

Estudio del comportamiento crítico del modelo Ashkin-Teller con un defecto en forma de línea

Gregorio Duchowney

Director: Aníbal Iucci

24 de marzo de 2013

Índice general

Índice general	I
1. Introducción	1
2. Aspectos teóricos del comportamiento crítico	3
2.1. Exponentes críticos y parámetros de orden	3
2.2. Teoría de escala	4
3. Conceptos relacionados a las simulaciones computacionales . .	6
3.1. El método Montecarlo	6
3.2. Efectos de tamaño finito	9
4. Modelo de Ashkin Teller.	10
4.1. Definición del modelo.	10
4.2. Resultados	14
Verificación del modelo AT	14
Sistema desacoplado ($K_4 = 0$)	14
Diagrama de fases	16
5. Modelo AT con un defecto en forma de línea.	22
5.1. Introducción de un defecto en el modelo AT.	22
5.2. Resultados	24
Modelo AT con defecto en forma de línea	24
Sistema desacoplado: $\epsilon = 0$	24
Acoplamiento positivo: $\epsilon > 0$	26
Acoplamiento negativo: $\epsilon < 0$	32
6. Conclusiones	34
Bibliografía	35

1. Introducción

Los modelos bidimensionales han tenido un importante papel en la mecánica estadística en relación al estudio de los fenómenos críticos y las transiciones de fase. Entre los más estudiados se encuentran los que representan varios tipos de átomos dispuestos en una red vinculados por algún tipo de interacción, por ejemplo el modelo de Ising, Eighth-Vertex (8V)[3], o Ashkin-Teller (AT)[1]. Este tipo de modelos ha sido objeto de diversos estudios durante las últimas décadas, algunos de ellos han sido resueltos exactamente a través de sofisticados métodos teóricos y estudiados mediante varios métodos numéricos, por lo que hay abundante información sobre su comportamiento. Sin embargo, la posibilidad de obtener y estudiar en un laboratorio materiales bidimensionales [11] ha despertado interés en el estudio de nuevos problemas y nuevos escenarios, entre ellos, la introducción de interfaces y defectos topológicos en los modelos mencionados [17, 10, 18] con el objetivo de describir tanto la presencia de impurezas en los materiales como las modificaciones realizadas a estos en diferentes procesos de fabricación. Estos avances han conducido al descubrimiento de importantes modificaciones en el comportamiento crítico de los sistemas.

El modelo de Ashkin Teller, resulta de particular interés debido a la riqueza de su comportamiento crítico y su generalidad, ya que puede relacionarse con varios modelos bidimensionales a través de transformaciones [buscar referencia mapping]. Puede ser considerado como dos sistemas de Ising[ref] bidimensionales acoplados por una interacción entre cuatro spines (2 de cada plano).

El comportamiento crítico del modelo de Ashkin-Teller en dos dimensiones con un defecto en forma de línea ha sido estudiado recientemente mediante diferentes métodos, Naón [16] ha introducido un defecto asimétrico, mediante la modificación de los acoplamientos en solo uno de los planos de spines, y estudiado el comportamiento de la función de correlación spin-spin mediante el método de integrales de camino en la descripción del modelo en términos de campos fermiónicos, Lajkó e Iglói [13] han utilizando el método numérico density matrix renormalization (DMRG) en la descripción del modelo en el límite Hamiltoniano, que conduce a una representación cuántica en una red de dimensión menor a la del modelo clásico. Ambos trabajos se refieren al estudio de la dependencia de los exponentes críticos del sistema con algunos parámetros del Hamiltoniano presentando discrepancias, en particular, en los resultados obtenidos para el exponente crítico de la magnetización del defecto. Mientras que Naón afirma que la interacción entre ambos subsistemas tipo Ising no afecta a los exponentes críticos, los resultados presentados por Lajkó e Iglói muestran una dependencia explícita del exponente crítico

1. INTRODUCCIÓN

de la magnetización sobre el defecto con el acoplamiento entre ambos modelos de Ising. Estas discrepancias son una fuerte motivación para estudiar el sistema con defectos utilizando un método diferente.

En este trabajo estudiaremos el modelo de Ashkin Teller utilizando el método de simulaciones computacionales Montecarlo (MC), ampliamente utilizado para el estudio de fenómenos críticos en sistemas bidimensionales, aplicado a la representación clásica del modelo utilizando dos sistemas bidimensionales de spines, con interacción a primeros vecinos (modelo de Ising) acoplados entre sí mediante una interacción de cuatro spines. Comprobaremos el comportamiento general de nuestros algoritmos determinando de manera cualitativa el diagrama de fases del modelo. Luego introduciremos un defecto asimétrico con forma de línea y estudiaremos el comportamiento crítico del sistema con AT con defecto, poniendo interés en particular en la determinación numérica de la dependencia del exponente crítico asociado a la magnetización local del defecto con las constantes de acoplamiento.

2. Aspectos teóricos del comportamiento crítico

En esta sección haremos un breve resumen de deficiones y resultados derivados de diferentes teorías utilizadas en el análisis del comportamiento crítico de sistemas termodinámicos.

2.1. Exponentes críticos y parámetros de orden

Los exponentes críticos describen el comportamiento de varias magnitudes termodinámicas medibles cerca del punto crítico, suponiendo que pueden descomponerse en una parte regular que mantiene un valor finito y una parte singular que puede ser divergente o tener derivadas divergentes.

Considerando el parámetro $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ que mide la desviación de la temperatura respecto al valor crítico T_c , se define el exponente crítico λ asociado a la función $F(t)$, que describe el comportamiento de alguna magnitud física de interés en términos de variables termodinámicas:

$$\lambda \equiv \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln F(t)}{\ln t}, \quad (2.1)$$

generalmente la relación entre $F(t)$ y λ se denota como $F(t) \sim t^\lambda$.

En el caso de un sistema magnético los exponentes críticos para la magnetización M , la susceptibilidad χ , la capacidad calorífica C , la longitud de correlación ξ y la función de correlación $G(r)$ están definidos como:

$$M \sim |t|^\beta \quad (2.2)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (2.3)$$

$$C \sim |t|^{-\alpha} \quad (2.4)$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (2.5)$$

$$G(r) \sim |t|^{-(d-2+\eta)} \quad (2.6)$$

Una transición de fase del tipo orden-desorden puede ser cuantitativamente caracterizada por alguna cantidad que toma un valor nulo en la fase desordenada y un valor diferente de cero en la fase ordenada. Dicha propiedad es llamada parámetro de orden y su definición en términos de magnitudes físicas depende del sistema bajo estudio. Por ejemplo en el caso de un sistema magnético, la magnetización espontánea (el promedio de los momentos

2. ASPECTOS TEÓRICOS DEL COMPORTAMIENTO CRÍTICO

magnéticos de los elementos que componen el sistema) es una medida del orden ferromagnético del sistema.

A continuación se definen algunos parámetros que serán de utilidad en la descripción del modelo que estudiaremos:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{L^2} \sum_{ij} \sigma_{ij} \quad (2.7)$$

$$\langle \sigma \rangle_{AF} = \frac{1}{L^2} \sum_{ij} (-1)^{(i+j)} \sigma_{ij} \quad (2.8)$$

$$(2.9)$$

El parámetro definido en la ec. (2.7) representa la magnetización media, medida del orden ferromagnético, de un sistema compuesto por spines σ , toma valores no nulos cuando más de la mitad de los spines se encuentran alineados; el definido por la ec. (2.8) es una medida del orden de tipo antiferromagnético y su valor indica la proporción de spines alineados de forma alternada. En general cuando alguno de estos parámetros es no nulo el sistema se encuentra en un estado ordenado.

2.2. Teoría de escala

Según la hipótesis de escala [9] la parte singular de la energía libre f de un sistema es una función homogénea generalizada de los parámetros que miden la desviación respecto al punto crítico (como t o el parámetro $h = \frac{H-H_c}{H_c}$ para el campo magnético, con H_c el valor crítico del campo magnético) que, ante un cambio de escala en las variables $r \rightarrow r/b$, transforma como:

$$f(t, h, \frac{1}{L}) = b^{-d} f(b^{1/\nu} t, b^{d-x} h, \frac{b}{L}) \quad (2.10)$$

A partir de este comportamiento y las relaciones entre las magnitudes termodinámicas y las derivadas de f pueden obtenerse relaciones entre los exponentes críticos definidos en las ecs. (2.2-2.6) haciendo uso de la arbitrariedad del parámetro b , así por ejemplo, la magnetización del sistema $M = -\partial f / \partial h$ transforma como:

$$M(t, h, \frac{1}{L}) = b^{-x} M(b^{1/\nu} t, b^{d-x} h, \frac{b}{L}) \quad (2.11)$$

2. ASPECTOS TEÓRICOS DEL COMPORTAMIENTO CRÍTICO

En el límite $L \rightarrow \infty$, para $h = 0$ y eligiendo $b = L$ se obtiene que:

$$M \sim L^{-x} \quad (2.12)$$

Si en cambio se elige $b = t^{-\nu}$ resulta:

$$\beta = x\nu \quad (2.13)$$

Utilizando estos mismos argumentos junto con las definiciones de $C = \partial^2 f / \partial t^2$ y $\chi = \partial^2 f / \partial h^2$ pueden obtenerse otras expresiones que relacionan los exponentes críticos:

$$d\nu = 2\beta + \gamma \quad (2.14)$$

$$2 - \eta = \frac{\gamma}{\nu} \quad (2.15)$$

$$\alpha = 2 - d\nu \quad (2.16)$$

Cuando el sistema se encuentra limitado espacialmente por una superficie o un defecto (bordes, esquinas, líneas, etc.) debe tenerse en cuenta una contribución local a la energía libre del sistema f_{def} cuya parte singular presenta el mismo comportamiento que el dado en la ec. 2.10 para f , en el caso de un defecto con dimensión $d - 1$:

$$f_{def}(t, h_{def}, \frac{1}{L}) = b^{-(d-1)} f_{def}(b^{1/\nu} t, b^{d-x} h_{def}, \frac{b}{L}) \quad (2.17)$$

donde h_{def} representa el campo magnético sobre la superficie o defecto. Repitiendo los argumentos utilizados anteriormente, las relaciones 2.12-2.13 se cumplen para los correspondientes exponentes de superficie (defecto):

$$M_{def} \sim L^{-x_{def}}, \beta_{def} = x_{def}\nu \quad (2.18)$$

La función de correlación para un par de spines se obtiene como la derivada funcional de la energía libre respecto del campo magnético $G(r, t) = \langle \sigma(0)\sigma(r) \rangle = \frac{\delta F}{\delta h(0)\delta h(r)}$ y por lo tanto su comportamiento ante una transformación de escala viene dado por:

$$G(r, t) = b^{-2x} G(\frac{b}{r}, b^{1/\nu} t) \quad (2.19)$$

3. CONCEPTOS RELACIONADOS A LAS SIMULACIONES COMPUTACIONALES

en las cercanías del punto crítico, $t \rightarrow 0$, y para una elección de $b = r$ las correlaciones decaen como una ley de potencias:

$$G(r, t = 0) = \frac{G_0}{r^{2x}} \quad (2.20)$$

En presencia de defectos, pueden analizarse las correlaciones entre spines pertenecientes al defecto, y las correlaciones entre estos y los que no pertenecen al defecto.

En el caso de un defecto en forma de línea las primeras son correlaciones a lo largo de la línea, longitudinales, y las últimas son perpendiculares al defecto. En ambos casos el exponente de la función de correlación está relacionado con el exponente crítico x_{def} de la magnetización del defecto definido en 2.18:

$$G_{\parallel}(r, t = 0) \sim r^{-2x_{def}}, \quad G_{\perp}(r, t = 0) \sim r^{-(x+x_{def})} \quad (2.21)$$

Estas expresiones nos permiten estudiar el comportamiento crítico de la función de correlación a partir de medidas realizadas para el exponente crítico x_{def} asociado a la magnetización del defecto.

3. Conceptos relacionados a las simulaciones computacionales

3.1. El método Montecarlo

Al considerar el cálculo de promedios térmicos en mecánica estadística se deben realizar integrales o sumas sobre una región del espacio de las fases. Suponiendo que se desea estudiar un sistema de N partículas a una temperatura T (se podrían especificar eventualmente presión y volumen), describiendo cada partícula i mediante un conjunto de variables $\{\alpha_i\}$ el conjunto $\{\{\alpha_1\}, \{\alpha_2\}, \dots, \{\alpha_N\}\}$ describe una configuración o punto \mathbf{x} en el espacio de las fases. Si el sistema está descrito por un Hamiltoniano $H_N(\mathbf{x})$, los valores medios de las funciones termodinámicas $B(\mathbf{x})$ vienen dados por:

$$\langle B(\mathbf{x}) \rangle = \frac{\int_{\Omega} d\mathbf{x} B(\mathbf{x}) e^{-\beta H_N(\mathbf{x})}}{\int_{\Omega} d\mathbf{x} e^{-\beta H_N(\mathbf{x})}} \quad (3.1)$$

3. CONCEPTOS RELACIONADOS A LAS SIMULACIONES COMPUTACIONALES

donde Ω es el volumen del espacio de las fases y $\beta = 1/kT$, con k la constante de Boltzmann. La resolución exacta de estas integrales es posible en algunos casos sencillos, como el del modelo de Ising bidimensional, pero en general su resolución exacta es imposible y deben utilizarse métodos aproximados o cálculos numéricos para obtenerlas.

El método MC permite obtener resultados numéricos discretizando el problema y, en lugar de sumar sobre todo el volumen del espacio de fases, se toma una cantidad finita y reducida (M) de puntos. El criterio más directo para determinar los puntos que formarán parte de la muestra es conocido como muestreo simple y consiste en elegir las configuraciones al azar, de una distribución de probabilidad homogénea; este método, sin embargo, no siempre es apropiado para evaluar integrales termodinámicas, ya que no tiene en cuenta las regiones del espacio de fases donde la contribución del integrando es mayor. Es conveniente entonces elegir las configuraciones x_i de la muestra estadística con una distribución de probabilidad no uniforme. Una elección simple y natural para esta distribución es $P_{eq}(x_i) = \frac{e^{-\beta H_N(\mathbf{x}_i)}}{\sum_{n=1}^M e^{-\beta H_N(\mathbf{x}_n)}}$, con lo cual (3.1) toma la forma del promedio aritmético entre los valores de la función B en los diferentes puntos de la muestra:

$$\langle B(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j=1}^M B(\mathbf{x}_j) P(x_j) \quad (3.2)$$

donde M es el número total de muestras.

El método, introducido por Metrópolis [15] consiste en elegir las M configuraciones como estados sucesivos pertenecientes a una cadena de Markov, donde cada estado x_{i+1} es construido a partir de un estado previo x_i mediante una probabilidad de transición $W(x_i \rightarrow x_{i+1})$ convenientemente elegida para que en el límite $M \rightarrow \infty$ la distribución de probabilidad tienda a la de equilibrio P_{eq} . Una condición suficiente para esto último es que se satisfaga el principio de balance detallado:

$$P_{eq}(x_i)W(x_i \rightarrow x_{i'}) = P_{eq}(x_{i'})W(x_{i'} \rightarrow x_i) \quad (3.3)$$

que implica que el cociente entre las probabilidad de una transición estados $(x_i \rightarrow x_{i'})$ y la transición inversa $(x_{i'} \rightarrow x_i)$ depende solo de la diferencia en la energía del sistema entre los dos estados $H(x_{i'}) - H(x_i)$,

3. CONCEPTOS RELACIONADOS A LAS SIMULACIONES COMPUTACIONALES

$$\frac{W(x_i \rightarrow x_{i'})}{W(x_{i'} \rightarrow x_i)} = \exp(-\beta \Delta H_N) \quad (3.4)$$

Una elección para W que satisface las ecs. 3.3 y 3.4 utilizada frecuentemente es la definida en la siguiente ecuación:

$$W_{x_i \rightarrow x_{i'}} = \begin{cases} e^{-\beta \Delta H_N(\mathbf{x})} & \text{si } \Delta H_N \geq 0 \\ 1 & \text{si } \Delta H_N < 0 \end{cases} \quad (3.5)$$

puede demostrarse [5] además que la distribución de probabilidad P_{x_i} de una secuencia de estados $x_i \rightarrow x_{i'} \rightarrow x_{i''} \dots$ generada por esta probabilidad de transición converge a la distribución de probabilidad de equilibrio $P_{eq}(x)$. En una simulación Monte Carlo (MC) se estudia numéricamente la evolución temporal de un modelo cuyos cambios no se producen de una forma determinista, sino estocástica, es decir que dependen de una secuencia de números aleatorios generados durante la simulación. Así al utilizar una secuencia diferente de números aleatorios el resultado de la simulación no es idéntico, pero está de acuerdo con los resultados anteriores dentro de algún error estadístico. En este trabajo llamaremos muestras independientes a los resultados obtenidos a partir de secuencias de números aleatorios diferentes. La implementación del algoritmo de Metrópolis que hemos utilizado puede resumirse en los siguientes pasos:

1. Elegir una configuración inicial para el sistema, \mathbf{x}_0 .
2. Elegir un sitio i al azar
3. Calcular el cambio de energía ΔE involucrado en una transición de estado del spin en el sitio i .
4. Generar un número aleatorio $0 < r < 1$
5. Si $r < e^{-\beta \Delta E}$, realizar la transición. Caso contrario, rechazarla.
6. Volver al paso 2

Estos pasos representan la evolución temporal del sistema utilizando la probabilidad de transición entre estados dada por la ec. 3.5. Diremos que ha transcurrido una unidad de tiempo, a la que usualmente se llama 1 tiempo montecarlo (TMC), luego de haber intentado un número de transiciones igual

al número de spines que conforman el sistema. Así en una red cuadrada de lado L , un TMC equivale a repetir los pasos 1 a 6 un número de veces igual a L^2 .

Al estudiar fenómenos en equilibrio termodinámico es necesario, antes de realizar medidas, hacer evolucionar al sistema desde el estado inicial a uno que esté en equilibrio.

3.2. Efectos de tamaño finito

Dado que las simulaciones son llevadas a cabo sobre una red de tamaño finito, deben tenerse en cuenta los efectos que esto tiene sobre los datos obtenidos mediante la simulación. Sin embargo, el tamaño finito también constituye una herramienta, es una variable más para controlar en el sistema y estudiar como las cantidades termodinámicas dependen de ella. Los efectos de borde pueden reducirse mediante la imposición de condiciones de contorno periódicas. Por ejemplo el comportamiento de las magnitudes termodinámicas al atravesar una transición de fase es diferente al de las de un sistema infinito. La magnetización, por ejemplo, en lugar de sufrir un quiebre abrupto en el punto crítico presenta un comportamiento suave y la susceptibilidad no diverge, sino que tiene un pico en el valor crítico de la constante de acoplamiento. De la misma forma, el comportamiento de estas magnitudes como leyes de potencia en las cercanías del punto crítico predicho por la teoría de escala se ve modificado y los exponentes críticos pueden presentar una dependencia con el tamaño del sistema.

Según la teoría de escala de tamaño finito [14], y como hemos visto en la sec. 2, puede caracterizarse la transición a partir de magnitudes que dependen de los momentos de la distribución de probabilidad de los parámetros de orden y la energía. Entre ellas se encuentran la susceptibilidad magnética χ y el cumulante de cuarto orden U_4 , que permiten estimar la ubicación del punto crítico del sistema infinito a partir de medidas para sistemas de tamaño finito y pueden obtenerse a partir de los primeros momentos de la magnetización $\langle m_\alpha \rangle$ y $\langle m_\alpha^2 \rangle$:

$$kT\chi_\alpha = L^d(\langle m_\alpha^2 \rangle - \langle m_\alpha \rangle^2) \quad (3.6)$$

$$U_4^\alpha = 1 - \frac{\langle m_\alpha^4 \rangle}{3\langle m_\alpha^2 \rangle}, \quad (3.7)$$

donde el subíndice α indica el spin, m_α es la magnetización, L es el tamaño

del sistema y d su dimensión.

A medida que el tamaño del sistema aumenta ($L \rightarrow \infty$) U_4 tiende a 0 para $T \rightarrow 0$ y a $2/3$ para $T \rightarrow \infty$. Las gráficas del cumulante para diferentes tamaños del sistema, se intersectan en el valor crítico de la temperatura T_c , por lo tanto este puede determinarse aproximadamente graficando U_4 para diferentes valores de L .

4. Modelo de Ashkin Teller.

En esta sección presentaremos la definición teórica del modelo de Ashkin Teller junto con algunos de los resultados conocidos para el mismo. Luego presentaremos los resultados numéricos obtenidos mediante simulaciones MC.

4.1. Definición del modelo.

El modelo de Ashkin-Teller fué introducido en el año 1943 [1] como una generalización del modelo de Ising. Consiste en una red cuadrada bidimensional donde 4 tipos de átomos (A , B , C y D) interactúan a primeros vecinos, la energía de interacción depende de los átomos involucrados: ϵ_0 para AA , BB , CC , DD ; ϵ_1 para AB , CD ; ϵ_2 para AC , BD ; y ϵ_3 para AD , BC .

Este modelo no ha sido resuelto analíticamente, sin embargo algunas de sus propiedades críticas son conocidas exactamente por medio de relaciones con otros modelos, principalmente el mapeo al modelo de Gas de Coulomb [6].

Fan [7] ha demostrado que asociando dos spines σ_{ij} , τ_{ij} a cada sitio ij en la red y asignando un estado de este par de spines a cada tipo de átomo ($A \rightarrow (+, +)$, $B \rightarrow (+, -)$, $C \rightarrow (-, +)$, y $D \rightarrow (-, -)$), el modelo puede representarse como dos modelos de Ising (σ y τ) acoplados con una interacción entre cuatro spines ($\sigma_{ij}\sigma_{km}\tau_{ij}\tau_{km}$):

$$H_{AT} = - \sum_{\langle ij, km \rangle} (J\sigma_{ij}\sigma_{km} + J'\tau_{ij}\tau_{km}) - J_4 \sum_{\langle ij, km \rangle} \sigma_{ij}\sigma_{km}\tau_{ij}\tau_{km} \quad (4.1)$$

donde los pares de índices i, j y k, m numeran los sitios en una red bidimensional y el símbolo $\langle ij, km \rangle$ indica que las sumatorias son a primeros vecinos en la red. J y J' son las intensidades de las interacciones entre spines del mismo tipo, σ - σ y τ - τ , respectivamente y J_4 es la intensidad de la interacción de cuatro spines. Estas constantes de acoplamiento resultan

combinaciones lineales sencillas de las originales ($\epsilon_0, \epsilon_1, \epsilon_2$ y ϵ_3).

Considerando el caso $J_4 = 0$ puede verse que el sistema se separa en dos modelos de Ising con constantes de acoplamiento diferentes, y por lo tanto con dos temperaturas críticas. Esto condujo a Wegner [20] a relacionar el modelo AT con el modelo 8V a través de una transformación de dualidad realizada solo sobre los spines σ , dando los primeros indicios sobre la riqueza de su comportamiento crítico.

Se ha determinado que para $J \neq J'$ el modelo AT pertenece a la clase de universalidad del modelo de Ising bidimensional, sin embargo en el caso isotrópico, es decir cuando $J = J'$, exhibe una dependencia de los exponentes críticos con el acoplamiento J_4 , lo cual significa que presenta características no universales. Esta situación fue estudiada fuertemente por Kadanoff [12] (utilizando álgebra de operadores) y Brown (mediante la teoría de escala y el grupo de renormalización). Las siguientes expresiones fueron halladas para los exponentes críticos:

$$\alpha = \frac{(2-2y)}{(3-2y)}, \beta_m = \frac{(2-y)}{(24-16y)}, \beta_e = \frac{1}{(12-8y)} \quad (4.2)$$

donde α es el exponente del calor específico, β_m de la magnetización $\langle \sigma \rangle$ y β_e de la magnetización asociada al producto de los spines σ y τ , $\langle \sigma \tau \rangle$. La dependencia de los exponentes críticos con el acoplamiento J_4 está contenida, en estas ecuaciones, en el parámetro $y = 2\mu/\pi$, con $\cos(\mu) = \frac{1}{2}(e^{4K_4} - 1)$ y $K_4 = J_4/kT$.

El diagrama de fases del modelo AT representado en la figura 1 en términos de $K = J/kT$ y $K_4 = J_4/kT$, fue obtenido, utilizando resultados que surgieron de varios métodos (simulaciones MC, teoría de campo medio y grupo de renormalización), en 1980 por Ditzian et. al. [19]. En él se evidencian cinco regiones caracterizadas por diferentes estados de orden.

Además de los parámetros de orden usuales para un sistema magnético dados en la sección 2, es útil definir unos que midan el grado de orden entre ambos tipos de spines, gobernado por el acoplamiento K_4 , para ello consideraremos el momento magnético dado por el producto $\sigma\tau$:

$$\langle \sigma \tau \rangle = \frac{1}{L^2} \sum_{ij} \sigma_{ij} \tau_{ij} \quad (4.3)$$

$$\langle \sigma \tau \rangle_{AF} = \frac{1}{L^2} \sum_{ij} (-1)^{(i+j)} \sigma_{ij} \tau_{ij} \quad (4.4)$$

4. MODELO DE ASHKIN TELLER.

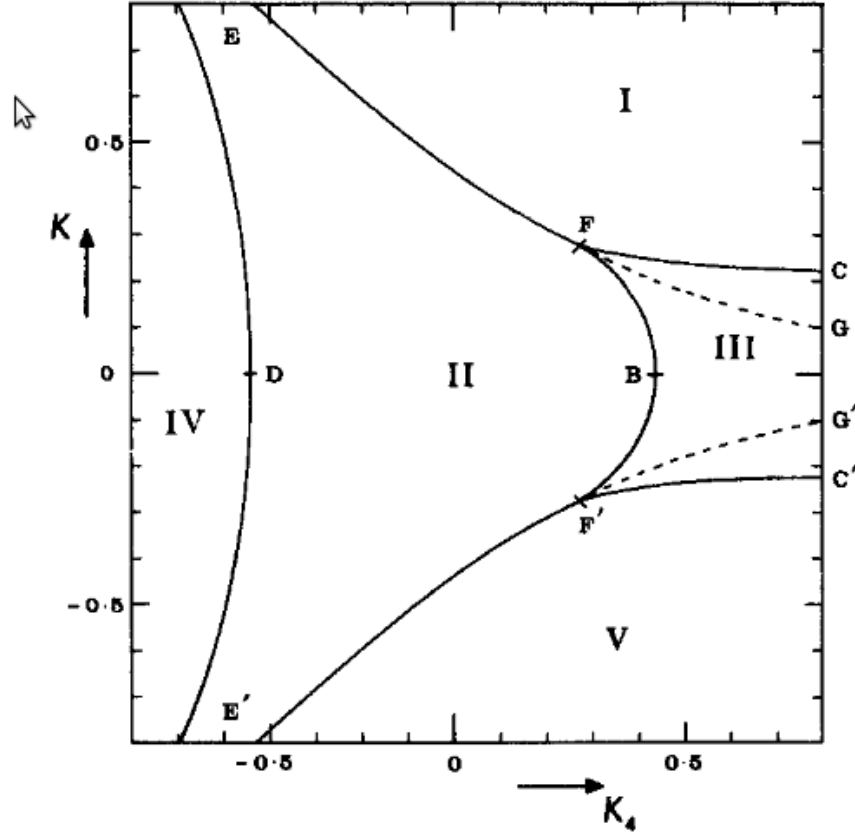


Figura 1: Diagrama de fases del modelo Ashkin-Teller. El sistema se encuentra en diferentes estados de orden en cada una de las regiones I, II, III, IV y V. Se indican con letras (B, C, C', D, E, E', F, F', G, G') algunos puntos en los que K_4 y K son conocidos exactamente.

donde ij representa los índices de un sitio en la red bidimensional y las sumatorias se extienden sobre toda la red.

El parámetro de orden $\langle \sigma \tau \rangle$ es una medida de la proporción de pares de spines $\sigma - \tau$ en los que σ y τ se encuentran alineados en el mismo sitio de red, toma su valor máximo solo cuando los spines en ambos planos se encuentran en el mismo estado de orden; $\langle \sigma \tau \rangle_{AF}$ mide el orden alternado de los pares $\sigma - \tau$, este parámetro puede ser no nulo incluso cuando $\langle \sigma \rangle$ y $\langle \tau \rangle$ son ambos nulos.

En la región I del diagrama de fases de la fig. 1 ambos acoplamientos

son suficientemente fuertes, $\langle\sigma\rangle$ y $\langle\tau\rangle$ están ordenandos de forma independiente ($\langle\sigma\rangle = \pm\langle\tau\rangle$) y $\langle\sigma\tau\rangle$ es no nulo, el sistema presenta orden ferromagnético total. En la región II, los acoplamientos son muy débiles y el sistema está completamente desordenado ($\langle\sigma\rangle$, $\langle\tau\rangle$ y $\langle\sigma\tau\rangle$ son nulos). La región III presenta orden parcial, K_4 supera a K en toda la región, permitiendo que $\sigma\tau$ presente orden ferromagnético mientras que τ y σ están independientemente desordenados. La región IV se da para valores grandes y negativos de K_4 los spines σ y τ se encuentran desordenados, mientras que $\sigma\tau$ presenta orden de tipo anti-ferromagnético. La región V es similar a la I, pero σ y τ están ordenados de manera anti-ferromagnética.

La curva E-F que delimita las regiones I y II en el diagrama de fases de la figura 1 resulta de particular interés, ya que sobre ella los exponentes críticos del modelo varían continuamente con el acoplamiento K_4 . La expresión analítica que define dicha curva en términos de las constantes de acoplamiento del modelo AT [8, 4] puede obtenerse a partir de un análisis de simetrías sobre el modelo 8V y está dada por:

$$e^{(-2K_4)} = \sinh(2K), \quad K_4 < K, \quad (4.5)$$

el punto E corresponde a $K_4/K = -1$, $K \rightarrow \infty$, donde $\mu = 2\pi/3$, y el punto F a $K_4 = K$, con $\mu = 0$.

Si se analiza el caso $K_4 = 0$, se obtiene el punto crítico K_c^{Ising} para el modelo de Ising, dado por:

$$\sinh(2K_c^{Ising}) = 1, \quad (4.6)$$

Respecto a las curvas que separan el resto de las fases en el diagrama de la fig. 1, sólo la curva E'-F', que se obtiene a partir de la línea E-F negando K , es conocida analíticamente, y sobre ella los exponentes críticos varían continuamente. Las prolongaciones F-G y F'-G' (en líneas punteadas en la fig. 1) no representan curvas críticas. Si bien las curvas F-B y F-C no son conocidas analíticamente, el punto B ha sido estimado como $K = 0$, $K_4 = K_c^{Ising}$ y el punto C es $K_4 = \infty$, $K = \frac{1}{2}K_c^{Ising}$. De la misma forma, la curva E-D-E' no es conocida analíticamente, pero el punto D corresponde a $K = 0$, $K_4 = -K_c^{Ising}$. Los exponentes críticos sobre estas tres últimas curvas tienen valores fijos, y se espera que estos sean los del modelo de Ising bidimensional.

4.2. Resultados

Verificación del modelo AT

Nuestro objetivo en esta sección es comprobar la fidelidad del algoritmo utilizado en las simulaciones con el modelo AT. Para ello estudiamos el comportamiento del sistema en diferentes situaciones en las que los resultados son conocidos, ya sea analíticamente o a partir de otros estudios numéricos. Hemos tenido en cuenta primero la situación más sencilla, en la que el acoplamiento entre spines σ y τ , K_4 , es nulo y el sistema puede separarse en dos modelos de Ising bidimensionales independientes. Luego abordamos el estudio del comportamiento del sistema en las diferentes fases descritas en la sección 4.1 y la determinación de las líneas críticas que se observan en el diagrama de la fig. 1. Por último antes de considerar el sistema con defectos, estudiamos el comportamiento no universal del exponente crítico de la magnetización en el modelo AT sobre la línea E-F del diagrama de fases.

Los datos analizados en esta sección surgen de medidas realizadas para los parámetros de orden $\langle\alpha\rangle$, $\langle\alpha\rangle_{AF}$, $\langle\sigma\tau\rangle$ y $\langle\sigma\tau\rangle_{AF}$ ($\alpha = \sigma, \tau$), definidos en las ecuaciones 2.7, 2.8, 4.3 y 4.4, y sus momentos de orden 2 y 4, a partir de los que se pueden obtener el cumulante de cuarto orden y la susceptibilidad (ecs. 3.7 y 3.6) que permiten caracterizar la transición de fase y determinar el punto crítico mediante métodos gráficos.

Dado que nuestro objetivo en esta sección es reproducir las propiedades del modelo AT sin defectos, hemos optado por considerar sistemas de tamaños relativamente pequeños, $L = 16, 24, 32$, a fines de reducir el tiempo de procesamiento en cada caso. Para estos tamaños se realizaron corridas de hasta 3×10^5 TMC, luego de un período de equilibrio de 3×10^5 TMC, para los tamaños más grandes, y realizando promedios sobre 50 muestras independientes.

Sistema desacoplado ($K_4 = 0$)

Consideremos en primer lugar el caso en el cual $K_4 = 0$ que corresponde a dos modelos de Ising desacoplados, para los cuales se espera obtener una transición de fase de segundo orden para el valor $K = K_c^{Ising}$ determinado por la ec. (4.6). Para analizar esta transición hemos calculado la magnetización, la susceptibilidad magnética y el cumulante de cuarto orden como funciones de K y para diferentes valores de L .

En la fig. 2 puede observarse el comportamiento de (a) los parámetros de orden $|M_{\sigma,\tau}|$, (b) el cumulante de cuarto orden U_4 y (c) la susceptibilidad

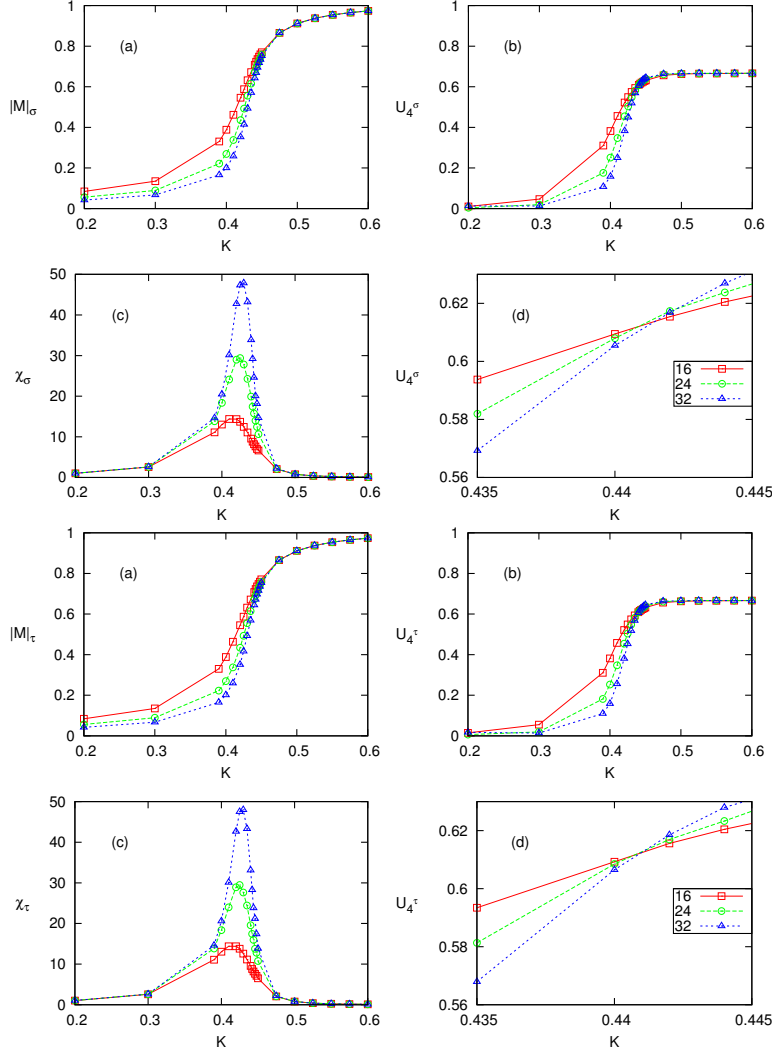


Figura 2: En el caso $K_4 = 0$ el comportamiento de los spines σ y los τ es el del modelo de Ising en una red cuadrada. (a): en las medidas de la magnetización del sistema ($|M_\sigma| = \langle \sigma \rangle$, $|M_\tau| = \langle \tau \rangle$) puede observarse la transición de fase de segundo orden en K_c^{Ising} , (b): la susceptibilidad magnética presenta un pico abrupto en K_c^{Ising} que se vuelve más pronunciado a medida que aumenta el tamaño del sistema, debería transformarse en una divergencia para $L \rightarrow \infty$. (c): A partir del cumulante de cuarto orden es posible determinar el punto crítico para un sistema finito, (d): La ubicación del punto crítico se obtiene de la intersección entre los cumulantes para diferentes valores de L .

4. MODELO DE ASHKIN TELLER.

magnética asociada, característicos de una transición de fase de este tipo. A medida que aumenta el tamaño del sistema la transición en (a) se vuelve mas abrupta y el pico de la susceptibilidad en (c) tiende a una divergencia. Se observa además que el comportamiento es similar para los spines σ y los τ , ya que se trata, en este caso, de dos modelos de Ising independientes.

Hemos determinado el valor crítico de la constante de acoplamiento K_c^{Ising} localizando las intersecciones de las gráficas de U_4 para los spines σ y τ para diferentes tamaños del sistema, $L = 16, 24, 32$, pueden observarse en los gráficos (d) en la figura 2. Los resultados obtenidos para los spines σ y los τ están en buen acuerdo con el valor teórico de K_c^{Ising} : $K_c^\sigma = K_c^\tau = 0.441(1)$.

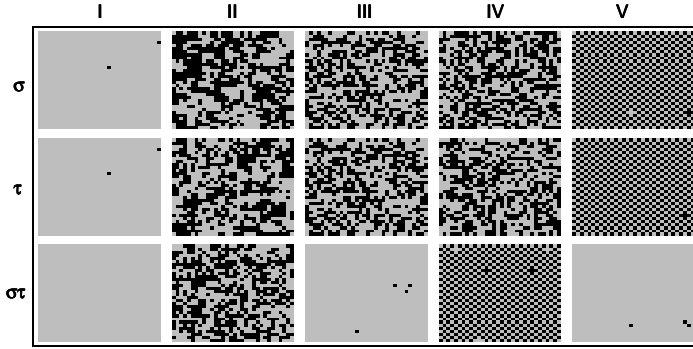


Figura 3: Snapshots del sistema en las diferentes fases. Cada columna corresponde a una región diferente del diagrama de fases. En la fila superior se representan los spines σ , en la central los τ y en la inferior el producto $\sigma\tau$. Estos gráficos se han realizado para un sistema de tamaño 32×32 . Para la primera columna se ha tomado $K = 0.5$ y $K_4 = 0.5$, es decir un estado del sistema correspondiente a la región I del diagrama de fases. La segunda columna corresponde a la región II y se obtuvo con $K = 0.2$ y $K_4 = 0$. La tercera columna se obtiene para $K = 0.1$ y $K_4 = 0.75$ y pertenece la fase III. La cuarta columna

Diagrama de fases

Una vez analizado el caso desacoplado, pasamos a considerar un valor de K_4 no nulo, verificando las diferentes fases que presenta el modelo AT.

La figura 3 muestra instantáneas del sistema, imágenes que representan la red bidimensional en las que se utilizan diferentes tonalidades para indicar el estado de spin en que se encuentra cada sitio. Considerando solo dos tonalidades (claro y oscuro) el estado del modelo AT en un instante particular puede representarse por dos redes (spines σ y τ). En esta representación gráfica se hacen claras las diferentes fases asociadas a los valores de K y K_4 que se muestran en la fig. 1.

Cada columna corresponde a una de las regiones en el diagrama de fases, mientras que las filas, de arriba hacia abajo, corresponden a los estados de los spines σ , τ y del producto $\sigma\tau$. Estas medidas fueron realizadas para una red cuadrada de 32×32 .

En la primer columna se muestra la configuración para $K = 0.5$ y $K_4 = 0.5$, que corresponde a la región I del diagrama de fases de la fig. 1, el sistema se encuentra completamente ordenado, todos los spines, tanto σ como τ , están en el mismo estado y por lo tanto también su producto. En la columna 2 se presenta el caso $K = 0.2$, $K_4 = 0$, en el que los spines σ y los τ se encuentran desordenados de manera independiente, y por ello $\sigma\tau$ presenta también un estado sin orden alguno. Esto corresponde a la región II en la fig. 1. En la columna 3 se observa como los spines σ y τ pueden estar desordenados, mientras que su producto presenta un estado ordenado. Esta situación, correspondiente a la región III del diagrama de fases (fig. 1), es observada para un valor pequeño de las interacciones $\sigma - \sigma$ y $\tau - \tau$, $K = 0.1$, y un acoplamiento relativamente fuerte para la interacción $\sigma - \tau$, $K_4 = 0.75$. En cambio si el valor de K_4 es negativo, los spines σ se acoplan a los τ de manera anti-ferromagnética, lo que puede verse en la columna 4 de la figura 3 donde se ha elegido $K_4 = -0.75$, en correspondencia con la región IV de la figura 1. Por último, en la columna 5, se ha considerado el caso en que K es negativo, $K = -0.75$ y $K_4 = 0.1$, produciéndose un orden alternado para los σ y los τ , mientras que el producto $\sigma\tau$ permanece en un estado de orden ferromagnético. Este caso es representativo de la región V del diagrama de fases (fig. 1).

Mediante el mismo procedimiento que el utilizado en la transición de fase para $K_4 = 0$ hemos determinado varios puntos (K, K_4) correspondientes a las curvas críticas del diagrama de la fig. 1. En la fig. 7 se muestran dichos resultados numéricos en superposición al diagrama de fases. Las figuras 4 y 5 muestran el comportamiento de las magnitudes $|M|$, χ y U_4 en las cercanías de los puntos críticos. La figura 4 corresponde al caso de la transición entre las fases I y II para un valor de K_4 diferente de 0 donde se utilizó $M_\sigma = \langle \sigma \rangle$ como parámetro de orden. Las curvas muestran el mismo comportamiento

4. MODELO DE ASHKIN TELLER.

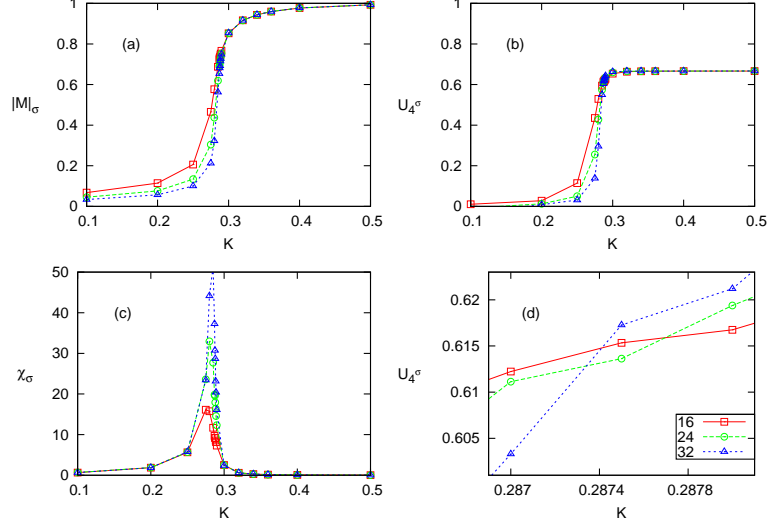


Figura 4: En el caso $K_4 = 0.25$ la transición entre las fases I y II, localizada sobre la curva E-F, es similar a la que ocurre en el modelo de Ising. El valor crítico de K es menor a K_c^{Ising} . (a): magnetización ($|M| = \langle \sigma \rangle$), puede observarse la transición de fase de segundo orden en $K \simeq 0.287(1)$, (b): la susceptibilidad magnética presenta un pico abrupto en K_c^{Ising} que se vuelve más pronunciado a medida que aumenta el tamaño del sistema, debería transformarse en una divergencia para $L \rightarrow \infty$. (c): A partir del cumulante de cuarto orden es posible determinar el punto crítico para un sistema finito, (d): La ubicación del punto crítico se obtiene de la intersección entre los cumulantes para diferentes valores de L .

que en el caso $K_4 = 0$, pero puede verse que el valor crítico obtenido para K es diferente. La figura 5 corresponde a la transición entre las fases II y IV, caracterizada por el parámetro de orden $|M_{\sigma\tau}^{AF}| = \langle \sigma\tau \rangle_{AF}$, en los gráficos (a-d) puede verse que el comportamiento del parámetro de orden $\langle \sigma\tau \rangle_{AF}$, la susceptibilidad $\chi_{\sigma\tau}^{AF}$ y el cumulante de cuarto orden es el correspondiente a una transición de fase de segundo orden.

La forma de la curva que separa las fases I y II, incluyendo el caso $K_4 = 0$, (línea crítica E-F de la fig. 1) es conocida con exactitud y está definida por la ec. 4.5. A fines de reproducir este resultado teórico utilizando nuestra implementación del modelo AT hemos determinado el valor crítico de K para diferentes valores de K_4 a partir de medidas de los parámetros de orden $\langle \sigma \rangle$ y $\langle \tau \rangle$ y sus momentos. En la figura 6 puede observarse el acuerdo entre los

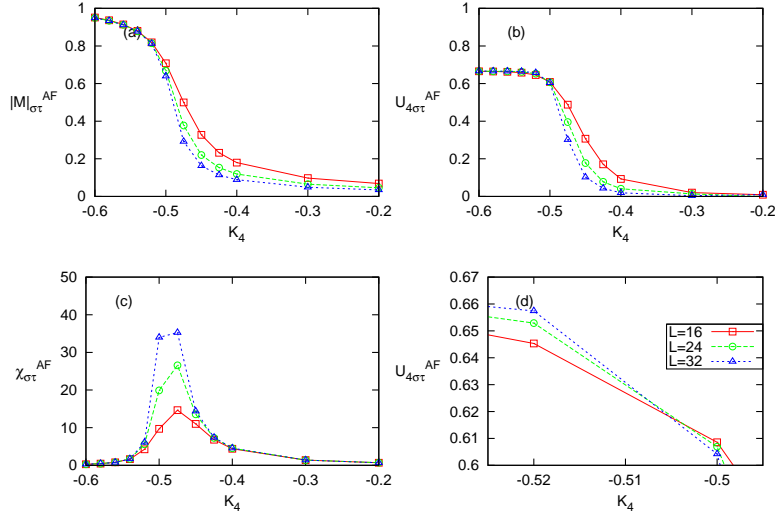


Figura 5: La transición entre las fases II y IV, localizada sobre la línea E-E' puede estudiarse mediante el parámetro de orden $\langle\sigma\tau\rangle_{AF}$, utilizando un valor fijo de $K = 0.377$. El comportamiento de las magnitudes $|M|_{\sigma\tau}^{AF}$, $\chi_{\sigma\tau}^{AF}$ y $U_{4\sigma\tau}^{AF}$ corresponde al de una transición de fase de segundo orden.

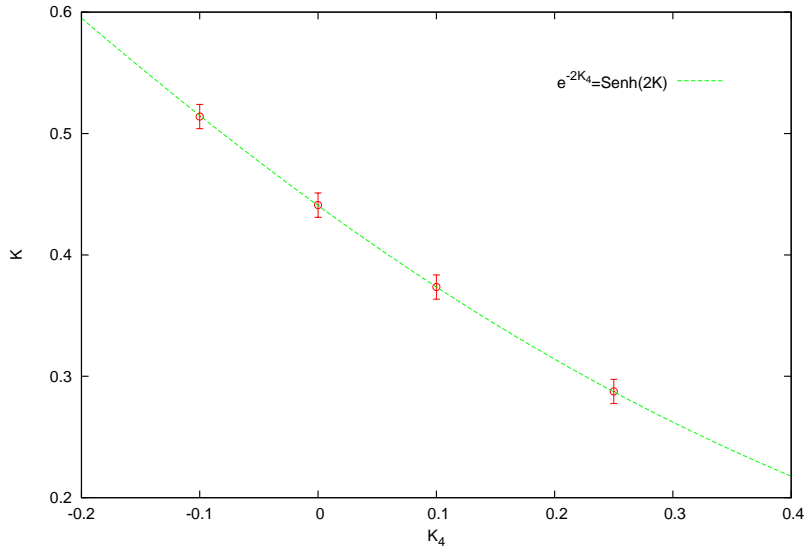


Figura 6: Transiciones de fase sobre la línea E-F, definida por (4.5), para diferentes valores de $K_4 = -0.1, 0, 0.1, 0.25$.

4. MODELO DE ASHKIN TELLER.

resultados obtenidos para K utilizando diferentes valores de K_4 y la representación gráfica de la ec. 4.5 en el plano $K - K_4$.

En la transición entre las fases II y III el sistema pasa de una fase completamente desordenada a otra que exhibe orden parcial, los spines σ y los τ se encuentran también desordenados, pero de forma tal que su producto presenta orden ferromagnético. Este orden puede detectarse a través del parámetro de orden $\langle\sigma\tau\rangle$, que describe una transición de segundo orden y presenta un comportamiento similar al de $\langle\sigma\rangle$ en los casos anteriores. Aunque la forma exacta de línea crica F-F' que separa las fases II y III no se conoce analíticamente, se sabe que el punto identificado con la letra B corresponde a $K = 0$, $K_4 = K_c^{Ising}$. Nuestros resultados numéricos están en completo acuerdo con esto.

La fase IV está también parcialmente ordenada y se caracteriza por el orden alternado del producto $\sigma\tau$, por lo tanto midiendo el parámetro de orden $\langle\sigma\tau\rangle_{AF}$ (dado en (4.4)) en función de K_4 y para diferentes valores de K pueden determinarse algunos puntos correspondientes a la línea de la transición II→IV. En la figura 1 la línea que separa las fases II y IV es sólo representativa, ya que el único punto que es conocido exactamente sobre esta línea es el punto D, que corresponde a $K = 0$, $K_4 = -K_c^{Ising}$. Hemos realizado medidas para determinar esta curva, tomando diferentes valores de K , obteniendo los puntos ($K = -0.5$, $K_4 = -0.66..$), ($K = -0.25$, $K_4 = -0.51..$), ($K = 0.5$, $K_4 = -0.665(5)$) y ($K = 0.25$, $K_4 = -0.51(5)$) que pueden observarse en la figura 7.

En el caso de la transición entre las fases II y IV, si bien el comportamiento de la línea E-E' coincide con el correspondiente al diagrama de referencia, nuestros resultados sugieren que los valores de K_4 necesarios para que el sistema presente el orden de la fase IV deben ser mayores en magnitud.

Para valores negativos de K , los spines σ tienden a alinearse antiferromagnéticamente entre sí, y si K_4 es suficientemente grande, se produce además un alineamiento ferromagnético para el producto $\sigma\tau$. Esto ocurre al atravesar la curva E'-F', que separa las regiones II y V en el diagrama de fases. Midiendo los parámetros de orden $\langle\sigma\rangle_{AF}$, $\langle\tau\rangle_{AF}$ y $\langle\sigma\tau\rangle$, obtuvimos algunos puntos sobre esta curva (fig. 7).

Los resultados hallados para todas las transiciones de fase estudiadas concuerdan con el diagrama de fases de la fig. 1, y pueden verse superpuestos a este en la fig. 7, los círculos rojos corresponden a los resultados numéricos

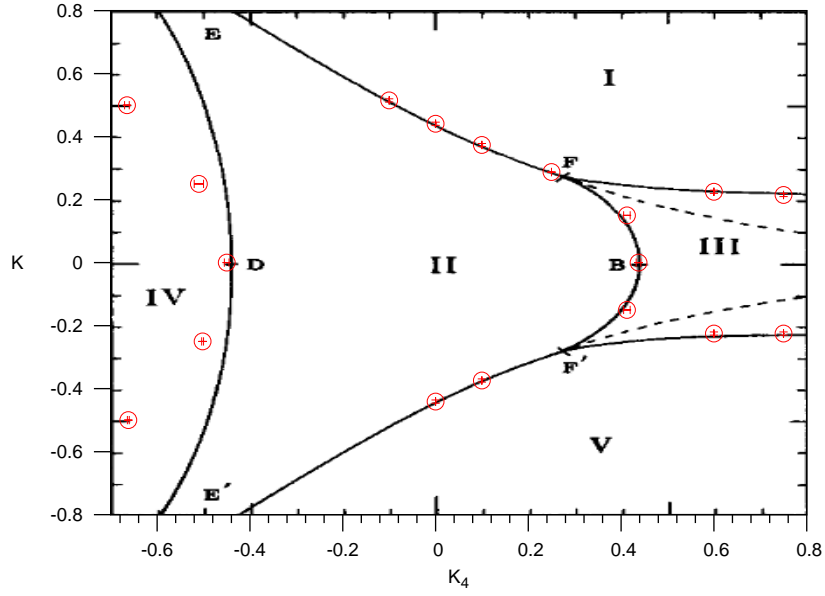


Figura 7: Se presentan los puntos obtenidos en este trabajo para las transiciones de fase del modelo AT sobre el diagrama de fases publicado por Baxter[4]. En el caso de la transición $II \rightarrow IV$, la curva es solo representativa, no se ha determinado su expresión analítica.

obtenidos en este trabajo.

5. Modelo AT con un defecto en forma de línea.

En esta sección definiremos el defecto introducido al modelo AT y presentaremos los resultados que hemos obtenido sobre el mismo.

5.1. Introducción de un defecto en el modelo AT.

Un defecto en un sistema magnético puede ser representado mediante la modificación de las constantes de acoplamiento en una determinada región espacial del sistema. Por ejemplo un borde, o una superficie libre, en un sistema bidimensional corresponde a modificar un número infinito de enlaces, este caso ha sido ampliamente estudiado para el modelo de Ising revelando que las propiedades críticas del sistema se ven modificadas en una región cercana la superficie, cuyo tamaño es del orden de la longitud de correlación, y por lo tanto son descritas por un conjunto de exponentes críticos diferentes a los del sistema homogéneo.

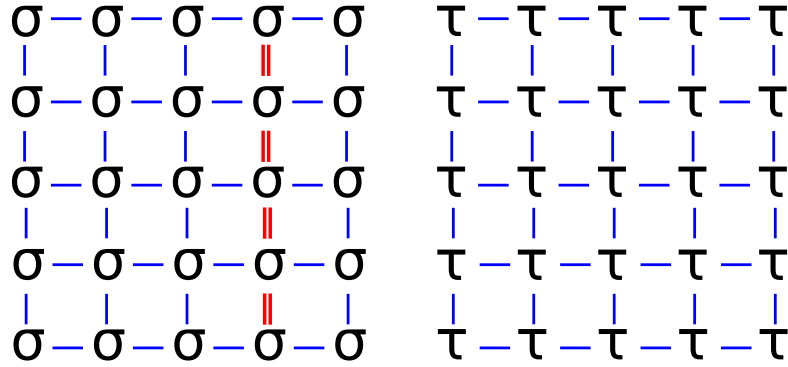


Figura 8: Defecto asimétrico en forma de línea. Los símbolos σ y τ representan los diferentes tipos de spines y los segmentos que los unen las constantes de acoplamiento entre ellos. La constante de acoplamiento entre los spines σ se modifica sobre una línea, indicada en color y con segmentos dobles, mientras que la constante de acoplamiento entre los spines τ conserva su valor en toda la red.

En este trabajo estudiaremos el comportamiento crítico local sobre un defecto con forma de línea en el modelo AT. Introducimos un defecto asimétrico [16] en el sistema modificando solo la interacción entre los spines de tipo σ

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA.

sobre una línea del plano que los contiene (fig. 8), el acoplamiento entre los spines que yacen sobre el defecto y sus vecinos en la dirección perpendicular a la línea no se modifica, y dado que se trata del modelo AT isotrópico, su valor J es el mismo que para la interacción entre los spines τ . Llamando J_l a la intensidad del defecto y considerando su contribución al Hamiltoniano del modelo AT (ec. 4.1) en el caso isotrópico se obtiene:

$$H_{AT} = -J \sum_{\langle ij, km \rangle} (\sigma_{ij} \sigma_{km} + \tau_{ij} \tau_{km}) - J_4 \sum_{\langle ij, km \rangle} \sigma_{ij} \sigma_{km} \tau_{ij} \tau_{km} - J_l \sum_{\langle ij, km \rangle} \delta_{il} \sigma_{ij} \delta_{kl} \sigma_{km} \quad (5.1)$$

donde las deltas en el último término hacen que la suma sea solo sobre los spines que se encuentran sobre la línea de defectos (sitios de la red con el primer índice igual a l). De esta forma para $J_l = 0$ se recupera el modelo AT sin defectos. La interacción entre los spines σ que yacen sobre el defecto está dada por los términos primero y cuarto de este Hamiltoniano y por lo tanto el acoplamiento efectivo entre estos resulta $J + J_l$. Si bien el acoplamiento entre los spines τ no se modifica, el defecto tendrá influencia sobre su comportamiento debido a la conexión entre los spines σ y los τ gobernada por la constante J_4 .

Si se considera $K_4 = 0$ se obtienen dos modelos de Ising sin acoplamiento entre sí, uno con un defecto en forma de línea y otro sin defectos. El comportamiento del exponente crítico de la magnetización sobre la línea de defectos es diferente en cada uno de ellos. En el modelo con spines τ conserva su valor $\beta = \frac{1}{8}$ (el correspondiente al modelo de Ising), mientras que para los σ se espera una dependencia del exponente con la intensidad del defecto $K_l = J_l/kT$:

$$x_m^\sigma = \frac{2}{\pi^2} \arctan^2(e^{-2K_l}), \quad x_m^\tau = 1/8, \quad K_4 = 0. \quad (5.2)$$

Esta relación fue hallada por Bariev [2] a partir del estudio del modelo de Ising bidimensional con un defecto en forma de línea.

En el caso $K_4 \neq 0$, la influencia del defecto sobre el comportamiento de los spines τ es gobernada por K_4 . El comportamiento del exponente crítico de la magnetización asociado a ambos tipos de spines es algo complejo en este caso ya que la interacción efectiva entre los spines en la región en que el defecto se encuentra localizado depende de la competencia entre los acoplamientos K , K_4 y K_l . A continuación nos proponemos estudiar este comportamiento.

5.2. Resultados

Modelo AT con defecto en forma de línea

Nuestro objetivo principal en el estudio del sistema AT con defecto es el de determinar la dependencia del exponente crítico de la función de correlación spin-spin x_{corr} con la intensidad del acoplamiento entre los spines σ y τ K_4 . Como hemos mencionado en la sec. 2.2 este exponente está directamente relacionado con el exponente crítico de la magnetización local de la línea de defectos x_m , aprovechando esta conexión junto al hecho de que la determinación de este último exponente es más sencilla que la de x_{corr} , hemos realizado medidas de la magnetización sobre el defecto y a partir de ellas determinado el comportamiento de x_m .

Presentamos a continuación los resultados numéricos obtenidos en el estudio de la dependencia de x_m^α con la intensidad del defecto sobre la línea E-F del diagrama de fases (fig. 1) definida por la ec. 4.5. Los puntos sobre la línea E-F pueden clasificarse según el valor del parámetro $\epsilon = K_4/K$, que representa el acoplamiento entre los spines σ y los τ : $\epsilon < 0$, los spines τ tienden a alinearse antiferromagnéticamente con los σ ; $\epsilon = 0$, no hay acoplamiento entre los τ y los σ ; $\epsilon > 0$, el acoplamiento es del tipo ferromagnético. Al extremo E de la línea E-F le corresponde el valor $\epsilon = -1$ en el límite $K \rightarrow \infty$ y al punto F el valor $\epsilon = 1$. Una vez elegido el valor del parámetro ϵ para una medida, los valores de K_4 y K se determinan a partir de la ec. 4.5 y la relación $\epsilon = K_4/K$.

Debido al tamaño finito del sistema, el valor del exponente crítico depende de L , y debe determinarse a partir de medidas de la magnetización para distintos tamaños, según la relación:

$$m_l^\alpha(L) \sim L^{-x_m^\alpha}, \quad \alpha = \sigma, \tau. \quad (5.3)$$

Hemos realizado medidas considerando tamaños hasta $L = 128$ en una red cuadrada con condiciones de contorno periódicas.

Sistema desacoplado: $\epsilon = 0$

Como ya hemos mencionado, en este caso el sistema se divide en dos modelos de Ising idenpendientes. Uno con un defecto en forma de línea (spines σ) y otro que carece de defectos (spines τ) y, por lo tanto, debe comportarse como el modelo de Ising bidimensional. El resultado analítico para los exponentes x_m^σ y x_m^τ (ec. 5.2) está dado por:

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA.

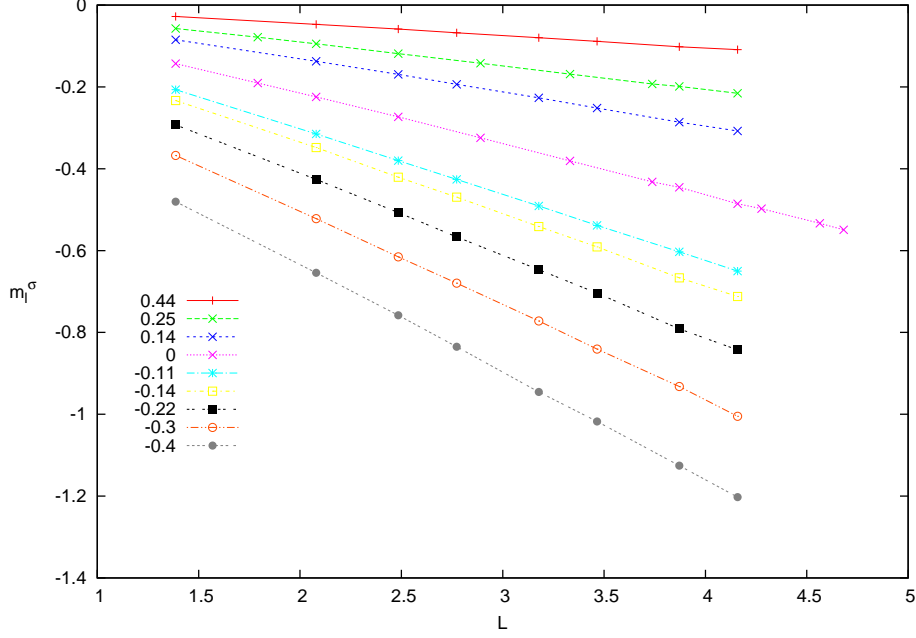


Figura 9: Logaritmo de la magnetización sobre el defecto m_l^σ en función del logaritmo del tamaño del sistema para diferentes valores de K_l , la pendiente de estas rectas representa el valor del exponente crítico x_m^σ .

$$x_m^\sigma = \frac{2}{\pi^2} \arctan^2(e^{-2K_l}), \quad x_m^\tau = 1/8, \quad K_4 = 0$$

Dado que $\epsilon = 0$, los resultados de esta sección corresponden a los valores críticos de $K_4 = 0$ y $K = K_c^{Ising}$. mientras que para la intensidad del defecto hemos considerado diferentes valores entre $K_l = -0.4$ y $K_l = 0.44$. Las medidas de la magnetización sobre el defecto de los spines σ en función de L para estos valores de K_l se muestran en la figura 9 en escala logarítmica, claramente el comportamiento de m_l se ajusta a una ley de potencias y los valores del exponente crítico corresponden a la pendiente de cada una de las rectas. Los valores numéricos de dicho exponente en función de la intensidad del defecto se presentan en la fig. 10, donde puede verse que están en completo acuerdo con el resultado analítico (ec. 5.2), gráfico en línea punteada. En el caso de los spines τ , el exponente crítico x_m^τ es el mismo para todos los valores de K_l , y su valor coincide con el resultado conocido para el modelo de Ising sin defecto $x_m^\tau = \frac{1}{8}$.

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA.

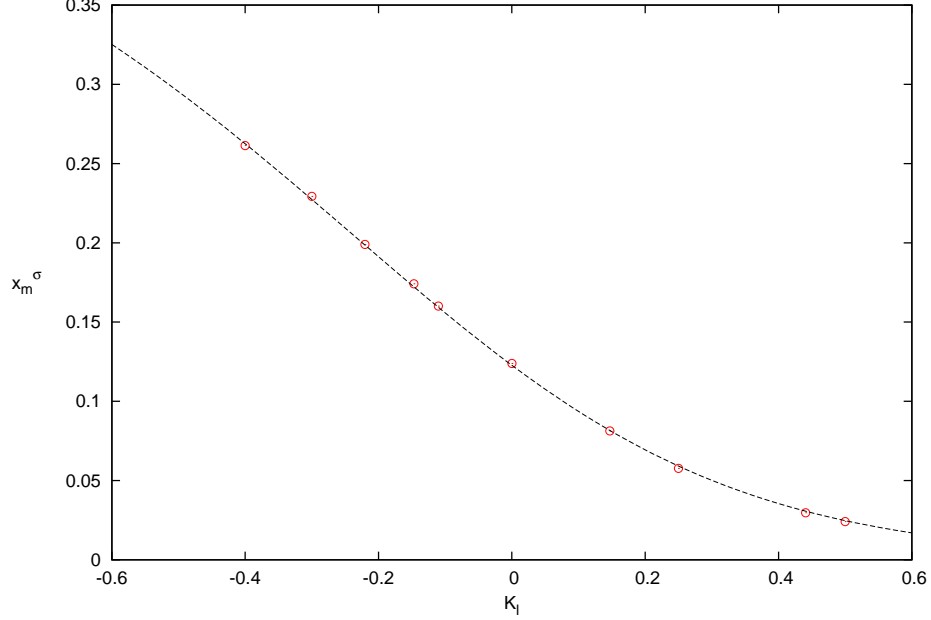


Figura 10: Exponente crítico de la magnetización del defecto para $\epsilon = 0$, la línea punteada representa el resultado teórico (5.2).

Acoplamiento positivo: $\epsilon > 0$

Cuando el acoplamiento entre los spines σ y los τ , ϵ , es diferente de cero, la magnetización del defecto no se comporta exactamente como una ley de potencias, es decir que los exponentes x_m^σ y x_m^τ dependen del tamaño del sistema L . Hemos realizado medidas de la magnetización sobre el defecto m_l a fines de determinar la dependencia del exponente crítico con el parámetro ϵ . Todas estas medidas corresponden a puntos sobre la curva crítica E-F en el plano (K, K_4) , de forma que para un dado valor de ϵ , K y K_4 deben satisfacer la ec. 4.5. En la fig. 11 se observa la magnetización del defecto en función de L (en escala logarítmica) para los casos $\epsilon = 0$ y $\epsilon = 0.75$, en el segundo caso puede apreciarse claramente una desviación respecto al comportamiento de una ley de potencias.

Se espera que para valores muy grandes de L la magnetización recupere su comportamiento como ley de potencias en función de L , y por lo tanto el exponente crítico efectivo tienda al valor correspondiente a un sistema de tamaño infinito, $x_m(L) \rightarrow x_m(\infty)$. Sin embargo el tamaño de sistema máximo que puede ser alcanzado, manteniendo un tiempo de cálculo aceptable está limitado, principalmente por la eficiencia del algoritmo utilizado cerca

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA.

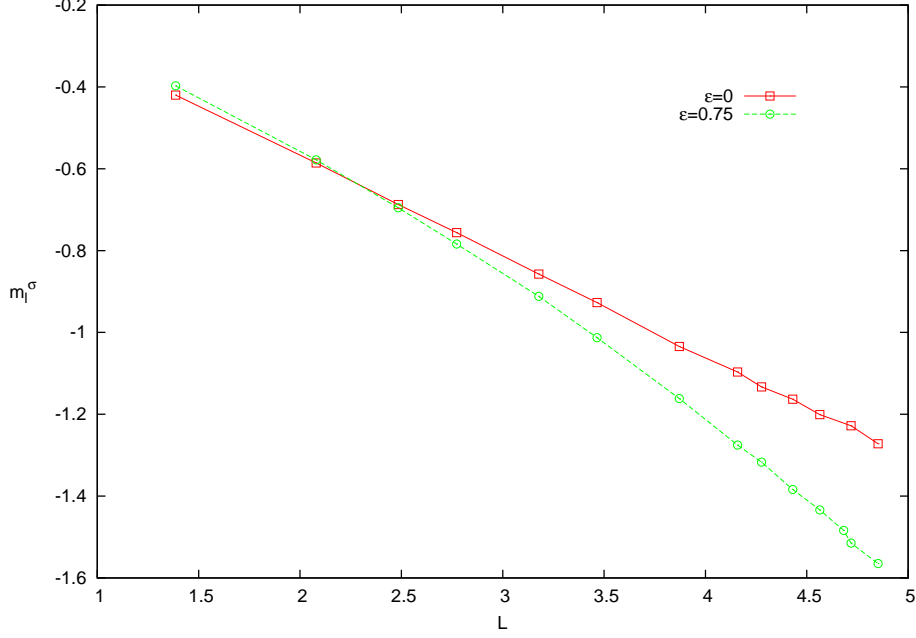


Figura 11: Gráfico del logaritmo de m_l^σ vs. el logaritmo de L para una intensidad del defecto $K_l = -0.35$ en los casos $\epsilon = 0$ y $\epsilon = 0.75$, puede apreciarse la desviación respecto de una ley de potencias cuando $\epsilon \neq 0$.

de las regiones críticas.

Hemos considerado tres valores positivos diferentes de ϵ , para cada uno de ellos medimos la magnetización sobre el defecto para diferentes intensidades del defecto K_l . La figura 12 muestra gráficos del logaritmo de m_l^α en función del logaritmo de L , por lo tanto la pendiente de estas curvas representa el exponente crítico efectivo $x_m^\alpha(L)$, ya que tomando el logaritmo de la ec.(5.3), que lo define, se obtiene:

$$\ln(m_l^\alpha(L)) \sim -x_m^\alpha \ln(L), \quad \alpha = \sigma, \tau. \quad (5.4)$$

Estos gráficos se presentan en un arreglo en el que la columna de la izquierda corresponde a los spines σ , la de la derecha a los τ y cada fila a un valor diferente de ϵ en orden creciente hacia abajo, $\epsilon = 0.25, 0.5, 0.75$. Cada uno de los gráficos contiene las curvas para cinco valores diferentes de K_l . Las tres curvas de menor pendiente en cada gráfico son para los valores positivos de la intensidad del defecto (símbolos $+$, \times y $*$), en estos casos la pendiente disminuye a medida que aumenta el tamaño del sistema, por lo tanto el exponente x_m^α tiende a un valor $x_{m>}^\alpha$ menor al correspondiente al sistema

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA.

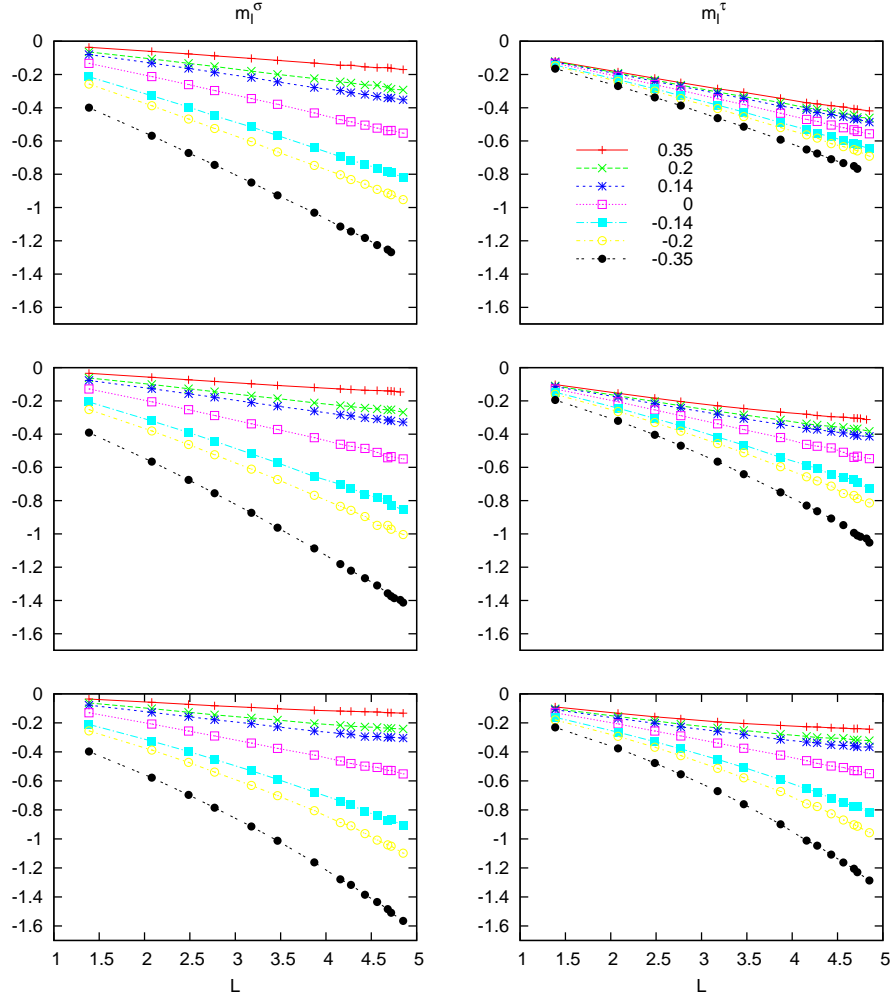


Figura 12: Gráfico del logaritmo de la magnetización sobre el defecto m_l^α en función del logaritmo del tamaño del sistema L . Cada fila corresponde a un valor diferente del acoplamiento entre los spines σ y los τ , $\epsilon = 0.25, 0.5, 0.75$. En la columna de la izquierda se representan los datos para los spines σ y en la columna derecha para los τ . Cada uno de estos gráficos contiene las medidas de m_l^α para cinco valores diferentes de la intensidad del defecto $K_l = -0.35, -0.2, -0.14, 0, 0.14, 0.2, 0.35$. La pendiente de las curvas disminuye para valores positivos de K_l (símbolos $+$, \times y \times) y aumenta para los valores negativos de K_l (\square , \circ y \bullet).

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA.

libre de defectos, tanto para los espines τ como para los σ , y la desviación respecto del valor sin defectos aumenta a medida que el valor de K_l se aparta de 0. La curva central (\square) corresponde a $K_l = 0$, tiene en todos los casos una pendiente muy próxima a $\frac{1}{8}$ y prácticamente no muestra desviaciones de este valor al aumentar L . Las tres curvas inferiores de cada gráfico, las de mayor pendiente, corresponden a valores negativos de la intensidad del defecto, en este caso el exponente crítico se aproxima a un valor $x_{m<}^\alpha$ mayor a $\frac{1}{8}$ y la desviación respecto al caso desacoplado es también más apreciable para los valores más negativos de K_l .

Los valores numéricos del exponente crítico efectivo pueden obtenerse a partir de la magnetización para dos valores diferentes del tamaño del sistema, L y bL , tomando el logaritmo de la ec. (5.3) y resolviendo para x_m :

$$x_m^\alpha(L) = \frac{\ln m_l^\alpha(bL) - \ln m_l^\alpha(L)}{\ln b}, \quad \alpha = \sigma, \tau. \quad (5.5)$$

Si se grafican los valores obtenidos en función de la inversa del tamaño del sistema, $\frac{1}{L}$, el valor del exponente en el límite $L \rightarrow \infty$ puede estimarse determinando gráficamente la intersección de la extrapolación de la gráfica con la línea vertical $L = 0$. En nuestro caso, debido a la lenta convergencia del algoritmo utilizado en la región crítica, la extrapolación mencionada es muy difícil de realizar, la fig.13 muestra la gráfica obtenida de esta forma para $\epsilon = 0.75$ y $K_l = -0.35$. Por ello hemos optado por determinar el valor del exponente crítico para el mayor valor del tamaño del sistema $L = 128$ utilizado en las simulaciones ajustando un polinomio de orden 2 a la gráfica de $\ln(m_l)$ vs. L (fig. 13-(a)), a partir del cual obtenemos el valor del exponente evaluando la derivada en $L = 128$. Mediante este procedimiento determinamos x_m para todos los valores de ϵ y K_l estudiados. Su comportamiento se muestra en la fig. 14 para los tres valores de ϵ como función de K_l . Se incluyen también con fines comparativos los datos para $\epsilon = 0$ y el resultado teórico para ese mismo caso. La desviación respecto al caso desacoplado aumenta con la intensidad del acoplamiento ϵ y es mas fuerte para el exponente asociado a los spines σ (símbolos sin relleno en la figura, Δ , \circ y \square) que para el exponente x_m^τ asociado a los τ (símbolos \blacktriangle , \bullet y \blacksquare). Para valores positivos de K_l , $x_m^{\sigma,\tau}$ tiene un valor menor al que presenta para $K_l = 0$, y se aproxima a cero a medida que K_l aumenta. Para valores negativos de K_l , los exponentes críticos son mayores que para el caso sin defecto y aumentan a medida que el valor absoluto de K_l crece.

El hecho de que el valor del exponente se aproxime a cero cuando la intensidad del defecto es grande y positiva, puede ser analizado en terminos

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA.

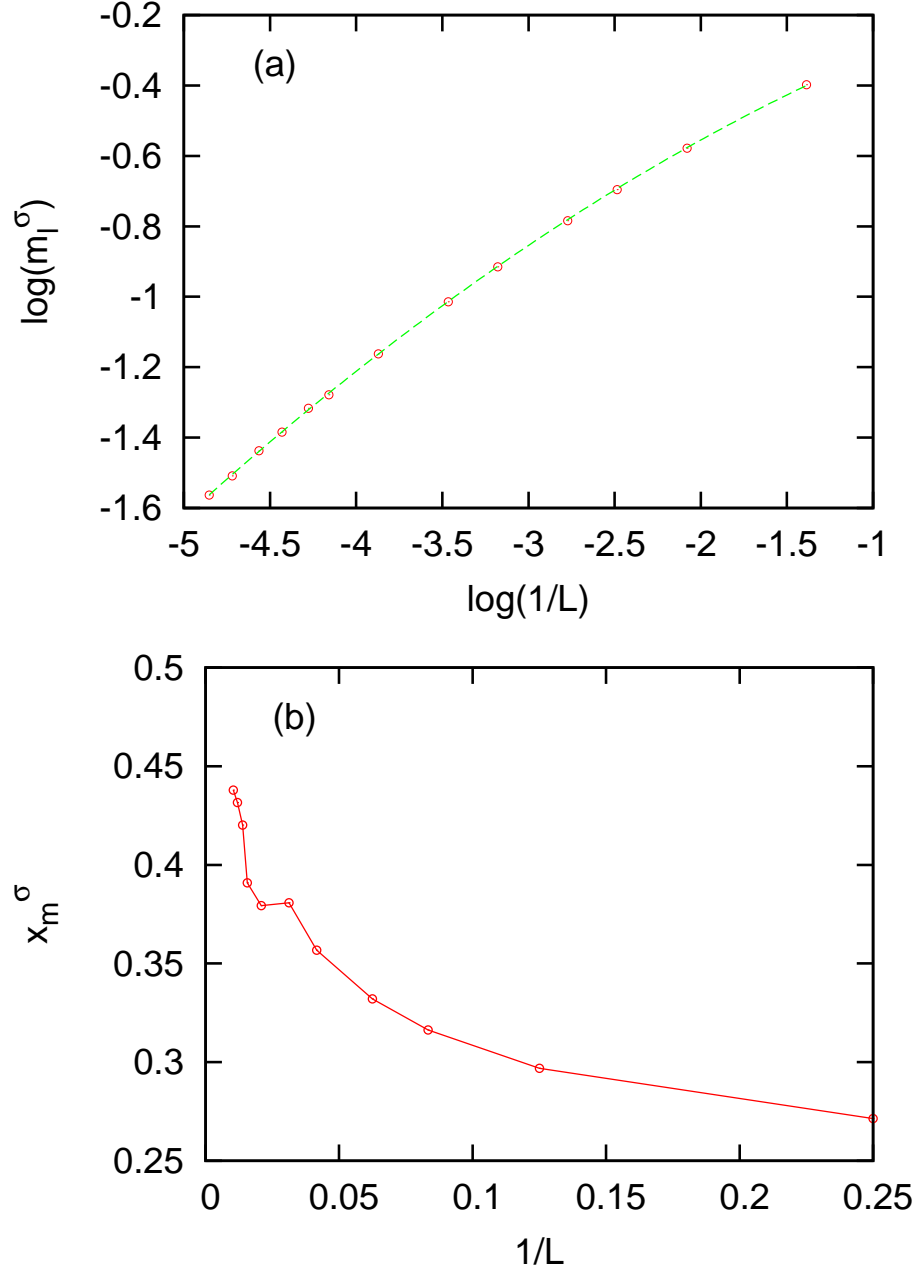


Figura 13: (a) Magnetización sobre el defecto en función de la inversa del tamaño del sistema, $\frac{1}{L}$ para $\epsilon = 0.75$ y $K_l = -0.35$, la línea punteada muestra el ajuste de un polinomio de grado 2, (b) valor efectivo del exponente crítico de la magnetización obtenido utilizando la ec.(5.5) para los puntos de la gráfica (a) tomados de a pares.

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA.

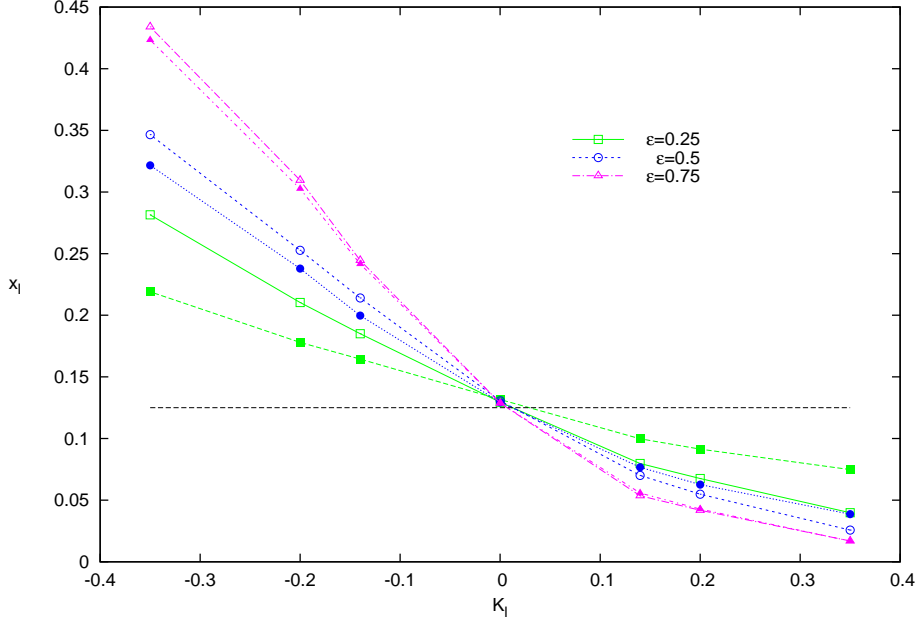


Figura 14: Exponente crítico de la magnetización del defecto, en función de la intensidad K_l . Se muestran los resultados para $\epsilon = 0.25, 0.5, 0.75$. Los puntos del gráfico representados por símbolos sin relleno Δ , \circ y \square corresponden a los spines σ , mientras que los representados por símbolos rellenos, \blacktriangle , \bullet y \blacksquare , corresponden a los spines τ . La línea horizontal punteada indica el valor $\frac{1}{8}$, valor teórico del exponente para $K_l = 0$.

de la transición de fase orden-desorden para la línea de defectos. Los spines que yacen sobre la línea se encuentran acoplados entre sí por una constante efectiva $K_{ef} = K + K_l$ que es más fuerte que su acoplamiento con los átomos que no están sobre la línea, es decir sus vecinos en la dirección perpendicular a ésta. De esta forma, el defecto tiende a estar ordenado para valores de K menores al valor crítico para el plano, y se encuentra en ese estado cuando el resto del sistema transita del desorden al orden. Este comportamiento puede verse en la figura 15, donde se muestran los parámetros de orden $\langle \sigma \rangle$ y $\langle \sigma \rangle_l$ que miden el orden del plano formado por todos los spines de tipo σ y de la línea de defectos, respectivamente, en función del acoplamiento K , para una transición de fase sobre la curva E-F.

Siguiendo el mismo razonamiento para el caso en que la intensidad del defecto es negativa, el valor efectivo del acoplamiento entre átomos sobre el

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA.

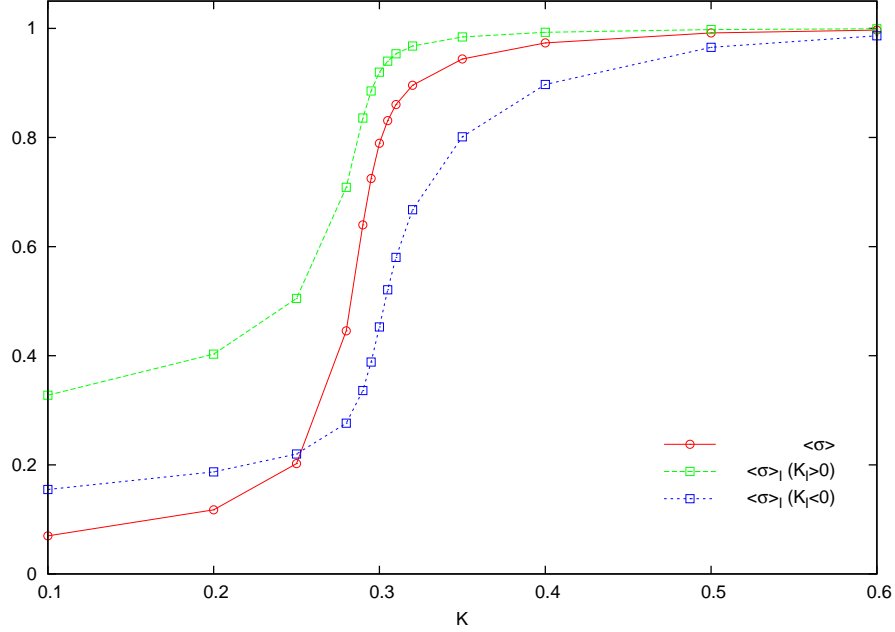


Figura 15: Parámetros de orden $\langle \sigma \rangle$ (magnetización del plano σ) y $\langle \sigma \rangle_l$ (magnetización sobre el defecto) para una transición de fase sobre la línea E-F. Cuando la intensidad del defecto es positiva $K_l = 0.35$, la línea se ordena para valores de K inferiores al valor crítico para el plano. Es decir que se encuentra ordenada cuando ocurre la transición para el plano. Cuando $K_l = -0.35$ la línea está desordenada durante la transición de fase.

defecto es menor que el acoplamiento K y en consecuencia la línea de defectos se encuentra desordenada o en transición al orden para el valor de K que produce el ordenamiento del plano.

Acoplamiento negativo: $\epsilon < 0$

Observando las gráficas del logaritmo de la magnetización en función del logaritmo de L cuando ϵ es negativo (figura 16) podemos ver que en este caso el comportamiento para los spines σ es diferente que para los τ .

Para los σ ocurre lo mismo que en el caso $\epsilon > 0$, la pendiente del logaritmo de la magnetización para valores positivos del defecto es menor que para el caso libre de defecto, mientras que para un defecto con intensidad negativa la pendiente es mayor. Para los spines τ , sin embargo el comportamiento es inverso, es decir, las pendientes son mayores cuando la intensidad del defecto

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA.

es positiva y menores cuando es negativa.

La figura 17, muestra los exponentes críticos x_m^σ y x_m^τ , obtenidos mediante ajustes de segundo orden al igual que en el caso $\epsilon > 0$, como función de la intensidad del defecto.

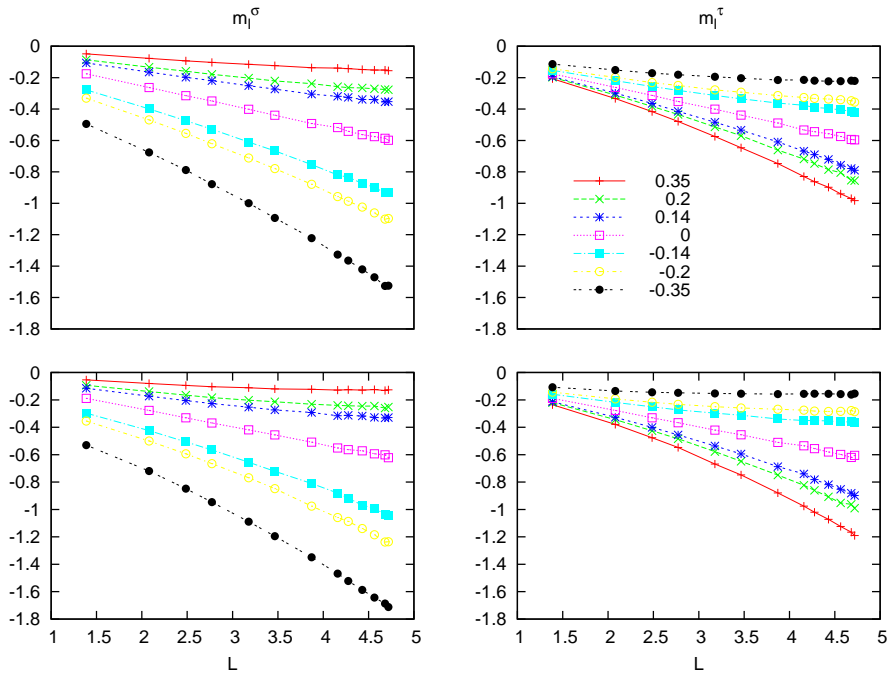


Figura 16: Gráfico en escala logarítmica de la magnetización sobre el defecto m_l^α en función el tamaño del sistema L . Cada fila corresponde a un valor diferente del acoplamiento ($\epsilon = -0.5, -0.75$) entre los spines σ y los τ . En la columna de la izquierda se representan los datos para los spines σ y en la columna derecha para los τ .

6. CONCLUSIONES

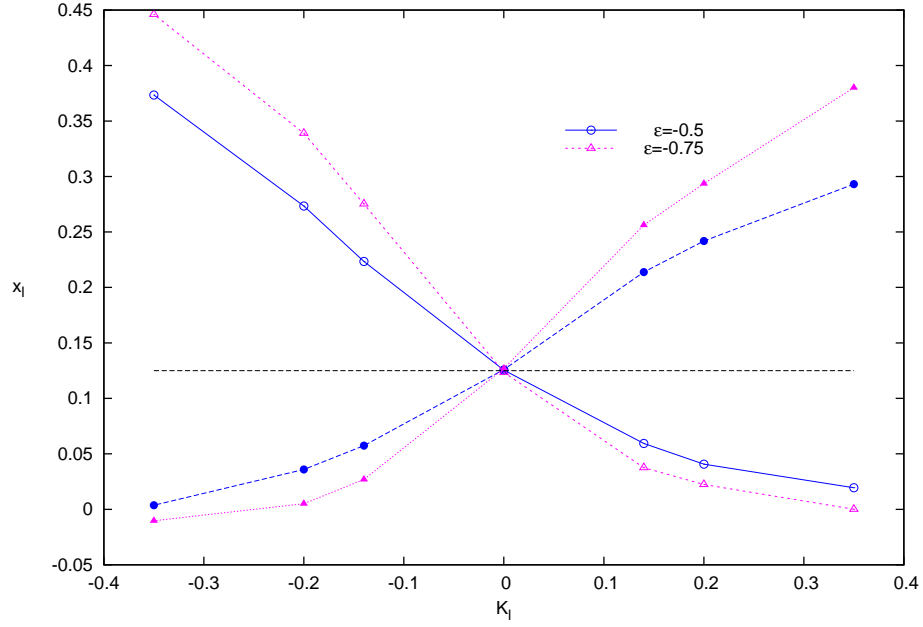


Figura 17: Exponente crítico de la magnetización del defecto, en función de la intensidad K_l para $\epsilon < 0$. Se muestran los resultados para $\epsilon = -0.5, -0.75$. Los puntos representados con símbolos sin relleno corresponden a los spines σ , su comportamiento es similar al hallado para valores positivos de ϵ . El comportamiento del exponente asociado a los spines τ es contrario al hallado para $\epsilon > 0$, estos valores están representados con símbolos rellenos.

6. Conclusiones

Bibliografía

- [1] J. Ashkin and E. Teller. Statistics of two-dimensional lattices with four components. *Phys. Rev.*, 64:178, 1943.
- [2] R.Z. Bariev. Influence of linear defects on the local magnetization of a plane ising lattice. *Zh. Éksp. Teor. Fiz.*, 77:1217–1229, 1979.
- [3] R. Baxter. Eight-vertex model in lattice statistics. *Phys. Rev. Lett.*, 26:832–833, 1971.
- [4] R.J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Academic Press, 1982.
- [5] K. Binder and D.W. Heermann. *Monte-Carlo simulations in statistical physics, an introduction*. Springer, 2010.
- [6] C. Domb and J. Lebowitz. *Phase transitions and critical phenomena*. Academic Press, 1987.
- [7] C. Fan. On critical properties of the ashkin-teller model. *Phys. Lett.*, 39A:136–6, 1972.
- [8] C. Fan. Symmetry properties of the ashkin-teller model and the eight-vertex model. *Phys. Rev. B*, B6:902–10, 1972.
- [9] Michael E. Fisher and Michael N. Barber. Scaling theory for finite-size effects in the critical region. *Phys. Rev. Lett.*, 28:1516–1519, 1972.
- [10] L. Turban F.Á. Bagaméry and F. Iglói. Critical behavior at the interface between two systems belonging to different universality classes. *Phys. Rev. B*, 73:144419, 2006.
- [11] R. D’Ortenzio K. Fritsch and D. Venus. Observation of mixed anisotropy in the critical susceptibility of an ultrathin magnetic film. *arXiv*., 1010.0657:0, 2010.

BIBLIOGRAFÍA

- [12] J.P. Kadanoff. Connections between the critical behavior of the planar model and that of the eight-vertex model. *Phys. Rev. Lett.*, 39:903–905, 1977.
- [13] P. Lajkó and F. Iglói. Numerical study of the critical behavior of the ashkin-teller model at a line defect. *J. Stat. Mech.: Theor. Exp.*, 2011:P05025, 2011.
- [14] D.P. Landau and K. Binder. *A guide to Monte-Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge University Press, 2009.
- [15] M.N. Rosenbluth A.H. Teller N. Metropolis, A.W. Rosenbluth and E. Teller. Equations of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21:1087, 1953.
- [16] Carlos Naón. Critical behavior of the spin correlation function in the ashkin-teller and baxter models with a line defect. *Phys. Rev. E*, 79:051112, 2009.
- [17] M.P. Nightingale and H.W.J. Blöte. Linear defects in two dimensional systems: a finite-size investigation. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 15:L33–L38, 1982.
- [18] L. Turban P. Lajkó and F. Iglói. Scaling properties at the interface between different critical subsystems: The ashkin-teller model. *Phys. Rev. B*, 76:224423, 2007.
- [19] G.S. Grest R.V. Ditzian, J.R. Banavar and L.P. Kadanoff. Phase diagram for the ashkin-teller model in three dimensions. *Phys. Rev. B*, 22:2542–53, 1980.
- [20] F.J. Wegner. Duality relation between the ashkin-teller and the eight-vertex model. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 5:L131, 1972.