig. 3.15 se muestra, como ejemplo, el recocido hecho para $\alpha = 60$. En realidad, en este caso, el sistema no elige ninguna de las fases para ordenarse ya que posee justo el valor crítico de la constante de acoplamiento. Sin embargo, es posible ver que la energía de la fase ST es ligeramente mayor a la CB. Asimismo, se agregó un recocido con la fase FM. Se distingue que, tal como se esperaba, la energía de la fase FM y CB coinciden para $\alpha = 60$ (ec. 3.10).

Por último, cabe mencionar que se puede pensar en otras fases excitadas, diferentes a la ST, que el sistema real podría elegir. Un posible ejemplo es una configuración que combinase bloques CB y ST. No obstante, en este trabajo, no se observaron por el tamaño de la red sobre el que se realizaron las corridas.



Figura 3.14: Fase ST para $\alpha = 100 \text{ con } T/|J_0| = 0,1$. La cuadrícula punteada, que sirve de guía a los ojos, pasa por las posiciones de equilibrio del sistema desacoplado. El color de las flechas y la dirección en que apuntan hace referencia a las dos posibles orientaciones de los spines. Los puntos de colores representan los valores de J_{ij} , de acuerdo a la leyenda presente en la figura.



Figura 3.15: Energía media para las fases FM, CB y ST con $\alpha = 60$. La línea sólida es de guía para los ojos.

3.5. Frustraciones

Si bien el estudio de la frustración será objeto de futuras investigaciones más allá de este trabajo, se realizaron corridas preliminares de modo de observar el comportamiento del sistema cuando el tamaño de la red no es conmensurado con



Figura 3.16: Fase CB para redes de 9×9 y 10×10 con $\alpha = 100$ y $T/|J_0| = 0,1$. La cuadrícula punteada, que sirve de guía a los ojos, pasa por las posiciones de equilibrio del sistema desacoplado. El color de las flechas y la dirección en que apuntan hace referencia a las dos posibles orientaciones de los spines. Los puntos de colores representan los valores de J_{ij} , de acuerdo a la leyenda presente en la figura.

la estructura de la fase CB. Se utilizaron redes 9×9 (fig. 3.16(a)) y 10×10 (fig. 3.16(b)) con $\alpha = 100$, las cuales son frustradas respecto de la fase CB. Esto se debe a que la unidad mínima para armar esta fase es 4×4 spines, por lo que L ($L \times L$) debe ser múltiplo de 4 para que pueda darse. Se observó que al frustrar el sistema, se forman combinaciones de bloques CB y ST.

3.6. Antiferromagnetismo

Para finalizar este capítulo, se presentan algunos resultados sobre sistemas antiferromagnéticos $(J_0 > 0)$. Como en el caso de las frustraciones, se llevó a cabo sólo un análisis preliminar por falta de tiempo, pero fue posible extraer algunas conclusiones importantes.

En la fig. 3.17 se muestra una configuración con $\alpha = 100$ debajo de T_c para un sistema con $J_0 > 0$. Se observa que la fase obtenida es CB. No obstante, a diferencia de la fase CB de un sistema ferromagnético, son los enlaces antiferromagnéticos los que disminuyen su longitud, mientras que la de los ferromagnéticos aumentan.

A pesar de que no se construyó el diagrama de fase, se espera que sea igual al del caso ferromagnético (fig. 3.8). Para corroborar esto, en la fig. 3.18 se muestra el calor específico por spin para dos sistemas con $\alpha = 100$, uno con $J_0 < 0$ y otro con $J_0 > 0$, observándose que ambas curvas coinciden.



Figura 3.17: Fase CB para $\alpha = 100 \text{ con } T/|J_0| = 0,1 \text{ y } J_0 > 0$. La cuadrícula punteada, que sirve de guía a los ojos, pasa por las posiciones de equilibrio del sistema desacoplado. El color de las flechas y la dirección en que apuntan hace referencia a las dos posibles orientaciones de los spines. Los puntos de colores representan los valores de J_{ij} , de acuerdo a la leyenda presente en la figura.



Figura 3.18: Calor específico para un sistema ferromagnético y otro antiferromagnético con $\alpha = 100$. La línea sólida es de guía para los ojos.

Capítulo 4 Conclusiones

Se estudió el modelo de Ising en dos dimensiones con distorsiones tipo Einstein, a través de simulaciones Monte Carlo que considerasen ambos grados de libertad simultáneamente. Se encontró que por encima de cierto grado de acoplamiento, el sistema experimenta una transición de fase simultánea, estructural y magnética, en una fase tipo *checkerboard*. Se analizaron también consecuencias adicionales de esta inestabilidad, como el comportamiento del desplazamiento medio y de la constante de intercambio.

Quedaron varios temas para continuar investigando. De lo comentado a lo largo del trabajo, un estudio fundamental a realizar, es el análisis de tamaño finito. Asimismo, es importante la profundización del análisis llevado a cabo sobre sistemas antiferromagnéticos y redes frustradas.

A su vez, como continuación natural de la investigación, resta analizar cómo se modifica el diagrama de fase al agregar campo magnético externo.

Como último punto a mencionar, sería interesante la aplicación de este estudio sobre otras geometrías, en principio en dos dimensiones, como la triangular y la kagome.

Bibliografía

- Huang, K. Statistical Mechanics, 2nd Edition (John Wiley & Sons, New York, 1987).
- [2] Simon, S. H. The Oxford solid state basics (Oxford University Press, New York, 2013).
- [3] Ashcroft, N. W. & Mermin, D. Solid State Physics (Saunders College, Philadelphia, 1976).
- [4] Blundell, S. Magnetism in Condensed Matter (Oxford master series in condensed matter physics) (Oxford University Press, New York, 2001).
- [5] Ising, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. Zeitschrift für Physik 31, 253-258 (1925).
- [6] Onsager, L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an orderdisorder transition. *Physical Review* 65, 117 (1944).
- Yang, C. N. The spontaneous magnetization of a two-dimensional Ising model. *Physical Review* 85, 808 (1952).
- [8] Penc, K., Shannon, N. & Shiba, H. Half-magnetization plateau stabilized by structural distortion in the antiferromagnetic Heisenberg model on a pyrochlore lattice. *Physical review letters* 93, 197203 (2004).
- [9] Motome, Y., Penc, K. & Shannon, N. Monte Carlo study of half-magnetization plateau and magnetic phase diagram in pyrochlore antiferromagnetic Heisenberg model. *Journal of magnetism and magnetic materials* **300**, 57–61 (2006).
- [10] Bergman, D. L., Shindou, R., Fiete, G. A. & Balents, L. Models of degeneracy breaking in pyrochlore antiferromagnets. *Physical Review B* 74, 134409 (2006).
- [11] Jia, C., Nam, J. H., Kim, J. S. & Han, J. H. Lattice-coupled antiferromagnet on frustrated lattices. *Physical Review B* 71, 212406 (2005).
- [12] Gómez Albarracín, F. A., Cabra, D. C., Rosales, H. D. & Rossini, G. L. Spinphonon induced magnetic order in the Kagome ice. *Physical Review B* 88, 184421 (2013).

- [13] Gu, L., Chakraborty, B., Garrido, P. L., Phani, M. & Lebowitz, J. L. Monte Carlo study of a compressible Ising antiferromagnet on a triangular lattice. *Physical Review B* 53, 11985 (1996).
- [14] Shokef, Y., Souslov, A. & Lubensky, T. C. Order by disorder in the antiferromagnetic Ising model on an elastic triangular lattice. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 108, 11804–11809 (2011).
- [15] Pincus, P. Instability of the uniform antiferromagnetic chain. Solid State Communications 9 (1971).
- [16] Pytte, E. Peierls instability in Heisenberg chains. *Physical Review B* 10, 4637 (1974).
- [17] Newman, M. E. J. & Barkema, G. T. Monte Carlo Methods in Statistical Physics (Oxford University Press, New York, 1999).
- [18] Lindemann, F. A. Ueber die berechnung molekularer eigenfrequenzen. *Phys. Z* 11, 609-612 (1910).
- [19] Balian, R. From microphysics to macrophysics: methods and applications of statistical physics, vol. 1 (Springer Science & Business Media, 2007).