

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

Gregorio Duchowney

Director: Aníbal Iucci

16 de diciembre de 2012

Índice general

Índice general	I
1. Introducción	1
2. Aspectos teóricos del comportamiento crítico de sistemas . . .	2
2.1. Exponentes críticos y parámetros de orden	2
2.2. Teoría de escala	3
3. Conceptos relacionados a las simulaciones computacionales . .	5
3.1. El método Montecarlo	5
3.2. Efectos de tamaño finito	8
4. Modelo de Ashkin-Teller	9
5. Modelo AT con un defecto en forma de línea	12
6. Resultados y discusión	14
6.1. Verificación del modelo AT	14
Sistema desacoplado ($K_4 = 0$)	16
Diagrama de fases	17
6.2. Modelo AT con defecto en forma de línea	22
Sistema desacoplado: $\epsilon = 0$	23
Acoplamiento positivo: $\epsilon > 0$	25
Acoplamiento negativo: $\epsilon < 0$	29
7. Conclusiones	31
Bibliografía	32

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 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 [10] ha despertado interés en el estudio de nuevos problemas y nuevos escenarios, entre ellos, la extensión de los modelos mencionados para reproducir el comportamiento de defectos o impurezas presentes en los materiales. La introducción de interfaces o defectos lineales en modelos bidimensionales [16, 9, 17] ha dado como resultado importantes modificaciones en el comportamiento crítico de los sistemas.

El comportamiento crítico del modelo de Ashkin-Teller en dos dimensiones con un defecto en forma de línea ha sido estudiado recientemente utilizando el método numérico density matrix renormalization (DMRG) en la descripción del modelo en el límite Hamiltoniano [12], que conduce a una representación cuántica en una red de dimensión menor a la del modelo clásico, así como mediante métodos teóricos, en particular integrales de camino en la descripción del modelo en términos de campos fermiónicos[15].

Las discrepancias entre los resultados obtenidos mediante métodos teóricos y numéricos, respecto a la dependencia de los exponentes críticos con algunos parámetros del hamiltoniano son una fuerte motivación para tratar el problema mediante un método diferente.

En este trabajo estudiaremos el comportamiento crítico de este modelo utilizando el método de simulaciones computacionales Montecarlo (MC), ampliamente utilizado para el estudio de fenómenos críticos en sistemas bidimensionales, directamente sobre el sistema clásico. Nuestro objetivo es arrojar algo de luz sobre los resultados actuales.

2. Aspectos teóricos del comportamiento crítico de sistemas

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 una función $F(t)$:

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

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 caracterizada por alguna propiedad del sistema que tiene 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 magnéticos de los

2. ASPECTOS TEÓRICOS DEL COMPORTAMIENTO CRÍTICO DE SISTEMAS

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. 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 la parte singular de la energía libre de un sistema f 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) que, ante un cambio de escala en las coordenadas $r \rightarrow r/b$, 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 exponente 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 DE SISTEMAS

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 problemas de la mecánica estadística se pretende recorrer una región del espacio de las fases a fin de estimar ciertas propiedades del sistema, por ejemplo a través de promedios térmicos de sistemas de partículas interactuantes. 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 la interacción entre las partículas está dada por un Hamiltoniano $H_N(\mathbf{x})$, los valores medios de las funciones termodinámicas $B(\mathbf{x})$ vienen dados por:

3. CONCEPTOS RELACIONADOS A LAS SIMULACIONES COMPUTACIONALES

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

siendo Ω el volumen del espacio de las fases y $\beta = 1/kT$, con k la constante de Boltzmann. La resolución exacta de estas ecuaciones es posible en algunos casos sencillos, como el del modelo de Ising bidimensional, pero en general su dificultad depende de las interacciones presentes en el Hamiltoniano y deben utilizarse métodos aproximados o cálculos numéricos para obtener algún resultado.

El método MC permite obtener resultados numéricos discretizando el problema y tomando una cantidad finita de puntos en el espacio de las fases. 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; 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 que 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 [14] 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:

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

3. CONCEPTOS RELACIONADOS A LAS SIMULACIONES COMPUTACIONALES

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 $H(x_{i'}) - H(x_i)$,

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

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 dependencia temporal de un modelo cuyos cambios no se producen de una forma definida, sino de una manera 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 de la partícula en el sitio i .
4. Generar un número aleatorio $0 < r < 1$
5. Si $r < e^{-\beta \Delta E}$, realizar la transición
6. Volver al paso 2

3. CONCEPTOS RELACIONADOS A LAS SIMULACIONES COMPUTACIONALES

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 partículas 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. Los efectos de borde pueden reducirse mediante la imposición de condiciones de contorno periódicas.

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 [13] 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 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:

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

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

donde $\alpha = \sigma, \tau, \sigma\tau$ según corresponda, 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 $T > T_c$ y a $2/3$ para $T < T_c$. Las gráficas del cumulante para diferentes tamaños del sistema, se intersectan en el valor crítico, por lo tanto este puede determinarse aproximadamente graficando U_4 para diferentes valores de L .

4. Modelo de Ashkin-Teller

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 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 [19] 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

4. MODELO DE ASHKIN-TELLER

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 [11] (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 en 1980 por Ditzian et. al. [18]. En el 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 $\sigma\tau$:

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

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

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, toma su valor máximo solo cuando los spines en ambos planos se encuentran en el mismo estado de

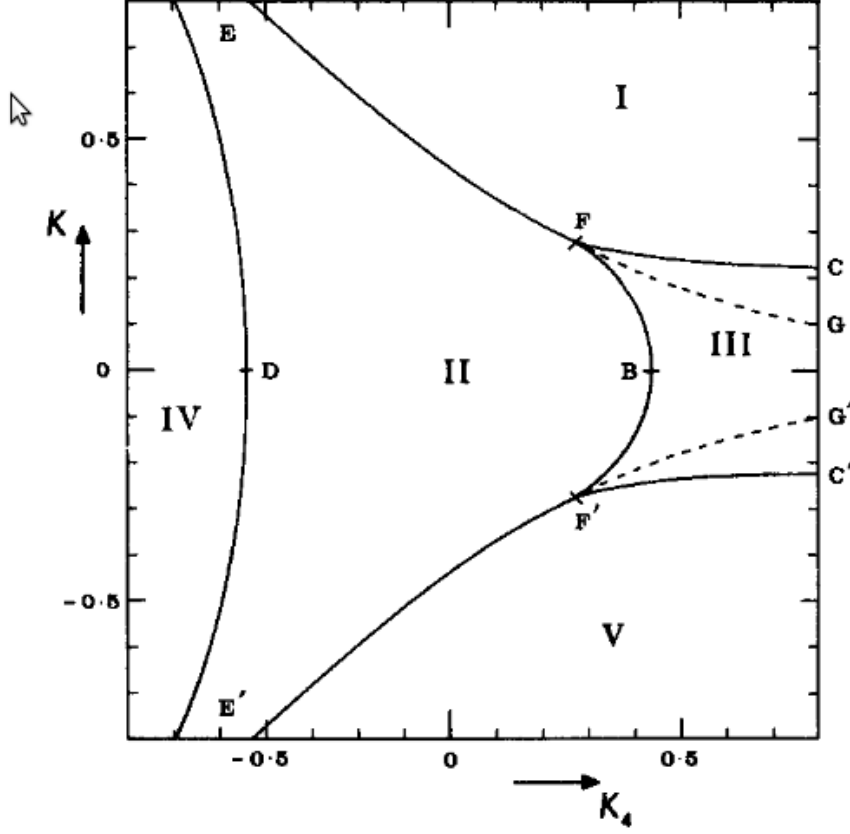


Figura 1: Diagrama de fases del modelo Ashkin-Teller. El sistema se encuentra en diferentes estados de orden en cada una de las regiones I, II, III, IV y V. Se indican con letras (B, C, C', D, E, E', F, F', G, G') algunos puntos en los que K_4 y K son conocidos exactamente.

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 figura 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, esto ocurre cuando $K_4/K \gtrsim -1$ y 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).

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA

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 línea 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 línea 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:

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

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 para el modelo de Ising, dado por:

$$\sinh(2K_c) = 1, \quad (4.6)$$

Respecto a las líneas críticas que separan el resto de las fases en el diagrama de la fig. 1, sólo la línea E'-F', que se obtiene a partir de la línea E-F negando K , es conocida analíticamente. Las prolongaciones F-G y F'-G' (líneas punteadas) no representan líneas críticas. Si bien las líneas F-B y F-C no son conocidas analíticamente, el punto B ha sido estimado como $K = 0$, $K_4 = K_c$ y el punto C es $K_4 = \infty$, $K = \frac{1}{2}K_c$. De la misma forma, la línea E-D-E' no es conocida analíticamente, pero el punto D corresponde a $K = 0$, $K_4 = -K_c$.

5. Modelo AT con un defecto en forma de línea

Un defecto en un sistema magnético puede ser representado mediante la modificación de las constantes de acoplamiento en una determinada región

5. MODELO AT CON UN DEFECTO EN FORMA DE LÍNEA

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 descriptas por un conjunto de exponentes críticos diferentes a los del sistema homogéneo.

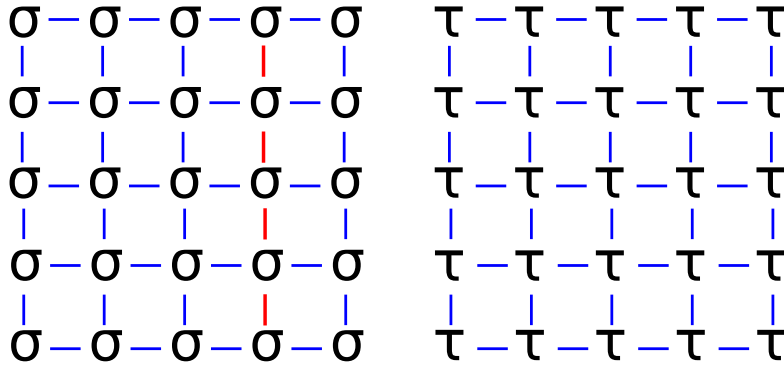


Figura 2: Defecto asimétrico en forma de línea. La constante de acoplamiento entre los spines σ se modifica sobre una línea mientras que la constante de acoplamiento entre los spines τ conserva su valor en toda la red.

En este trabajo estudiaremos el comportamiento crítico local sobre un defecto con forma de línea en el modelo AT.

Introducimos un defecto asimétrico en el sistema modificando solo la interacción entre los spines de tipo σ sobre una línea del plano que los contiene (fig. 2), 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

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

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 $\beta = \frac{1}{8}$, 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 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 .

6. Resultados y discusión

En esta sección presentamos los resultados obtenidos a partir de un estudio numérico del modelo AT mediante el método de simulaciones Montecarlo.

6.1. 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

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

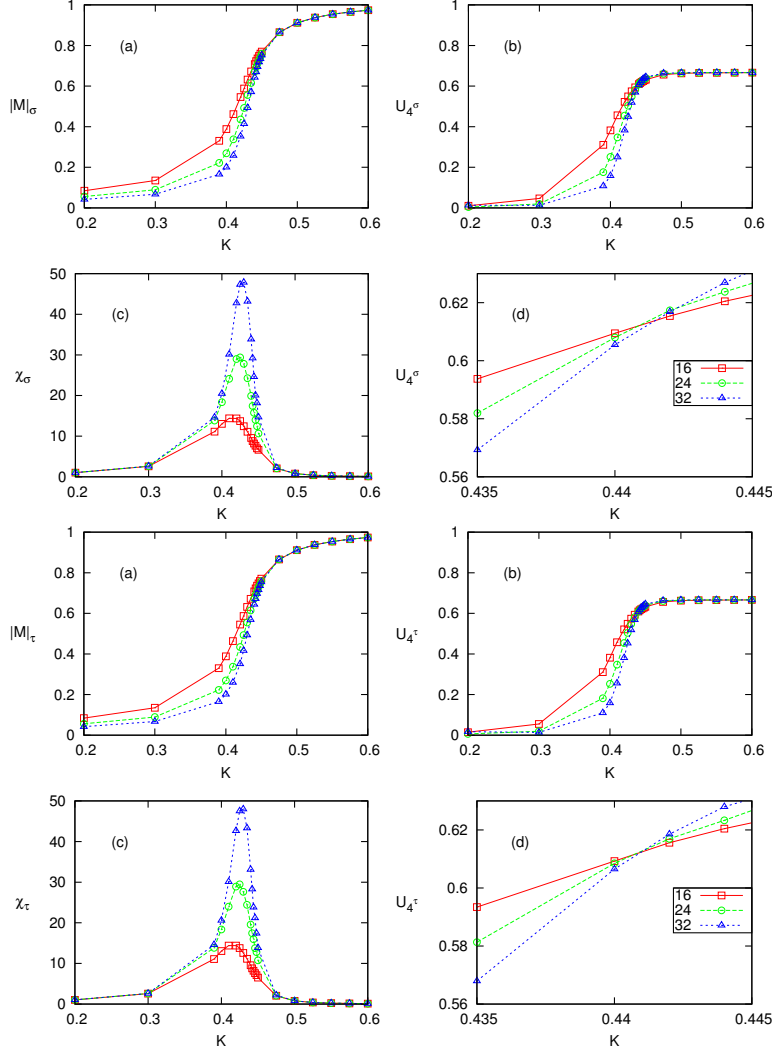


Figura 3: En el caso $K_4 = 0$ el comportamiento de los spines σ y los τ es el del modelo de Ising en una red cuadrada. (a): en las medidas de la magnetización del sistema ($|M_\sigma| = \langle \sigma \rangle$, $|M_\tau| = \langle \tau \rangle$) puede observarse la transición de fase de segundo orden en K_c , (b): la susceptibilidad magnética presenta un pico abrupto en K_c 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 .

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

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 descriptas en la sección 4 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 $K = K_c$ como se describe en 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 .

Hemos determinado el valor crítico de la constante de acoplamiento K_c mediante el método del cumulante de cuarto orden. 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 3. Los resultados obtenidos para los spines σ y los τ están en buen acuerdo con el valor teórico de K_c : $K_c^\sigma = K_c^\tau = 0.441(1)$.

En la misma figura puede observarse el comportamiento de los parámetros de orden $|M_{\sigma,\tau}|$ (a) y la susceptibilidad magnética (c) 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.

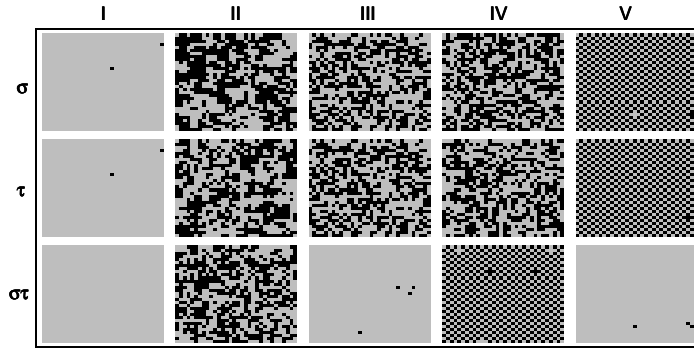


Figura 4: Snapshots del sistema en las diferentes fases. Cada columna corresponde a una región diferente del diagrama de fases. En la fila superior se representan los spines σ , en la central los τ y en la inferior el producto $\sigma\tau$. Estos gráficos se han realizado para un sistema de tamaño 32×32 . 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 4 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.

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

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 4 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).

Los valores críticos de los acoplamientos K y K_4 para las transiciones entre las fases enumeradas anteriormente han sido determinados de la misma forma que en la transición para $K_4 = 0$, utilizando el método del cumulante de cuarto orden.

Las figuras 5 y 6 muestran la determinación mediante métodos gráficos de los valores críticos de K y K_4 , el comportamiento de las magnitudes $|M|$, χ y U_4 en las cercanías de los puntos críticos es similar al caso $K_4 = 0$. La figura 5 corresponde al caso de la transición entre las fases I y II para un valor de K_4 diferente de 0, las curvas muestran el mismo comportamiento que en el caso $K_4 = 0$, pero puede verse que el valor crítico obtenido para K es diferente. La figura 6 corresponde a la transición entre las fases II y IV, 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

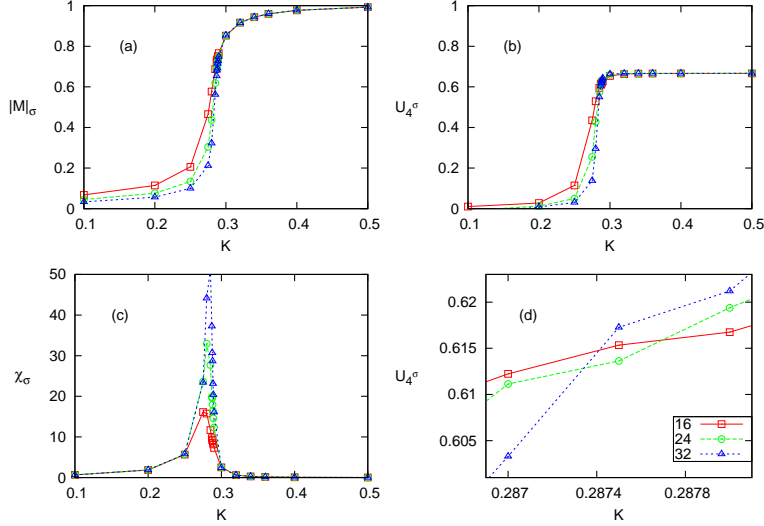


Figura 5: En el caso $K_4 = 0.25$ la transición entre las fases I y II, localizada sobre la línea E-F, es similar a la que ocurre en el modelo de Ising. El valor crítico de K es menor a K_c . (a): magnetización ($|M| = \langle \sigma \rangle$), puede observarse la transición de fase de segundo orden en $K \simeq 0.287(1)$, (b): la susceptibilidad magnética presenta un pico abrupto en K_c 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 .

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 7 puede observarse claramente el acuerdo entre los resultados obtenidos para 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 comple-

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

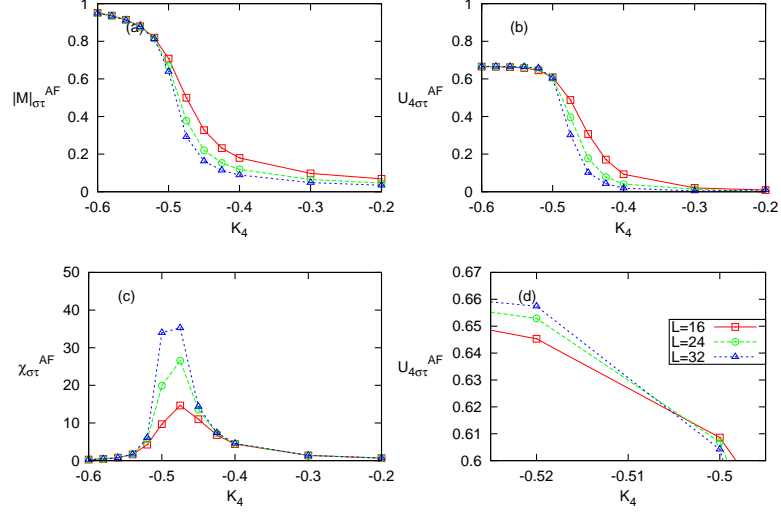


Figura 6: La transición entre las fases II y IV, localizada sobre la línea E-E' puede estudiarse mediante el parámetro de orden $\langle\sigma\tau\rangle_{AF}$. El comportamiento de las magnitudes $|M|_{\sigma\tau}^{AF}$, $\chi_{\sigma\tau}^{AF}$ y $U_{4\sigma\tau}^{AF}$ corresponde al de una transición de fase de segundo orden.

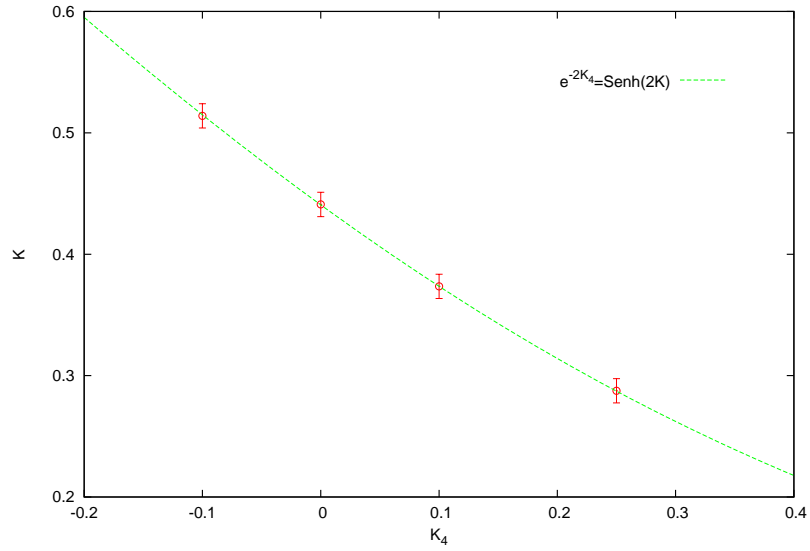


Figura 7: Transiciones de fase sobre la línea E-F, definida por (4.5), para diferentes valores de $K_4 = -0.1, 0, 0.1, 0.25$.

tamente 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 $K = 0$, $K_4 = K_c$. 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 $K = 0$, $K_4 = -K_c$. Hemos realizado medidas para determinar otros puntos donde ocurre esta transición, 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 8.

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 línea 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 línea (fig. 8).

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. 8, los círculos rojos corresponden a los resultados numéricos obtenidos en este trabajo.

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.

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

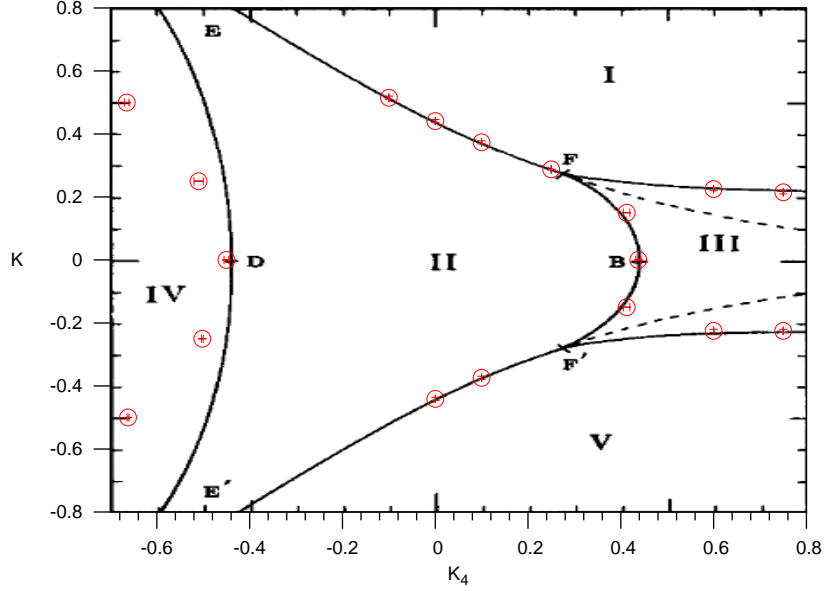


Figura 8: Se presentan los puntos obtenidos para las transiciones de fase del modelo AT sobre el diagrama de fases publicado por Baxter[4]. En el caso de la transición II→IV, la curva es solo representativa, no se ha determinado su expresión analítica.

6.2. Modelo AT con defecto en forma de línea

En esta sección incluimos los resultados numéricos obtenidos en el estudio de la dependencia del exponente crítico de la magnetización sobre el defecto, 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:

$$m_l^\alpha(L) \sim L^{-x_m^\alpha}, \quad \alpha = \sigma, \tau. \quad (6.1)$$

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

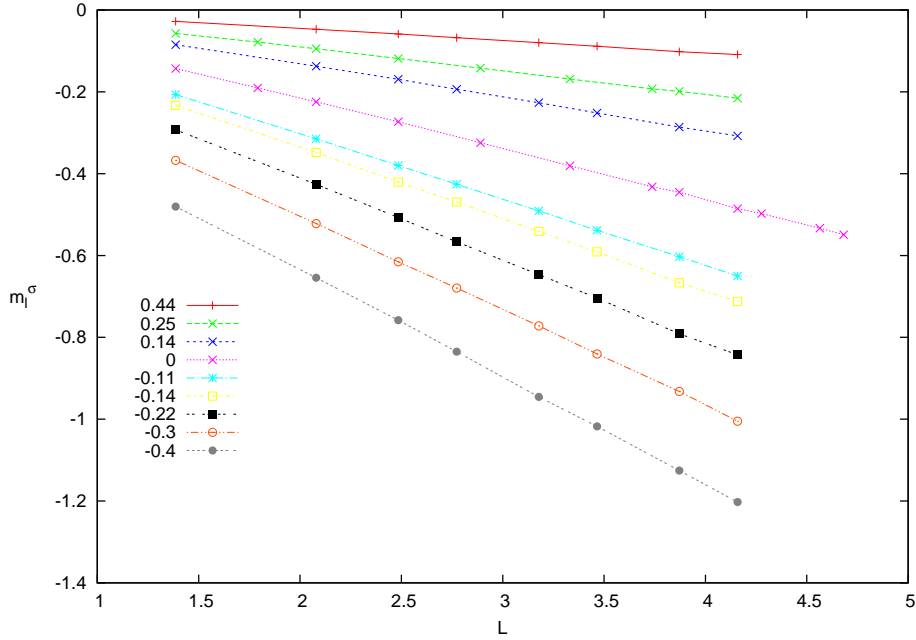


Figura 9: Logaritmo de la magnetización sobre el defecto m_l^σ en función del logaritmo del tamaño del sistema para diferentes valores de K_l , la pendiente de estas rectas representa el valor del exponente crítico x_m^σ .

Sistema desacoplado: $\epsilon = 0$

Como ya hemos mencionado, en este caso el sistema se divide en dos modelos de Ising independientes. 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. 6.2) está dado por:

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

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

Dado que $\epsilon = 0$, los resultados de esta sección corresponden a valores de $K_4 = 0$ y $K = K_c$, 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. 6.2), 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 $x_m^\tau = \frac{1}{8}$.

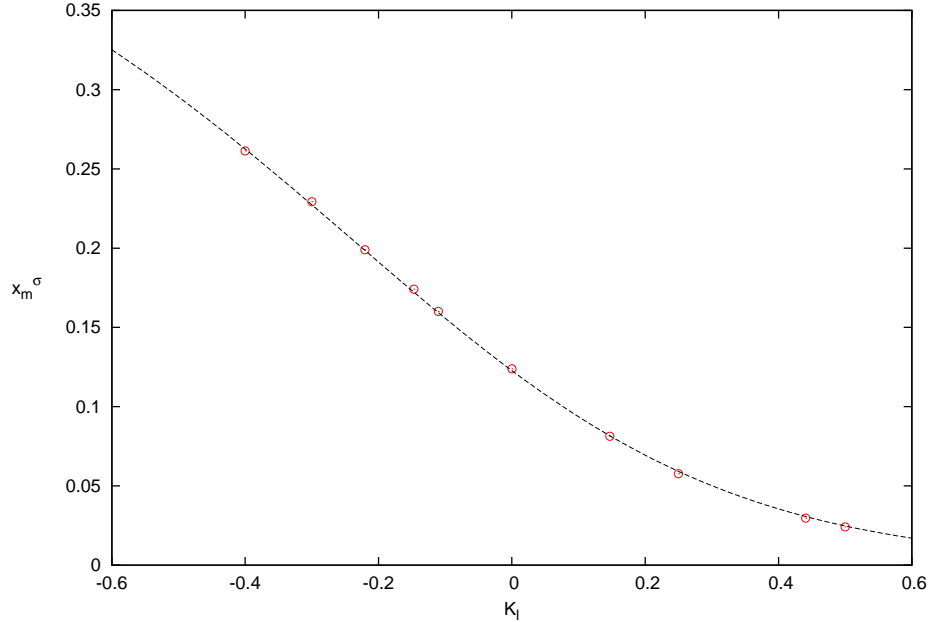


Figura 10: Exponente crítico de la magnetización del defecto para $\epsilon = 0$, la línea punteada representa el resultado teórico (6.2).

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 . 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.

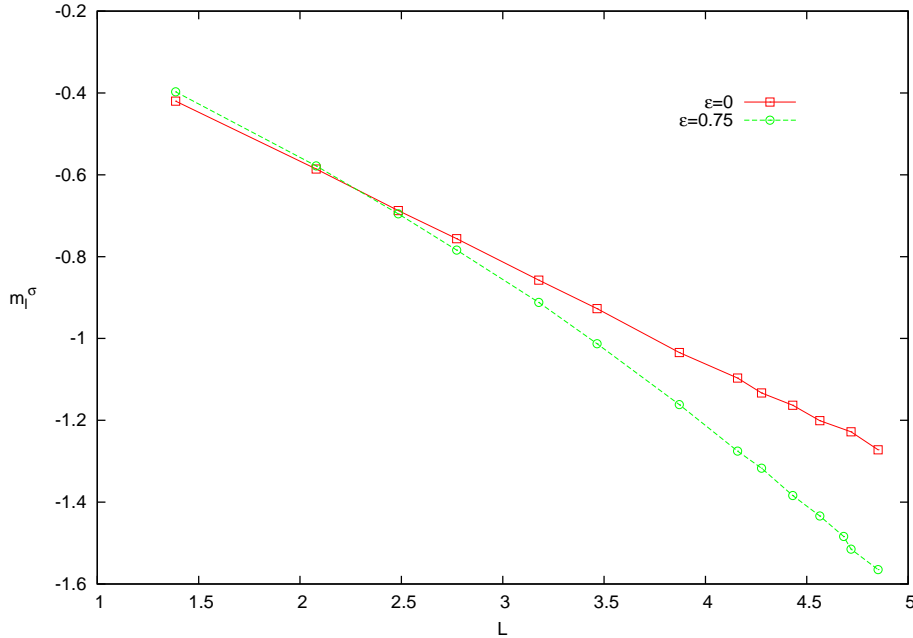


Figura 11: Gráfico del logaritmo de m_l^σ vs. el logaritmo de L para una intensidad del defecto $K_l = -0.35$ en los casos $\epsilon = 0$ y $\epsilon = 0.75$, puede apreciarse la desviación respecto de una ley de potencias cuando $\epsilon \neq 0$.

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, $x_m(L) \rightarrow x_m(\infty)$.

Una primera aproximación al valor efectivo del exponente puede obtenerse a partir de la magnetización para dos valores diferentes del tamaño del sistema, L y bL , a través de un ajuste lineal:

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

$$x_m^\alpha(L) = \frac{\ln m_l^\alpha(bL) - \ln m_l^\alpha(bL)}{\ln b}, \quad \alpha = \sigma, \tau. \quad (6.2)$$

Hemos considerado tres valores positivos diferentes para 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 que la pendiente de estas curvas es igual al exponente crítico efectivo $x_m^\alpha(L)$.

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 libre de defectos, tanto para los espines τ como para los σ , y esta desviación aumenta con K_l . Se espera que, para valores muy grandes de L , $x_{m>}^\alpha$ se aproxime a cero.

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 es también más apreciable para los valores más negativos de K_l .

Este comportamiento se ve reflejado directamente en el del exponente crítico, que se muestra en la figura 13 para los tres valores de ϵ en función de la intensidad del acoplamiento 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.

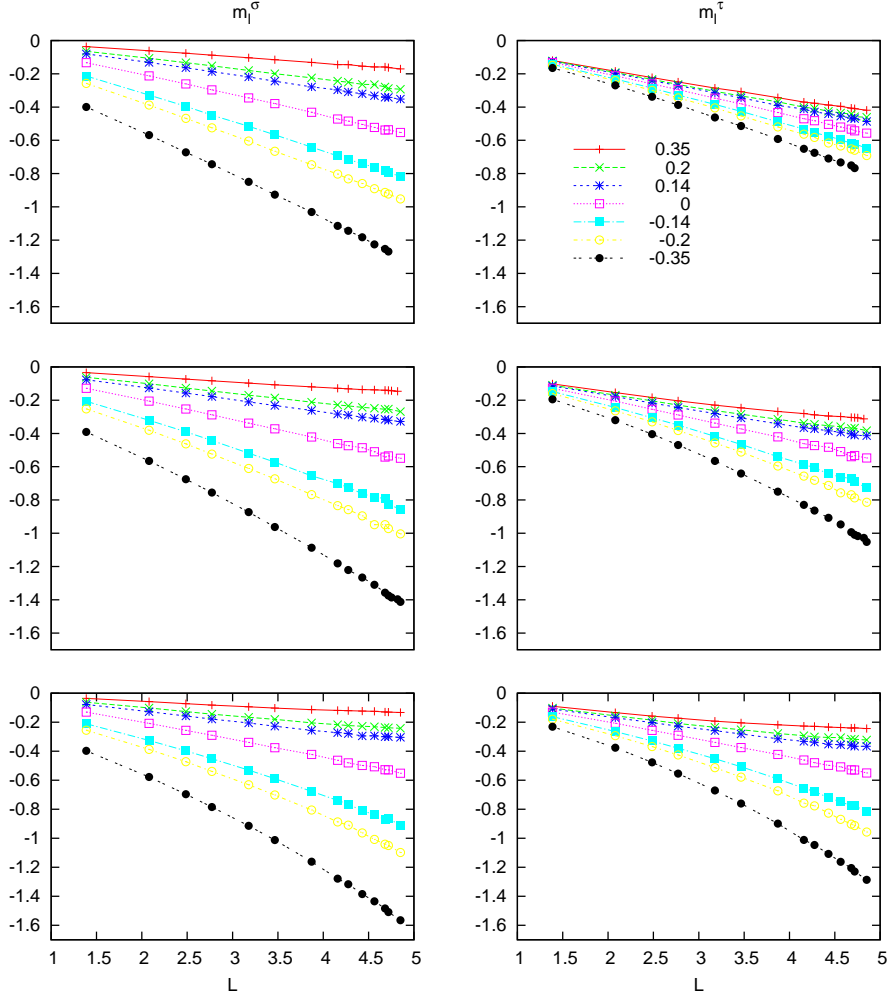


Figura 12: Gráfico del logaritmo de la magnetización sobre el defecto m_l^α en función del logaritmo del tamaño del sistema L . Cada fila corresponde a un valor diferente del acoplamiento entre los spines σ y los τ , $\epsilon = 0.25, 0.5, 0.75$. En la columna de la izquierda se representan los datos 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).

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

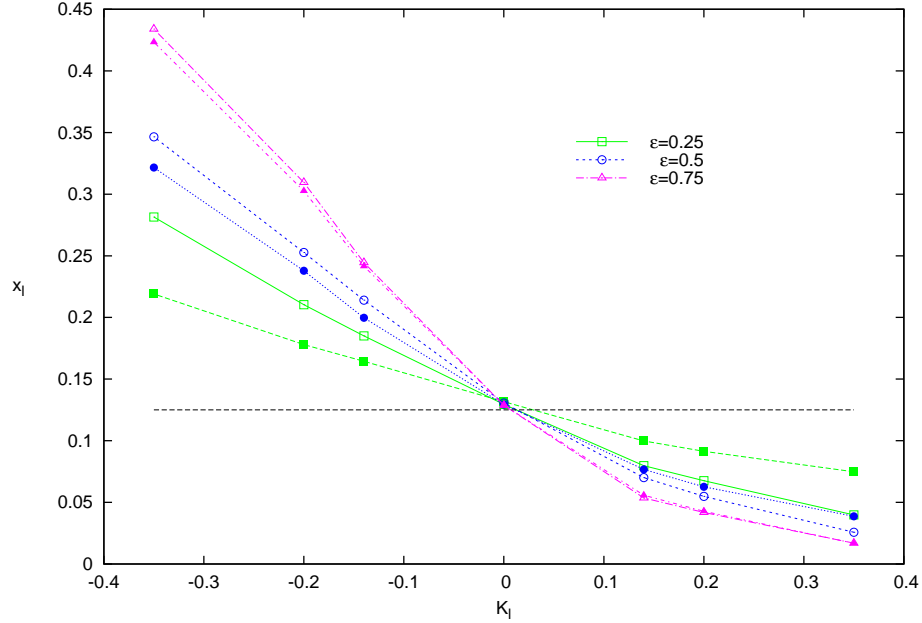


Figura 13: Exponente crítico de la magnetización del defecto, en función de la intensidad J_l . Se muestran los resultados para $\epsilon = 0.25, 0.5, 0.75$.

El hecho de que el valor del exponente se aproxime a cero cuando la intensidad del defecto es positiva, puede ser analizado en términos 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 esta. 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 14, 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 línea 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 defecto es menor que el acoplamiento K y en consecuencia la línea de defec-

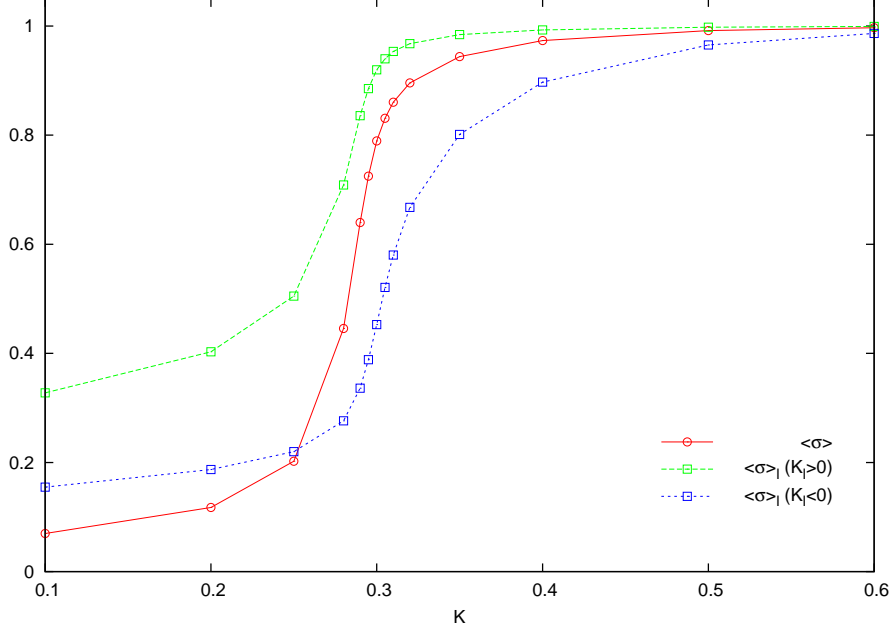


Figura 14: Parámetros de orden $\langle \sigma \rangle$ (magnetización del plano σ) y $\langle \sigma \rangle_l$ (magnetización sobre el defecto) para una transición de fase sobre la línea E-F. Cuando la intensidad del defecto es positiva $K_l = 0.35$, la línea se ordena para valores de K inferiores 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.

tos 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 15) 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 es positiva y menores cuando es negativa.

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La figura 16, muestra los exponentes críticos x_m^σ y x_m^τ como función de la intensidad del defecto.

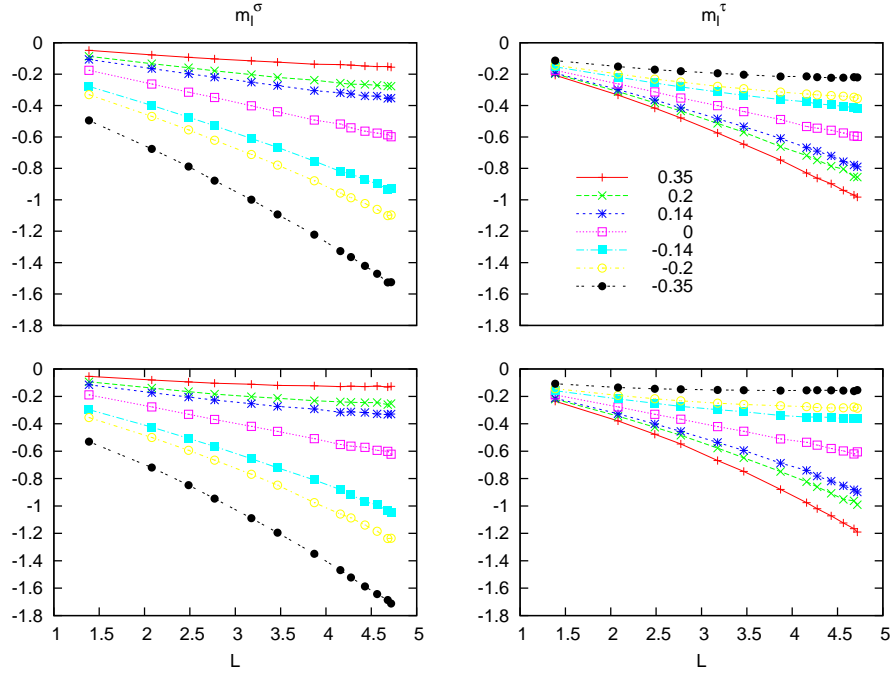


Figura 15: Gráfico en escala logarítmica de la magnetización sobre el defecto m_l^α en función el tamaño del sistema L . Cada fila corresponde a un valor diferente del acoplamiento ($\epsilon = -0.5, -0.75$) entre los spines σ y los τ . En la columna de la izquierda se representan los datos para los spines σ y en la columna derecha para los τ .

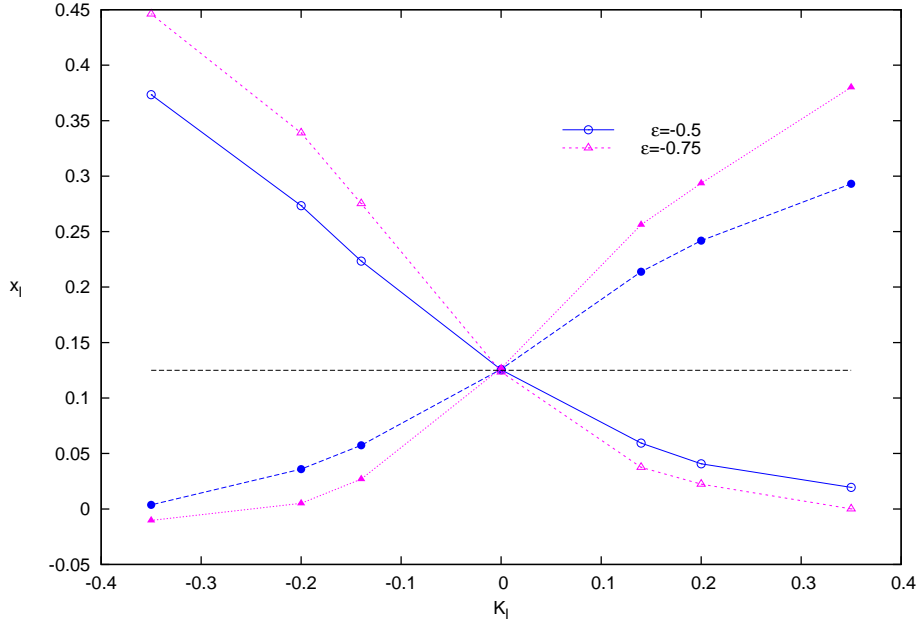


Figura 16: Exponente crítico de la magnetización del defecto, en función de la intensidad K_l para $\epsilon < 0$. Se muestran los resultados para $\epsilon = 0.5, 0.75$.

7. 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] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.

- [12] 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.
- [13] D.P. Landau and K. Binder. *A guide to Monte-Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge University Press, 2009.
- [14] 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.
- [15] 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.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] F.J. Wegner. Duality relation between the ashkin-teller and the eight-vertex model. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 5:L131, 1972.