



Departamento de Física
La Plata, Abril 2021

Fases de baja temperatura del modelo $J_1 - J_2 - J_3$ en la red panal de abejas

Trabajo de Diploma para la Licenciatura en Física

Autor: Nahuel E. Zanini

Directora: Dra. Flavia Gómez Albarracín

Asesor Académico: Dr. Rodolfo Borzi

Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata

Resumen

El objetivo del presente trabajo fue el estudio de las fases de baja temperatura para el modelo $J_1 - J_2 - J_3$ antiferromagnético en la red panal de abejas con variables de espín tipo Ising, para lo cual se utilizaron diferentes técnicas analíticas y numéricas, desarrollando códigos propios. Se implementaron simulaciones computacionales, en particular simulaciones Monte Carlo mediante el Algoritmo de Metropolis, para estudiar variables como la energía y el calor específico en función de la temperatura. Se realizaron cálculos de integración numérica para estudiar la entropía y se calcularon numéricamente los factores de estructura en el espacio recíproco de las fases de baja temperatura.

En el diagrama de fase de baja temperatura se encontraron tres fases ordenadas: una fase de Néel, una que llamamos de Franjas y otra de Pares Alternados. Para cada una de ellas se construyeron parámetros de orden relevantes. Se evidenció un Punto Altamente Frustrado, en $J_1 = 2J_2 = 2J_3$, que en este caso podría presentar alta degeneración. Se estudiaron sus características a través de las simulaciones, y se encontró entropía residual a baja temperatura. De la misma manera, se estudiaron puntos en las líneas degeneradas, con el objetivo de obtener mayor información sobre el comportamiento del sistema con temperatura en estas zonas.

Finalmente, se calculó e interpretó el factor de estructura para varios puntos del diagrama de fase, encontrando consistencia con lo hallado en el estudio de las variables termodinámicas, y brindando una herramienta adicional para distinguir y caracterizar las diferentes fases. En particular, el factor de estructura para el punto altamente frustrado sugeriría que a baja temperatura efectivamente el sistema no se encuentra ordenado, formando un posible "líquido de espín".

Keywords –

Índice

1. Introducción	1
1.1. Conceptos básicos de Mecánica Estadística	2
1.2. Sistemas de espines interactuantes	4
1.2.1. Modelo de Ising	4
1.2.2. Frustración magnética	6
2. Red de Panal de Abejas	11
2.1. Red de Bravais	11
2.2. Red recíproca y zona de Brillouin	11
2.3. Red panal de abejas	13
2.4. Interacciones en la red de panal de abejas hasta terceros vecinos	15
3. Métodos	18
3.1. Simulaciones y Método de Monte Carlo	18
3.1.1. Estimador	18
3.1.2. Muestreo de importancia	19
3.1.2.1. Cadena de Markov	19
3.1.2.2. Ergodicidad	20
3.1.2.3. Balance detallado	20
3.1.3. Algoritmo de Metropolis	21
3.2. Entropía residual	23
3.3. Factor de estructura	25
4. Resultados y análisis	29
4.1. Fases ordenadas	29
4.1.1. Fase de Néel	31
4.1.2. Fase Franjas	35
4.1.3. Fase de Pares Alternados	39
4.2. Punto Altamente Frustrado	41
4.3. Líneas degeneradas	43
4.3.1. Línea degenerada vertical	44
4.3.2. Línea degenerada horizontal	45
4.3.3. Línea degenerada diagonal	47
4.4. Factor de estructura	49
5. Conclusiones	56

1. Introducción

En los sistemas magnéticos frustrados sucede que los momentos magnéticos localizados (espines) interactúan a través de interacciones de intercambio que compiten entre sí de tal manera que esas interacciones no logran satisfacerse simultáneamente, lo cual puede dar lugar a una gran degeneración del nivel fundamental. De esta manera, los sistemas frustrados pueden llevar a formas de desorden muy particulares, presentando así fases exóticas. Además bajo ciertas condiciones, esto puede conducir a la formación de estados de materia similares a fluidos, los llamados líquidos de espín, en los que los espines constituyentes están altamente correlacionados pero fluctúan fuertemente aún a temperaturas cercanas al cero absoluto [1]. Las fluctuaciones de los espines en un líquido de espín pueden ser clásicas o cuánticas y mostrar fenómenos colectivos notables, como campos emergentes y excitaciones de partículas fraccionadas. Este comportamiento exótico se está estudiando experimentalmente en la actualidad, proporcionando información sobre las propiedades de estos líquidos, como así también ampliando la descripción teórica de estos materiales [1]. Varios de los conceptos presentados en este párrafo se desarrollarán a lo largo del trabajo.

El objetivo de este trabajo es estudiar las fases de baja temperatura para el modelo $J_1 - J_2 - J_3$ antiferromagnético en la red de panal de abejas para espines tipo Ising mediante el Algoritmo de Metropolis a través de Simulaciones Monte Carlo. Esto lleva a estudiar el comportamiento de ciertas magnitudes físicas como la energía del sistema, el calor específico y la entropía en función de la temperatura. También se diseñarán parámetros de orden relevantes para caracterizar las diferentes fases. Se prestará particular atención al orden del sistema a bajas temperaturas en el punto altamente frustrado y las líneas degeneradas para analizar la posible existencia de entropía residual. Luego, se calcularán los factores de estructura en puntos característicos del diagrama de fases obtenido.

A continuación se presentarán algunos conceptos necesarios para el desarrollo del presente trabajo. En primer lugar se hará hincapié en relaciones básicas de Mecánica Estadística que permitirán obtener cantidades termodinámicas de interés. Luego se introducirá el Modelo de Ising junto con el Hamiltoniano, que describe las interacciones entre espines

vecinos más próximos. Por último, se discutirá el concepto de frustración geométrica, que será de gran relevancia en estudios posteriores.

1.1. Conceptos básicos de Mecánica Estadística

La Mecánica Estadística tiene como objetivo entender el comportamiento macroscópico de sistemas termodinámicos compuestos por un número arbitrariamente grande de partículas a través de un estudio probabilístico de sus componentes microscópicas [2]. Se presentarán a continuación algunos conceptos y funciones de interés para el desarrollo del presente trabajo.

Consideremos un sistema descrito en el ensamble canónico, es decir, un sistema en equilibrio térmico con un reservorio a temperatura T . La probabilidad de hallarlo en el estado μ con energía E_μ está dada por la distribución de Boltzmann

$$p_\mu = \frac{1}{Q_N} e^{-\beta E_\mu} \quad (1.1)$$

donde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ con k_B la constante de Boltzmann, y Q_N es la función de partición definida en el marco del ensamble canónico, y cumple el rol de constante de normalización para que efectivamente p_μ sea una probabilidad. Esta función se define como

$$Q_N = \sum_{\mu} e^{-\beta E_\mu} \quad (1.2)$$

El valor de expectación $\langle A \rangle$ de cierto observable A en el ensamble canónico se define como

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Q_N} \sum_{\mu} A_\mu e^{-\beta E_\mu} \quad (1.3)$$

donde A_μ es el valor que toma A en el microestado μ . Por ejemplo, el valor de expectación de la energía está dado por

$$\langle E \rangle = E = \frac{1}{Q_N} \sum_{\mu} E_\mu e^{-\beta E_\mu} \quad (1.4)$$

donde E es la energía interna del sistema, la cual puede escribirse como

$$E = -\frac{1}{Q_N} \frac{\partial Q_N}{\partial \beta} = -\frac{\partial \log Q_N}{\partial \beta} \quad (1.5)$$

Una cantidad de interés es el calor específico, que se relaciona con la función de partición mediante,

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N} = -k_B \beta^2 \frac{\partial E}{\partial \beta} = k_B \beta^2 \frac{\partial^2 \log Q_N}{\partial \beta^2} \quad (1.6)$$

donde los subíndices V y N denotan que la derivada parcial respecto a la temperatura se realiza a volumen y número de partículas constante.

Es posible obtener una expresión para el valor medio de las funciones respuesta en el ensamble canónico a partir del teorema de fluctuación-disipación. Por ejemplo, podemos obtener una expresión para el calor específico

$$C_V = k_B \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (1.7)$$

La ec. (1.7) es de suma importancia debido a que permitirá obtener el calor específico en función de la temperatura a partir de las simulaciones de Monte Carlo del sistema. Otra variable termodinámica de interés es la entropía del sistema S , la cual por definición se relaciona con el número de microestados accesibles del sistema Γ según la relación:

$$S \equiv k_B \ln(\Gamma) \quad (1.8)$$

A partir del calor específico C_v es posible obtener la entropía del sistema S según

$$S = \int \frac{C_v(T)}{T} dT + S_T \quad (1.9)$$

donde T es la temperatura y es la variable respecto a la cual se integra, y S_T es la constante de integración, la cual debe ser referida a algún valor conocido. Esto último se discutirá con más detalle en la sección 4.1.

1.2. Sistemas de espines interactuantes

En esta sección se presenta el modelo de Ising, el cual nos provee de un Hamiltoniano que describe interacciones magnéticas de un sistema de espines. Este modelo tiene enorme interés por diversas razones. Por un lado resulta interesante su papel en el desarrollo histórico de la comprensión del ferromagnetismo y de las transiciones de fase, en cuyo proceso representó un papel fundamental. En segundo lugar, el método de solución en una dimensión presentado por Ising y luego extendido a dos dimensiones por Onsager [3], constituye la base de diversos métodos modernos de cálculo en la física estadística de los fenómenos críticos. Finalmente, hoy se sabe que el modelo de Ising y generalizaciones del mismo sirven para explicar una variedad de fenómenos, no solo físicos (como veremos mas adelante), sino también de otras disciplinas.

En esta sección también se introduce la noción de frustración magnética, en particular la frustración geométrica. Este tipo de frustración es estudiada desde hace varias décadas. Aún después de tantos años de investigación, muchas de las propiedades de los sistemas frustrados no logran ser entendidas en su totalidad. Así, la curiosidad y necesidad de lograr entender dichos sistemas llevaron a profundizar la teoría y realizar simulaciones computacionales como así también perfeccionar técnicas experimentales debido a la existencia de sistemas magnéticos reales con estas características [4], los cuales aún hoy esperan ser comprendidos en profundidad. Ejemplos bien conocidos incluyen a la red triangular considerando el modelo de Ising con interacciones antiferromagnéticas estudiada en 1950 por G. H. Wannier [5].

1.2.1. Modelo de Ising

El modelo de Ising [6] es un modelo magnético para sólidos en el cual los espines (momentos dipolares magnéticos) pueden orientarse sólo en una dirección. Estos espines pueden interactuar con sus vecinos más próximos, llamados primeros vecinos. Sea un arreglo de N sitios que forman una red de dimensión $n \in \mathbb{N}$, a los cuales se le asocia una variable de espín (variable tipo Ising) σ_i ($i = 1, \dots, N$) que puede tomar los valores $+1$ (espín up) y -1 (espín down), correspondientes a los dos sentidos mencionados anteriormente. El Hamiltoniano que describe la configuración del sistema de un conjunto σ_i con interacciones

a primeros vecinos

$$\mathcal{H} = J \sum_{nn} \sigma_i \sigma_j \quad (1.10)$$

donde J es la constante de intercambio y posee unidades de energía. La suma es sólo sobre los primeros vecinos del sitio, denotado mediante nn . El modelo presentado es clásico debido a que las variables de espín σ_i lo son.

En una dimensión, el modelo de Ising tiene solución exacta. Si se consideran interacciones ferromagnéticas se encuentra que el estado fundamental, en ausencia de campo, es una cadena con todos los espines alineados. Si, en cambio, se consideran interacciones antiferromagnéticas, el estado fundamental del sistema es tal que los espines se ubican de forma antiparalela. Si ahora se considera el modelo de Ising en dos dimensiones en la red cuadrada, se encuentra que también tiene solución. Al considerar interacciones ferromagnéticas se observa que el mínimo de energía se halla cuando todos los espines se alinean. Ahora bien, al considerar interacciones antiferromagnéticas para el modelo de Ising con campo nulo, se espera que para minimizar la energía todo par de espines a primeros vecinos sean antiparalelos. Esto no siempre es posible, depende de la geometría de la red. Las redes en las cuales esto sucede son las llamadas bipartitas, sobre las que se profundizará más adelante; por el momento, se dirá que son redes tales que pueden dividirse en dos subredes. En estas redes el estado fundamental del Hamiltoniano de Ising corresponde a cada una de las subredes en configuraciones ferromagnéticas con magnetización opuesta. Estas configuraciones se conocen como estados de Néel. Finalmente, en redes que no son bipartitas no existe orden antiferromagnético. Como ejemplo típico se toma la red triangular. Es imposible hacer que todos los pares de primeros vecinos estén antialineados. Sistemas con estas características se dicen frustrados. En algunos casos, como en el ejemplo de la red triangular, pueden contar con una degeneración considerable del estado fundamental (infinita, en el límite termodinámico), sin ningún tipo de orden magnético espacial. Luego se retomará esta cuestión con más detalle.

Aún en ausencia de campo magnético aplicado, ciertos materiales adquieren un orden magnético como consecuencia de la interacción entre los espines individuales. El momento magnético neto del sistema será distinto de cero en el caso ferromagnético e igual a cero

en el caso antiferromagnético favoreciendo el orden antiparalelo. Sin embargo, para que esto suceda la temperatura T del sistema debe ser menor a la temperatura crítica o de transición T_c . Por encima de la misma, en ambos casos, los espines individuales estarán desordenados dando lugar a una magnetización media nula.

En el caso de un ferromagneto, una única dirección es elegida por los espines para ordenarse por debajo de la temperatura crítica T_c . Este fenómeno de orden se conoce como ruptura espontánea de la simetría [7] y su consecuencia más importante es que produce una transición de fase en T_c . Este mismo fenómeno ocurre al considerar sistemas antiferromagnéticos, como se verá a lo largo del trabajo. Es posible definir un parámetro de orden, cuyo promedio térmico sea nulo para $T > T_c$ y distinto de cero para $T < T_c$. Esta cantidad actúa como indicador del orden del sistema y depende exclusivamente de la transición. En el caso del ferromagnetismo, el parámetro de orden es simplemente la magnetización m dada por

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (1.11)$$

1.2.2. Frustración magnética

En sistemas de muchos cuerpos no siempre es posible minimizar la energía de todas las interacciones entre espines. Cuando esto sucede, se habla de *frustración* o se dice que el sistema se encuentra frustrado. Este fenómeno es común en el contexto del magnetismo, manifestándose por ejemplo en las interacciones entre momentos dipolares magnéticos en una red cristalina [8], como se verá a continuación.

Hay varias maneras de introducir frustración en un sistema magnético. Una de ellas es la llamada frustración geométrica, donde la frustración proviene de la geometría de la red en la que se encuentran los espines; las interacciones no pueden ser minimizadas en su totalidad, lo cual deriva a un conjunto de estados fundamentales que pueden estar degenerados [4]. Un ejemplo típico de frustración geométrica es el observado en el modelo de Ising antiferromagnético en la red triangular [9]. Al trabajar con espines de Ising, solo es posible ubicar en los vértices del triángulo espines up o down, de tal manera que, al ubicar dos espines de forma antiparalela, no será posible ubicar un tercer espín tal que se

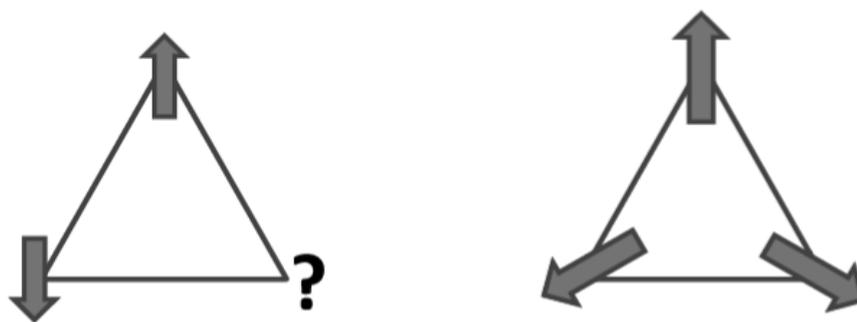


Figura 1.1: Esquema de un triángulo con interacciones antiferromagnética. Izquierda: La interacción antiferromagnética se encuentra frustrada. No es posible ubicar a todos los espines de forma antiparalela con sus primeros vecinos (espines de Ising). Derecha: Estado fundamental para un triángulo considerando espines clásicos (vectores en el plano) rotados de tal manera de minimizar la energía. En este caso no se observa frustración.

minimice la energía del sistema; o lo que es lo mismo, no es posible ubicar al tercer espín de forma antiparalela a los otros dos simultáneamente. Ahora bien, la única manera de minimizar la energía sería rotar los espines, pero en ese caso ya no se estarían considerando espines de Ising. En la Fig. 1.1 se muestran ambos casos mencionados: red triangular frustrada (izquierda) y su estado fundamental considerando vectores en el plano (derecha).

Consideremos nuevamente el modelo de Ising en una red cuadrada con interacciones antiferromagnéticas ($J_1 > 0$) a primeros vecinos. El Hamiltoniano del sistema estará dado por la ecuación (1.10). La red cuadrada es bipartita debido a que puede separarse en dos subredes interpenetradas [10], de manera que cada sitio de cada subred tenga como primeros vecinos sitios de la otra subred. El estado fundamental del sistema será tal que en cada subred todos los espines tienen la misma dirección y sentido, pero sentido opuesto entre una subred y la otra (Fig. 1.2). A esta configuración se la conoce como estado de Néel [11], como ya se lo adelantó en la sección anterior.

En el ejemplo anterior, no se observa frustración considerando interacciones a primeros vecinos (interacción antiferromagnética $J_1 > 0$), pero sí se observará al agregar interacciones a segundos vecinos antiferromagnéticas, $J_2 > 0$. La ec. (1.12) define al Hamiltoniano en cuestión, donde \sum_{nnn} denota suma sobre segundo vecinos. Si se visualiza el triángulo rectángulo formado por tres espines (Fig. 1.3), una vez que dos espines se ubican de forma antiparalela uno respecto del otro, el tercer espín no podrá ser antiparalelo a ambos simultáneamente. Así, el estado fundamental del sistema presentará otro orden

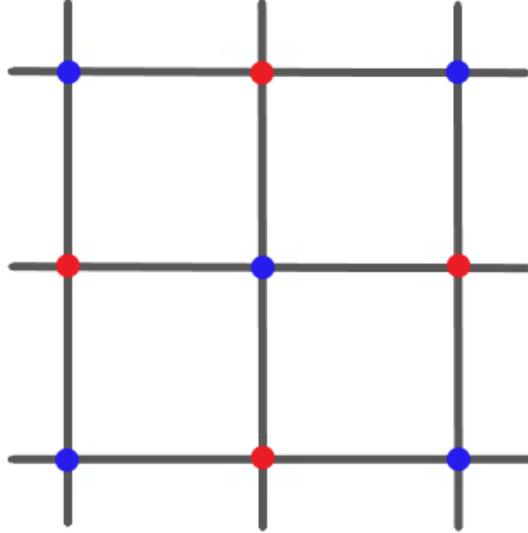


Figura 1.2: Estado de Néel para la red cuadrada. Los puntos rojos representan los espines +1 (up) mientras que los azules representan los espines -1 (down). Cada espín se encuentra antialineado respecto a sus primeros vecinos.

que dependerá de la relación entre las interacciones J_1 y J_2 . Para $2J_2 > J_1$, los pares de segundos vecinos se alinean antiferromagnéticamente a expensas de la frustración de la interacción a primeros vecinos, J_1 (Fig. 1.4a) [12][13]. Mientras que para $J_1 > 2J_2$ se observa que espines vecinos son antiparalelos forzando un alineamiento ferromagnético entre segundos vecinos (Fig. 1.4b), dando como resultado la frustración de la interacción J_2 . Es pertinente aclarar que la posibilidad de frustración en un sistema solo puede ocurrir si al menos una de las interacciones es antiferromagnética. Este tipo de frustración es consecuencia de la competitividad entre las interacciones del sistema, y es lo que sucede también en la red panal de abejas para el modelo $J_1 - J_2$ antiferromagnético, por lo que este tipo de frustración es de suma importancia para el objeto de este trabajo. En el último tiempo, este modelo $J_1 - J_2$ en la red de panal de abejas, ha sido estudiado desde diferentes perspectivas, tanto cuántica como clásicamente, hallando que para $\frac{J_2}{J_1} > \frac{1}{4}$ hay una transición de fase a bajas temperaturas en el caso clásico [14][15]. Se retomará este análisis más adelante cuando se defina y estudie en profundidad la red panal de abejas. Para J_1 y J_2 ambos positivos (interacción ferromagnética) la configuración de menor energía es aquella en la cual todos los espines son paralelos.

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{nn} \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{nnn} \sigma_i \sigma_j \quad (1.12)$$

$$\mathcal{H} = J \sum_{\gamma} \sigma_{\gamma}^2 \quad (1.13)$$

donde $\sigma_{\gamma} = \sum_{l \in \gamma} \sigma_l$ es el espín total de la plaqueta γ definida por ciertos sitios que dependerá de la geometría de la red, y J es una constante de intercambio efectiva. A partir de esta última expresión se puede observar que el mínimo de energía se dará cuando $\sigma_{\gamma} = 0$, dando lugar a una degeneración considerable del nivel fundamental en el *PAF* dependiendo de la geometría de la red. Ahora bien, la expresión dada por la ec. (1.13) solo será posible obtenerla si se logra definir una plaqueta, lo cual dependerá exclusivamente de la geometría de la red. Ejemplos de este tipo de situaciones se encuentran en la red de Kagomé y la de Pirocloro considerando interacciones antiferromagnéticas a primeros vecinos. Estas redes presentan frustración debido a su geometría [16] [17]. Otro ejemplo de interés para este trabajo es en la red panal de abejas, la cual se introducirá en breve. Si se considera en esta red interacciones antiferromagnéticas hasta segundos vecinos, se evidencia la presencia de un *PAF*, y es posible definir una plaqueta para luego reescribir el Hamiltoniano presentado anteriormente [18]. En este trabajo analizaremos, entre otras cosas, el punto altamente frustrado que surge al tener en cuenta más interacciones.

2. Red de Panal de Abejas

Un sólido cristalino se construye a partir de la repetición en el espacio de una estructura elemental denominada celda unidad. En función de los parámetros de red, es decir, de las longitudes de los lados o ejes de la celda unidad y de los ángulos que forman, se distinguen diferentes sistemas cristalinos.

A continuación se presentarán algunas definiciones y conceptos generales de interés. En particular, se introducirá la red panal de abejas, la cual es el objeto de estudio principal de este trabajo.

2.1. Red de Bravais

Una red de Bravais es un arreglo infinito de puntos discretos con un ordenamiento y orientación, que se ve exactamente igual desde cualquier punto de la red. Así, la posición de dichos puntos en el espacio (en tres dimensiones) viene dada por

$$\vec{r} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad (2.1)$$

donde $n_i \in \mathbb{Z}$ y \vec{a}_i ($i = 1, 2, 3$) son los vectores primitivos de la red, no todos coplanares y permiten generar toda la red en el espacio [10] [19] [20]. Un ejemplo de este tipo de red es la cuadrada, presentada en el capítulo anterior, la cual tiene la particularidad de que la distancia entre todos los puntos es la misma ($|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$) y cuenta con simetría de rotación cada un ángulo recto. Notar que esta red es bidimensional, con lo cual sólo cuenta con dos vectores primitivos: \vec{a}_1 y \vec{a}_2 .

2.2. Red recíproca y zona de Brillouin

Para introducir una descripción no formal de la red recíproca es posible utilizar una analogía: si se considera un espacio vectorial W con una base A y otra base B , es posible describir a un vector arbitrario \vec{v} de W en cualquiera de las bases. Así, podría obtener a

\vec{v} como una combinación lineal de los vectores de la base A , y mediante un cambio de base obtener a \vec{v} como una combinación lineal de los vectores de la base B . Ahora bien, es posible pensar de esta manera a la red de Bravais (RB) y a la red recíproca (RR). Es decir, se puede describir a la RB en otra base y generar la RR . Se puede observar que la RR es una RB .

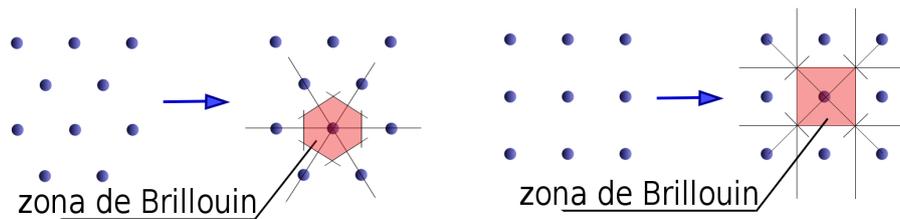
Más formalmente, se puede definir a la RR a partir de un conjunto de vectores de la RB $\{\vec{R}\}$ como el conjunto de vectores de onda $\{\vec{K}\}$ que corresponden a ondas planas ($e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}$) que cuentan con la periodicidad de la RB , esto quiere decir que si se desplaza a la onda plana un vector de la RB no se ve modificada [19] [20]. Esto es, matemáticamente, $e^{i\vec{K}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}$, lo que implica que $e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = 1$, para todo \vec{R} en RB . Para evitar confusiones es relevante aclarar que a la red de Bravais también se la llama *red en el espacio real* o *red directa* y de acá en adelante se usarán indistintamente.

Como se vio anteriormente, la red recíproca es una red de Bravais, por lo que es de interés describirla a partir de sus vectores primitivos. El volumen de una celda primitiva se puede calcular como $V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$, siendo \vec{a}_i ($i = 1, 2, 3$) los vectores primitivos de la red de Bravais introducidos al comienzo del capítulo. Este volumen permanecerá constante aún al pasar a la representación de la RR . Así, es posible definir a los vectores primitivos de la red recíproca \vec{b}_i , con $i = 1, 2, 3$, como

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \end{cases} \quad (2.2)$$

donde se ve que cada \vec{b}_i es ortogonal a dos de los vectores primitivos de la RB .

Por otro lado, se puede definir a la primer zona de Brillouin como la celda primitiva de Wigner-Seitz de la red recíproca (en el espacio \vec{K} o espacio recíproco) [7]. Dicha celda es un tipo de celda primitiva en una red de Bravais trazada por el método de Wigner-Seitz: en primer lugar se dibujan líneas que unan un punto de la red con todos los puntos de la red próximos a este (no sólo primeros vecinos). Luego, en el punto medio de esas líneas y perpendicular a las mismas se trazan nuevas líneas (en el caso bidimensional) o planos (en el caso tridimensional). El volumen más pequeño encerrado por estas últimas líneas o



(a) A la izquierda se muestra la red triangular bidimensional. A la derecha se muestra la construcción de Wigner-Seitz con la primera zona de Brillouin. (b) A la izquierda se muestra la red cuadrada bidimensional. A la derecha se muestra la construcción de Wigner-Seitz con la primera zona de Brillouin.

Figura 2.1: Construcción de Wigner-Seitz para dos tipos de redes bidimensionales. En rojo se resalta la primera zona de Brillouin.

planos constituye la celda primitiva de Wigner-Seitz (Fig. 2.1). Una iteración en el espacio de estas celdas generará toda la red.

2.3. Red panal de abejas

La red de panal de abejas (Fig. 2.2) cuenta con ciertas características como, ser bidimensional, bipartita y tiene la peculiaridad de no ser una red de Bravais, es decir que los puntos de ésta no son todos equivalentes. Si se consideran dos sitios arbitrarios de la red, por ejemplo el sitio A y el sitio B marcados en la figura 2.2, se observa que sus entornos son diferentes: el sitio A tiene un vecino directamente a la derecha (el sitio B) mientras que el sitio B no tiene un sitio a la misma distancia a la derecha. Para definir esta red en todo el espacio es necesario utilizar el concepto de celda unidad definida anteriormente. Así, para la red panal de abejas se eligen los vectores primitivos de la red dados por la ec. (2.3), donde a es el parámetro de red que puede tomarse igual a uno por practicidad [21]. Estos vectores primitivos definen la celda unidad y es posible describir a la red panal de abejas dando la red de Bravais junto con la descripción de los sitios dentro de la celda, ya que si se observa con cuidado, los puntos negros por sí mismos forman una red de Bravais, al igual que los puntos grises (Fig. 2.2) [10] [22]. Esto último se conoce como una red de Bravais con una base, y en el caso de la red panal de abejas se puede definir como una red triangular con una base.

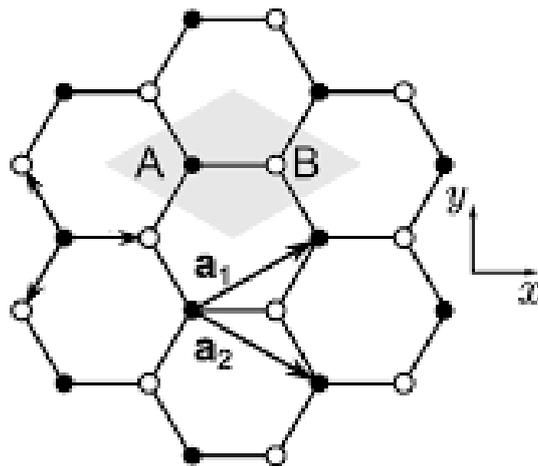


Figura 2.2: Red panel de abejas. Los dos tipos de subred se diferencian con los puntos blancos (A) y negros (B). Las flechas de mayor tamaño representan a los vectores primitivos de la red \vec{a}_1 y \vec{a}_2 , mientras que las de menor tamaño representan a los vectores de estructura interna de la red. El rombo gris denota la celda unidad.

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{3}{2}a\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y} \\ \vec{a}_2 = \frac{3}{2}a\hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y} \end{cases} \quad (2.3)$$

Un ejemplo muy estudiado en la actualidad que cuenta con la estructura de la red panel de abejas es el grafeno, el cual tiene varias y muy diferentes aplicaciones en el área de la tecnología [23][24]. Por otro lado, este tipo de red ha cobrado interés en una familia de materiales que tienen interacciones de intercambio y también de otro tipo, las llamadas interacciones de Kitaev, interacciones anisotrópicas tipo Ising por bond [25] Un ejemplo es el material Na_2IrO_3 que a bajas temperaturas presenta un orden antiferromagnético [26], donde es relevante estudiar este sistema pero considerando deformaciones de la red. A través de una combinación de datos experimentales y numéricos se ha encontrado, entre otras cosas, que el sistema tiende mayormente a una configuración de espines a bajas temperaturas llamado generalmente "zig-zag", con el fin de minimizar su energía [26].

Los vectores primitivos de la red recíproca para la red panel de abejas [21] vienen dados por

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3}\hat{x} + \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\hat{y} \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3}\hat{x} - \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\hat{y} \end{cases} \quad (2.4)$$

Con las definiciones y construcciones dadas hasta el momento es posible describir a la

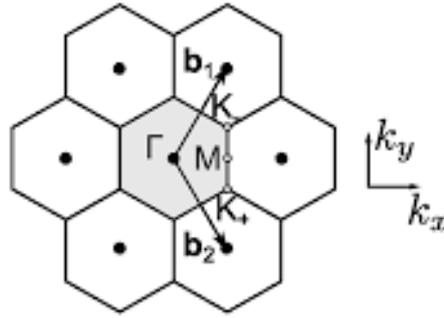


Figura 2.3: El hexágono gris muestra la primera zona de Brillouin de la red panal de abejas y los correspondientes vectores primitivos \vec{b}_1 y \vec{b}_2 de la red recíproca. También se muestran algunos puntos de alta simetría: Γ , K_- , K_+ y M .

red panal de abejas en la red recíproca y construir su primera zona de Brillouin, donde se definen los llamados puntos de alta simetría (Fig. 2.3) [27]. Algunos de estos puntos tienen las siguientes coordenadas:

$$\begin{aligned} \Gamma &= (0, 0) \\ K_- &= \left(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\right) & K_+ &= \left(\frac{2\pi}{3}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\right) & K_{--} &= \left(0, \frac{4\pi}{3\sqrt{3}}\right) & K_{++} &= \left(0, -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}}\right) \\ M &= \left(\frac{2\pi}{3}, 0\right) & M_- &= \left(\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{\sqrt{3}}\right) & M_+ &= \left(-\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{\sqrt{3}}\right) \end{aligned} \quad (2.5)$$

2.4. Interacciones en la red de panal de abejas hasta terceros vecinos

En este trabajo consideramos el modelo de Ising con interacciones de intercambio hasta terceros vecinos en la red de panal de abejas, $J_1 - J_2 - J_3$ (Fig. 2.4) descrito por el siguiente Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{nn} \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{nnn} \sigma_i \sigma_j + J_3 \sum_{nnnn} \sigma_i \sigma_j \quad (2.6)$$

donde el nuevo término (respecto a la ec. (1.12)) denota la interacción con terceros vecinos, así $nnnn$ denota que la suma se hace sobre esa nueva interacción.

El estudio de esta red (en particular el modelo $J_1 - J_2 - J_3$ antiferromagnético) ha sido fuente de estudio a lo largo de los últimos años debido a que diferentes compuestos cuentan

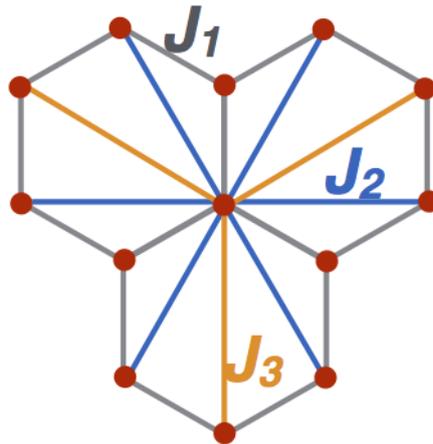


Figura 2.4: Interacciones J_1 (gris), J_2 (azul) y J_3 (naranja) para la red panal de abejas. Los puntos rojos representan los sitios ocupados por los espines.

con la estructura de la red panal de abejas. Las interacciones a terceros vecinos han tomado relevancia, por un lado en relación a la familia del material $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$, [28] y a los materiales como $\alpha\text{-RuCl}_3$ y Na_2IrO_3 , donde además de las interacciones de Kitaev, se ha postulado la necesidad de incluir interacciones de intercambio de mayor alcance [25, 29].

Para el caso de acoplamientos $J_1 - J_2 - J_3$ antiferromagnéticos, este modelo tiene la particularidad de tener un punto altamente frustrado, $2J_1 = J_2 = J_3$, que ha sido estudiado tanto para espines clásicos [30, 31] como cuánticos [22, 32, 33]. Para el caso de espines clásicos, considerados vectores unitarios de tres componentes (llamados espines de Heisenberg) se observó en ese punto un comportamiento tipo "líquido de espín clásico", donde el estado fundamental está degenerado y a bajas temperaturas no se selecciona ningún estado ni grupo de estados. En cambio, en el caso de espines clásicos tomados como vectores unitarios de dos componentes (llamados "XY"), se observa a baja temperatura la selección de un grupo de estados, con un orden nemático [30], y donde la inclusión de campo magnético lleva a la selección de diferentes estados a baja temperatura [31]. Para el caso de espines cuánticos, se observó que alrededor del punto altamente frustrado podría haber una zona tipo líquido de espín cuántico [32, 33].

En la Fig. 2.5 se muestra el diagrama de fases clásico a $T = 0$ para el modelo $J_1 - J_2 - J_3$ antiferromagnético para espines de Heisenberg, presentado en la Ref.[32]. Se distinguen tres fases ordenadas: una fase de Néel (I), una fase de cadenas antiparalelas (II) y una fase tipo espiral (III). Las fases están separadas por tres líneas degeneradas, y en negro se

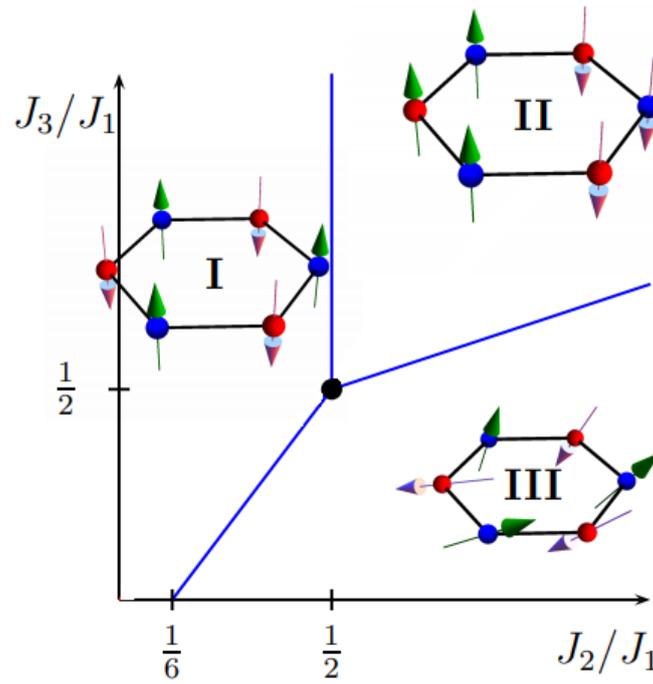


Figura 2.5: Diagrama de fase para el modelo $J_1 - J_2 - J_3$ antiferromagnético en la red de panal de abejas a $T = 0$ para espines clásicos de Heisenberg. Se distinguen una fase de Néel (I), una fase de cadenas antiparalelas (II) y una fase tipo espiral (III). El círculo negro indica el punto altamente frustrado $J_1 = 2J_2 = 2J_3$ [32]

indica el punto altamente frustrado.

En este trabajo nos centraremos en el estudio de este modelo para espines tipo Ising, y nos enfocaremos también en el punto altamente frustrado, como se verá en los capítulos siguientes.

3. Métodos

3.1. Simulaciones y Método de Monte Carlo

Si se considera un sistema físico con un número arbitrariamente grande de partículas interactuantes donde se observan transiciones de fase, y éste está descrito por un Hamiltoniano conocido, es posible obtener la información del sistema mediante simulaciones computacionales. El objetivo principal de dichas simulaciones es lograr explorar las propiedades y magnitudes físicas del sistema a partir del control de ciertos parámetros.

3.1.1. Estimador

En muchos casos es de interés calcular el valor de expectación $\langle A \rangle$ de cierto observable A (ec. (1.3)) [2]. En general, esto se calcula a partir de considerar todos los estados del sistema pesados con su correspondiente probabilidad de Boltzmann, en el caso de considerar sistemas clásicos (ec. (1.1)). Ahora bien, al considerar sistemas de tamaño apreciable es conveniente promediar sobre un subconjunto de todos los estados posibles. El método de Monte Carlo [6] permite elegir a este subconjunto de manera aleatoria a partir de una distribución de probabilidad p_μ previamente especificada. Dado un subconjunto de R estados $[\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_R]$, se define al estimador A_R de A como

$$A_R = \frac{\sum_{i=1}^R A_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^R p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}} \quad (3.1)$$

Una propiedad relevante del estimador de un observable es que al aumentar el número de estados del subconjunto elegido, éste se vuelve más exacto de tal manera que cuando $R \rightarrow \infty$ se tiene que $A_R \equiv \langle A \rangle$. Es necesario elegir los R estados de tal manera que el estimador difiera lo menos posible del valor de expectación del observable, lo cual equivale a especificar la distribución de probabilidad. No es conveniente pedir que los estados sean equiprobables (lo que llevaría a la ec. (1.3)) debido a que una cantidad pequeña de estados serían los que dominen el cálculo de $\langle A \rangle$, mientras que los estados restantes serían totalmente despreciables.

El método de Monte Carlo permite elegir a los estados que contribuyen mayoritariamente al cálculo del valor de expectación del observable e ignorar los restantes para, de esta manera, obtener un buen estimador con un número relativamente pequeño de estados. La técnica de elegir estados a partir de un número muy grande de posibilidades es llamada muestreo de importancia [34].

3.1.2. Muestreo de importancia

Como se comentó anteriormente, un sistema no pasa por todos los estados con la misma probabilidad, sino que lo hace según la distribución de Boltzmann (ec. (1.1)). Es decir que en lugar de elegir R estados de manera que cada uno sea igual de probable de ser elegido que cualquier otro, estos son elegidos de manera que la probabilidad de un estado particular sea dada por dicha distribución. Así, el estimador toma la forma

$$A_R = \frac{1}{R} \sum_{i=1}^R A_{\mu_i} \quad (3.2)$$

3.1.2.1 Cadena de Markov

Un proceso de Markov permite elegir a los estados de tal manera que cada uno aparezca con su correcta distribución de probabilidad. Estrictamente, un proceso de Markov es un mecanismo mediante el cual, dado un sistema en un estado μ , genera un nuevo estado ν de ese sistema. La probabilidad de generar un estado ν dado μ es llamada probabilidad de transición $P(\mu \rightarrow \nu)$. Se supondrá que esta probabilidad no depende del tiempo y solo depende de los dos estados en consideración. Además, dado un estado inicial μ siempre debe generar uno ν y al tratarse de una probabilidad debe satisfacer

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (3.3)$$

A partir de esta última ecuación se puede observar que hay una probabilidad no nula de que el proceso de Markov permanezca en el estado inicial. Sucesivos procesos de Markov conforman una cadena de Markov de estados. Estos son elegidos de manera que, cuando

se ejecutan en un tiempo lo suficientemente largo, producirá una sucesión de estados que aparecen con una probabilidad dada por la distribución de Boltzmann. Se dice que en ese momento el sistema ha alcanzado el equilibrio. Para lograr esto, se pedirá que los procesos de Markov cumplan las condiciones de ergodicidad y balance detallado.

3.1.2.2 Ergodicidad

La condición de ergodicidad consiste en que debe ser posible para la cadena de Markov alcanzar cualquier estado del sistema desde cualquier otro, luego de transcurrir el tiempo suficiente. Si algún estado fuera inaccesible, sin importar cuanto tiempo pase, tendría probabilidad 0 y no p_ν , como se requiere. Esta condición determina que es posible tomar algunas probabilidades de transición del proceso de Markov igual a cero, pero que debe haber al menos un camino de probabilidad de transición no nula entre dos estados cualesquiera que se elijan.

3.1.2.3 Balance detallado

La condición de balance detallado es la que asegura que la distribución de Boltzmann sea la generada luego de que el sistema alcanza el equilibrio. Es necesario que en promedio el sistema transicione tanto de μ a ν como de ν a μ . Esto queda garantizado por la ecuación de balance detallado

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad (3.4)$$

Como la distribución de equilibrio elegida es la de Boltzmann, se elige p_μ de acuerdo a (1.1). La ecuación de balance detallado implica entonces

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (3.5)$$

Si se escribe a la probabilidad de transición como

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu) \quad (3.6)$$

donde $g(\mu \rightarrow \nu)$ es la probabilidad de selección que da cuenta de la probabilidad de que dado un estado μ , el algoritmo genere un nuevo estado ν , y $A(\mu \rightarrow \nu)$ es la tasa de aceptación y puede tomar valores entre 0 y 1, dando libertad de elegir la probabilidad de selección. Si se considera la siguiente igualdad

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu) A(\nu \rightarrow \mu)} \quad (3.7)$$

se ve que el cociente entre las tasas de aceptación puede tomar valores entre cero e infinito. Esto implica que las probabilidad de selección puedan tomar cualquier valor.

3.1.3. Algoritmo de Metropolis

Supongamos un sistema de N espines tales que pueden apuntar individualmente hacia arriba o hacia abajo, o que valgan $+1$ o -1 . Se tienen 2^N microestados del sistema. Un microestado se determina a partir de especificar hacia dónde apunta cada espín. Suponiendo que cada espín interactúa con los restantes de alguna manera, se puede conocer la energía asociada a cada microestado del sistema. Las energías de un sistema en equilibrio térmico permanecen dentro de un rango acotado, es decir que las fluctuaciones son pequeñas en comparación a la energía total. Esto indica que un mecanismo adecuado para cambiar de estado, es considerar sólo aquellos que difieren del actual en la inversión de un solo espín.

La trayectoria seguida por el algoritmo a través del espacio de fases es como sigue:

1. Se elige uno de los 2^N microestados para comenzar.
2. Se toma un espín de manera aleatoria (utilizando un generador de números aleatorios).
3. Se considera un nuevo microestado obtenido a partir de cambiar el sentido del espín elegido anteriormente. Luego, se calcula el cambio de energía ΔE que ocurre si el sistema tiene permitido saltar al nuevo microestado.
4. Si hay un decrecimiento en la energía, es decir $\Delta E \leq 0$, se mueve al nuevo microestado. Es decir que se acepta el cambio de sentido del espín elegido.

5. Si hay un incremento de la energía, es decir $\Delta E > 0$, se mueve al nuevo microestado con una probabilidad dada por $e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$. De esta manera, en algunas ocasiones, se pasa al nuevo microestado, mientras que en otras el sistema no se modifica.
6. Se repite el proceso a partir del punto 2 hasta que toda la información sea recolectada.

Mediante el ejemplo anterior, que está fuertemente relacionado con el presente trabajo, se deja en evidencia de qué manera se procede con el Algoritmo de Metropolis [35].

Todas las probabilidades de selección $g(\mu \rightarrow \nu)$ para cada uno de los nuevos estados posibles ν , que difieren en un cambio de sentido del espín respecto del estado μ , tienen el mismo valor. Esto quiere decir que se utiliza una distribución de probabilidad uniforme para elegir el nuevo posible estado. La condición de balance detallado (ec. (3.5)) toma la forma

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu) A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (3.8)$$

Resta definir la tasa de aceptación, que en el Algoritmo de Metropolis toma la forma

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{si } E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (3.9)$$

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

Se define como un paso del algoritmo al proceso de realizar la trayectoria desde el punto 2 al 6 expuestos anteriormente. Se entiende por paso Monte Carlo (*PMC*) a la ejecución de N pasos del algoritmo, para un sistema de tamaño N . Se realizan un cierto número de *PMC* para alcanzar el equilibrio a cierta temperatura y luego se realizan un dado número de *PMC* para realizar las "mediciones" de variables que sean de interés.

3.2. Entropía residual

Si el estado fundamental de un sistema no cuenta con degeneración extensiva (es decir, que la degeneración no aumenta con el tamaño del sistema), cuando la temperatura T baje lo suficiente, y en particular cuando $T \rightarrow 0$ entonces $S \rightarrow 0$. Esto está de acuerdo con la Tercera Ley de la Termodinámica. Vale aclarar que para que eso suceda no es necesario que el estado fundamental no esté degenerado. En términos más generales ocurre si el estado fundamental tiene una degeneración finita, de modo que la entropía por partícula tiende a cero en el límite termodinámico. Sin embargo, en algunos casos esto no es así, lo que lleva a pensar en una aparente violación de la Tercera Ley. Este fenómeno donde la entropía no tiende a cero cuando la temperatura tiende a cero (entropía residual) aparece en sistemas donde la degeneración del estado fundamental aumenta con el tamaño del sistema [4]. Un ejemplo de interés para este trabajo es el modelo de Ising antiferromagnético en la red triangular, las cuales presenta frustración debido a su geometría y a la competencia entre interacciones, respectivamente, y como consecuencia cuentan con entropía residual [36][37]. Más modelos de este tipo incluyen por ejemplo la red de panal de abejas bicapa en el punto altamente frustrado [38].

Otro modelo donde se observa este fenómeno es en la red de pirocloro antiferromagnética a primeros vecinos con constante de intercambio J , también para espines tipo Ising. Este modelo está relacionado con los materiales llamados tipo *hielos de espín* en la red de pirocloro, donde los momentos magnéticos pueden considerarse como variables tipo Ising direccionales, apuntando hacia adentro o hacia afuera de los tetraedros que conforman la red.

Estos materiales, como $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ y $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, son aún de gran interés actual. En particular, mediciones experimentales del calor específico mostraban la existencia de entropía residual a bajas temperaturas [39, 40, 41, 42]. En la figura 3.1 se muestra para $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ la medición del calor específico y la entropía calculada a partir de éste, comparados con curvas obtenidas con simulaciones de Monte Carlo para un modelo que combinaba interacciones de intercambio e interacciones dipolares (de largo alcance). Se observa que la entropía a altas temperaturas está por debajo del valor esperado ($\ln 2$), mostrando la existencia de una entropía residual, y por lo tanto de una fase macroscópicamente degenerada a

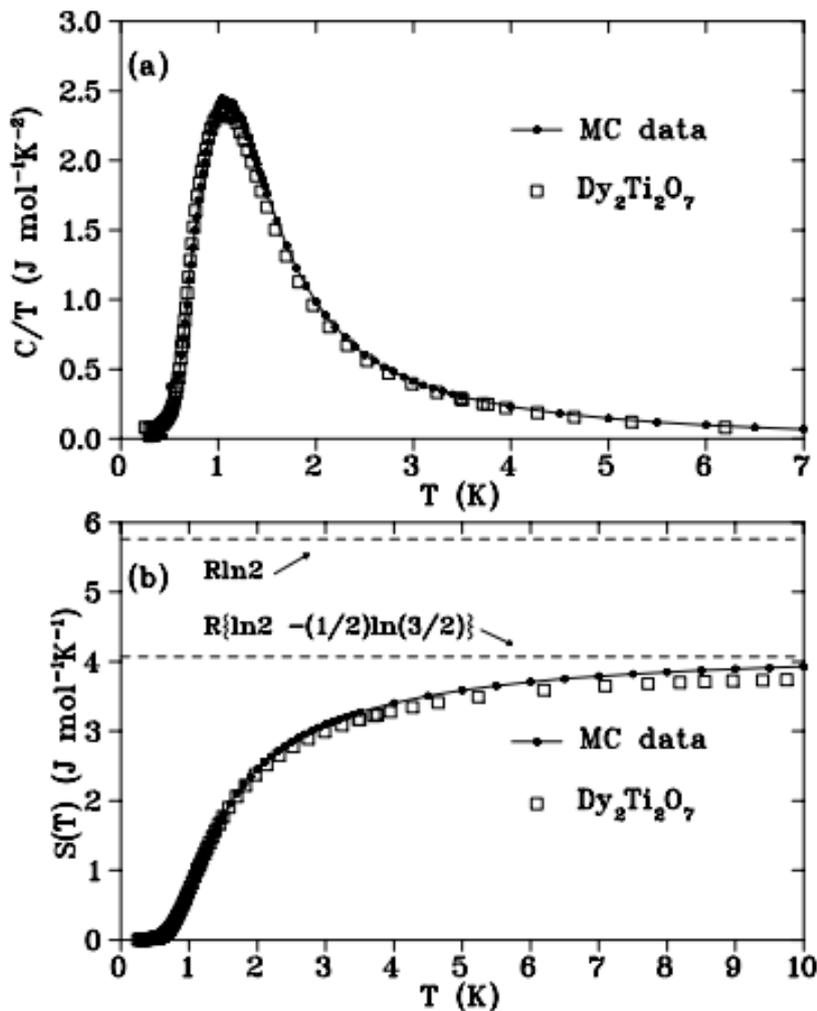


Figura 3.1: Calor específico (arriba) y entropía (S) (abajo) por sitio en función de la temperatura (T) comparando datos experimentales para el $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ y simulaciones de Monte Carlo para un modelo con interacciones de intercambio y dipolares. Se observa que a alta temperatura la temperatura tiende a un número por debajo del esperado, indicando entropía residual [43].

baja temperatura (la fase de "hielo"). A lo largo del tiempo, los experimentos, modelos y simulaciones utilizadas para este tipo de materiales se han ido profundizando, siendo aún hoy en día de gran interés [44, 45].

Es importante volver a remarcar que no hay una inconsistencia entre la entropía residual y la Tercera Ley de la Termodinámica. En sistemas reales, puede suceder que éstos se ordenen a temperaturas más bajas, y sean relevantes nuevas interacciones en el modelo que rompan la degeneración.

En cuanto al cálculo de la entropía, de interés en este trabajo, utilizando la ec. (1.9) es

posible obtener la entropía del sistema a partir del calor específico. Para lograr esto fue necesario desarrollar un nuevo código para integrar numéricamente. Se decidió utilizar la regla del Trapezio [46] perteneciente a las librerías de Python [47]. No se ahondará en especificaciones de la regla, solo se dirá que su objetivo es aproximar el valor de la integral S por el área del trapecio que determinan las rectas construidas a partir de conocer al menos dos puntos de la función a integrar.

3.3. Factor de estructura

En términos generales, en el área de la materia condensada y la cristalografía, el factor de estructura permite obtener una descripción matemática de cómo un material dispersa la radiación incidente. Esto permite interpretar patrones de interferencia, por ejemplo en experimentos de dispersión de neutrones. A continuación se presentará una noción del mismo con el fin de aplicarlo al sistema que compete al presente trabajo.

Es posible describir a la red recíproca como una transformada de Fourier (TF) de la red directa. Si, por ejemplo, se quiere describir a la densidad de puntos de la red (ρ), es conveniente utilizar una delta de Dirac en cada uno de esos puntos. Ahora bien, si se toma la TF (\mathcal{F}) de esta cantidad se obtiene

$$\mathcal{F}[\rho(\vec{r})] = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = \frac{(2\pi)^D}{V} \sum_{\vec{K}} \delta^D(\vec{k} - \vec{K}) \quad (3.10)$$

donde la suma del término del medio se hace sobre todos los puntos de la red directa, mientras que la suma del tercer término se hace sobre todos los puntos de la red recíproca, D denota la dimensión del espacio directo, δ^D es la delta de Dirac D -dimensional, y por último se recuerda que V representa el volumen de la celda unidad. Notar que si \vec{k} es un punto de la red recíproca, entonces $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$ es siempre igual a uno y la suma diverge. En cambio, si \vec{k} no pertenece a la red recíproca, entonces los términos de la suma oscilan y la suma tiende a cero. De esta manera se obtienen los picos de la delta de Dirac en la posición de los vectores de la red recíproca.

En estas condiciones es posible calcular el factor de estructura de una configuración de espines, el cual está dado por la TF de dicha configuración. Si consideramos las dos

subredes de la red panal de abejas, una de ellas tendrá una configuración de espines representada por la función $\vec{S}_1(\vec{R})$, y la otra por $\vec{S}_2(\vec{R})$. La TF de la configuración está dada por

$$\vec{S}_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} \vec{S}_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \quad (3.11)$$

donde, como se hizo referencia anteriormente, \vec{k} es un vector de la zona de Brillouin, en particular para la red panal de abejas. La suma está hecha sobre todos los sitios de la red, N es el número de sitios (espines de la red). Esto deja en evidencia que una función periódica se puede escribir como una suma de ondas planas cuyos vectores de onda viven en la red recíproca. El factor de estructura $S(k)$ ($k = |\vec{k}|$) queda entonces definido como

$$S(k) = \|\vec{S}_{\vec{k}}\|^2 \quad (3.12)$$

A partir de $S(k)$ en la zona de Brillouin se obtendrá información sobre las direcciones en donde la intensidad de la dispersión toma valores no nulos debido a que dicha intensidad es proporcional al factor de estructura [7]. Su relevancia proviene del hecho de que contiene toda la información de las interacciones, la estructura y el orden magnético del sistema; también permite relacionar las propiedades microscópicas y las observaciones experimentales del sistema, como por ejemplo, su patrón de difracción.

La relevancia del factor de estructura se debe fundamentalmente a que se puede medir experimentalmente (fenómeno de dispersión), con lo cual, además de poder obtenerse información experimental del material, también es posible comparar con resultados de modelos teóricos u obtenidos mediante simulaciones computacionales. Como ejemplo de un factor de estructura obtenido con simulaciones, que será relevante para este trabajo, se muestra en la Fig. 3.2 el factor de estructura para el modelo $J_1 - J_2 - J_3$ para la red panal de abejas con $N = 1800$ a temperatura $T = 0,01$ en el punto altamente frustrado; en primer lugar (izquierda) se muestra el caso clásico con espines de Heisenberg donde a simple vista no se observan picos, pero si se observa con más detenimiento se ven unas estructuras en los bordes de los hexágonos, conocidos como "pinch points" los cuales suelen indicar la existencia de un campo de gauge emergente, lo cual es un factor clave en la búsqueda

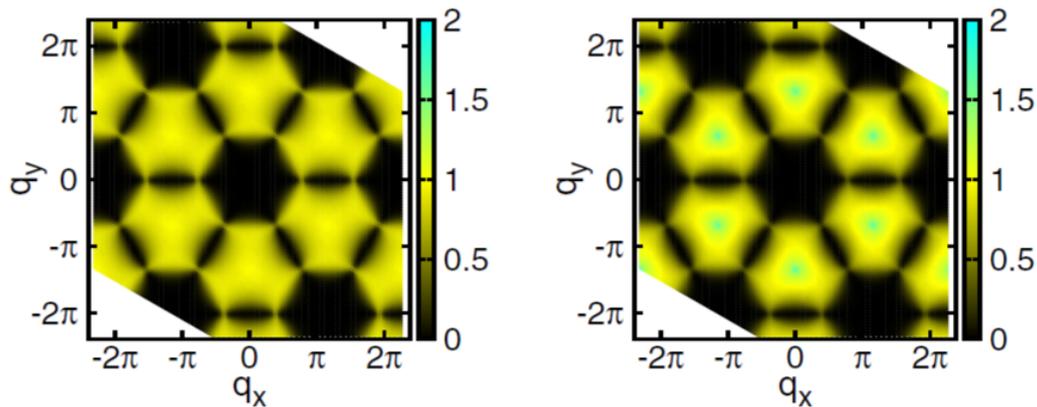


Figura 3.2: Factor de estructura para la red panal de abejas a partir de simulaciones Monte Carlo con $N = 1800$ y $T = 0,01$ para el punto altamente frustrado. Izquierda: espines de Heisenberg. Derecha: espines XY [30].

de líquidos de espín [48]. Por otro lado, se tiene el caso clásico (derecha) con espines XY donde aparecen picos de intensidad (verde/celeste) además de los "pinch points", indicadores de selección de estados a baja temperatura [30]. Este fenómeno de los "pinch points" también se presenta en la red de Pirocloro con interacciones antiferromagnéticas a primeros vecinos con espines clásicos de Heisenberg (Fig. 3.3). Se trata de un punto altamente frustrado de la red debido a que el Hamiltoniano se puede escribir según la ec. (1.13) donde las plaquetas son tetraedros.

A continuación, en la Fig. 3.4, se muestra el factor de estructura experimental para el compuesto $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$, el cual cuenta con la estructura de la red panal de abejas. Para obtenerlo se utilizó difracción de electrones [28]. Se observan los máximos de intensidad en la red recíproca, que como ya se comentó, tiene la estructura de la red triangular.

Para obtener el factor de estructura en el marco de este trabajo fue necesario desarrollar un código tal que al ingresar los datos de interés, es decir, las coordenadas del sitio y el espín correspondiente, se calcule la transformada de Fourier discreta de esa configuración según ec. (3.11) y después se obtenga su módulo cuadrado. De esta forma, se cuenta con una función de \vec{k} , por lo cual es necesario barrer todos los puntos del espacio de momento en un intervalo de interés en el espacio recíproco, por ejemplo entre -4π y 4π . Una vez obtenido el factor de estructura en función de las componentes del vector de onda se graficó la intensidad de la dispersión.

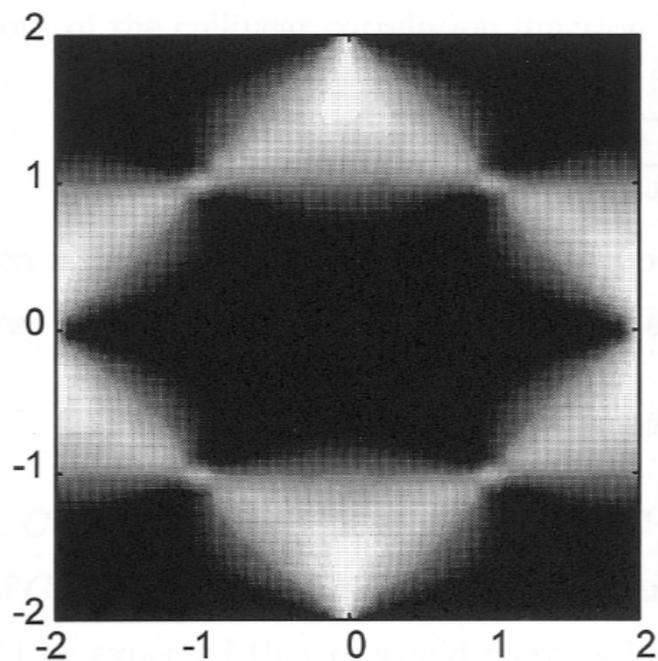


Figura 3.3: Factor de estructura para la red de Pirocloro con espines clásicos de Heisenberg con interacciones AF [16]. Se observan "pinch points" en las uniones de los tetraedros.

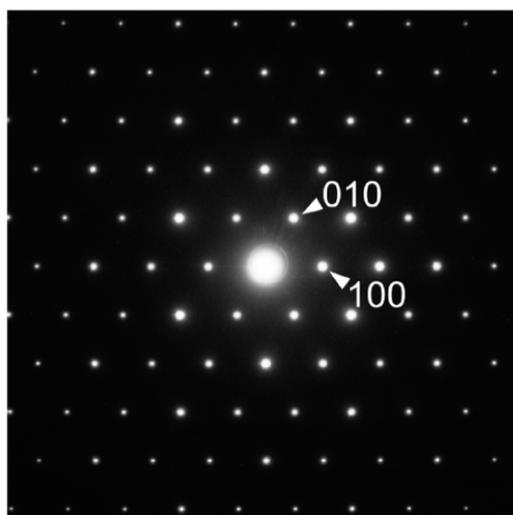


Figura 3.4: Factor de estructura experimental para el compuesto $Bi_3Mn_4O_{12}(NO_3)$ utilizando difracción de electrones [28].

4. Resultados y análisis

Se estudiaron las propiedades termodinámicas del modelo $J_1 - J_2 - J_3$ antiferromagnético (ec. (2.6)) con $J_1 = 1$ y $J_2, J_3 \in (0, 1)$ en la red panal de abejas a través de simulaciones Monte Carlo (MC) mediante el algoritmo de Metropolis (M) con condiciones periódicas de contorno, utilizando variables de espín tipo Ising. Se desarrolló el código teniendo en cuenta lo visto en capítulos anteriores, tanto para la elaboración de la red como para el desarrollo del algoritmo. Se realizó un proceso que consiste en tomar un estado inicial aleatorio para la configuración de espines, y luego, para acceder a bajas temperaturas (en el rango $10^{-2} - 10^{-1}$ en unidades de la constante de Boltzmann que se toma igual a uno), se realizaron las simulaciones de MC - M comenzando a altas temperaturas, es decir desde la fase paramagnética, descendiendo gradualmente la temperatura.

En la simulación se utilizaron redes de $2L \times L$ sitios, siendo L el tamaño lineal de la red, para $L = 12, 16, 20, 24, 30, 60$.

4.1. Fases ordenadas

Para el modelo en la red de panal de abejas de acoplamientos antiferromagnéticos a terceros vecinos se obtuvo el diagrama de fases presentado en la Fig. 4.1, para $T = 0, 1$. Para esto, se exploraron valores de las constantes de intercambio J_2 y J_3 en el intervalo $(0, 1)$ con $J_1 = 1$. Se fijó J_1 , de manera que esta constante es la encargada de regular la escala de temperatura; a partir de este momento se asumirá $J_1 = 1$ a lo largo del trabajo, al igual que se tomará la constante de Boltzmann $k_B = 1$.

Se encontraron tres fases ordenadas, que denominamos: Néel, Franjas y Pares Alternados (también se la llamará simplemente Alternado a lo largo del trabajo). Estas fases están separadas por tres líneas degeneradas, que distinguiremos como una horizontal, una vertical y una diagonal. Se destaca también un punto altamente frustrado, para $J_1 = 2J_2 = 2J_3$. Si se retoma el diagrama de fases para la red panal de abejas con espines de Heisenberg presentado en la subsección 2.3 (Fig. 2.5) se puede comparar con el diagrama de fase de este trabajo (Fig. 4.1) y observar las similitudes y diferencias entre ambos. Es interesante remarcar que para $J_3 = 0$, la línea degenerada diagonal va a $\frac{1}{6}$ para los espines de

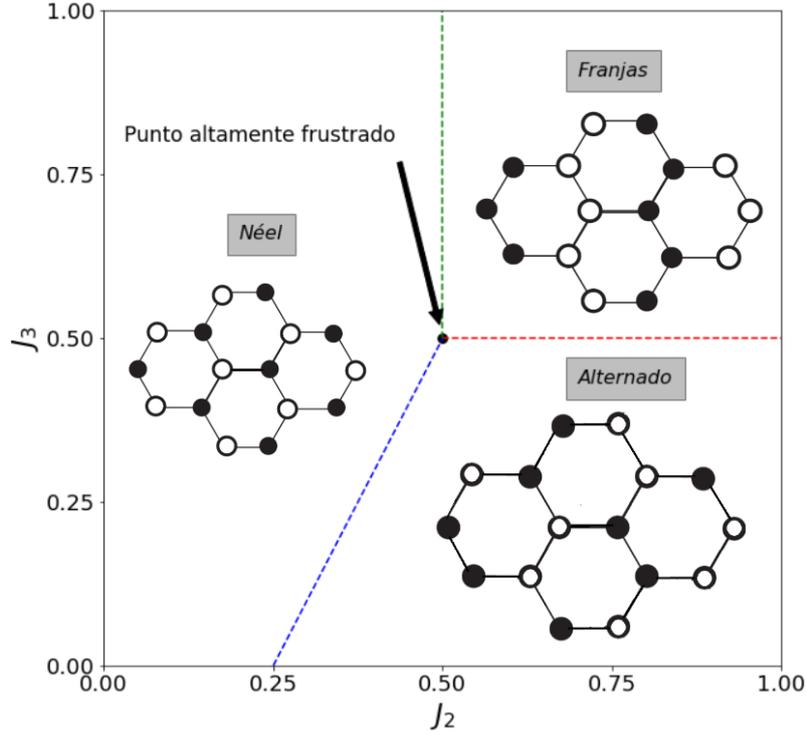


Figura 4.1: Diagrama de fase para la red panal de abejas considerando interacciones hasta terceros vecinos ($J_1 = 1, J_2, J_3 \in (0, 1)$) determinado a través de simulaciones de MC a $T = 0,1$. En estas condiciones se hallan tres fases: Néel, Franjas y Pares Alternados. Se ejemplifican algunos de los órdenes con el respectivo arreglo de espines. Los puntos negros corresponden a espín $+1$ mientras que los blancos a espín -1 . Las líneas punteadas representan las líneas degeneradas y el punto $(0,5; 0,5)$ es el punto altamente frustrado.

Heisenberg mientras que para los espines tipo Ising va a $\frac{1}{4}$. Además, se presenta la fase de Néel y una fase de Franjas análogas en ambos diagramas. La tercer fase observada en la Fig. 2.5 es llamada espiral y no es posible observarla en el marco de este trabajo debido simplemente a que al trabajar con espines tipo Ising no existe manera de formar espirales ya que son espines down o up.

En la Fig. 4.1 se indican tres estructuras características de cada fase ordenada. Estas tres fases tienen energía:

$$\begin{aligned}
 E_N &= -\frac{3}{2}(J_1 - 2J_2 + J_3) \\
 E_F &= \frac{1}{2}(J_1 - 2J_2 - 3J_3) \\
 E_A &= -\frac{1}{2}(J_1 + 2J_2 - J_3)
 \end{aligned}
 \tag{4.1}$$

donde E_i con $i = N, F, A$ corresponde a la energía por sitio para la fase de Néel, Franjas y de Pares Alternados, respectivamente. En las subsecciones siguientes nos centraremos en cada una de estas fases ordenadas. También discutiremos sobre el punto altamente

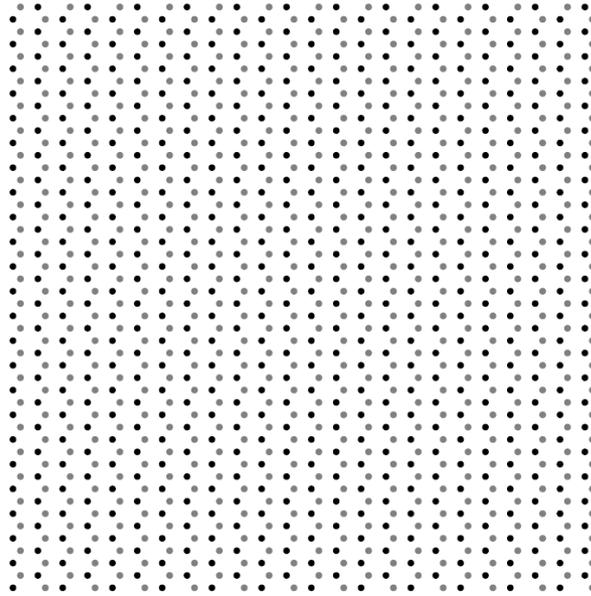


Figura 4.2: Configuración de espines a baja temperatura ($T = 0,1$) para el punto $J_2 = 0,1$ y $J_3 = 0,4$ (fase de Néel) con $L = 24$. Los puntos negros representan espines $+1$ y los grises -1 .

frustrado y las líneas degeneradas.

4.1.1. Fase de Néel

En la fase de Néel hay dos estados posibles, donde se mantiene que los primeros y terceros vecinos tienen espines opuestos, mientras que los segundos vecinos son del mismo tipo de espín. Para pasar de un estado a otro simplemente hay que "dar vuelta" todos los espines. Es decir, hay que realizar un cambio de paridad del espín y se habla de ruptura de simetría. En este caso particular, proviene de la invarianza del Hamiltoniano (ec. (2.6)) ante el cambio de paridad del espín ($\sigma' = -\sigma$). En la Fig. 4.2 se muestra uno de los dos posibles estados, el otro se obtiene simplemente cambiando σ por $-\sigma$.

La Fig. 4.3 muestra la energía media por sitio en función de la temperatura para un punto en la fase de Néel ($J_2 = 0,1$ y $J_3 = 0,4$) donde se evidencia que a bajas temperatura la energía se acerca al valor $E_N = -1,8$ (energía correspondiente al estado de Néel dada por la ec. (4.1)).

Una cantidad importante para definir es el parámetro de orden adecuado. Para cada una de las fases halladas es posible definir diferentes parámetros de orden de tal forma de determinar si el sistema se encuentra ordenado en esa fase específica. Ese cambio entre

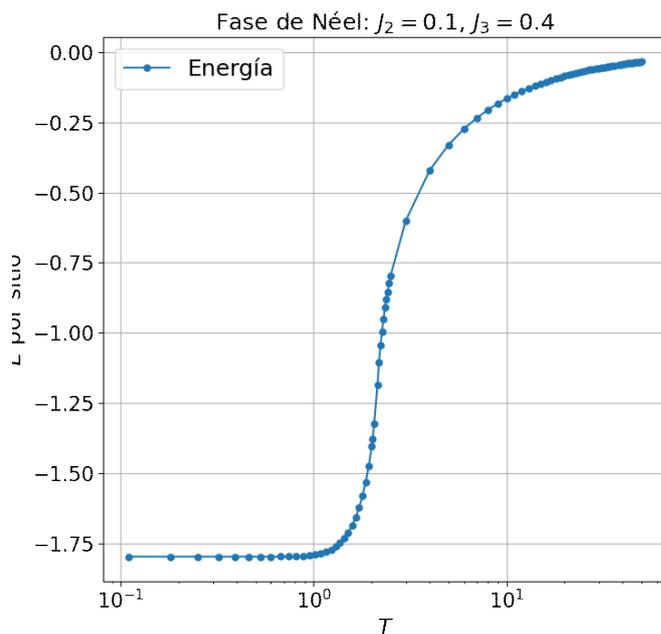


Figura 4.3: Energía media por sitio en función de la temperatura para un punto en la fase de Néel ($J_2 = 0,1$ y $J_3 = 0,4$) para una copia obtenida con simulaciones de MC para $L = 24$.

orden y la fase paramagnética se dará a cierta temperatura crítica T_c , que dependerá, en principio, de las constantes de intercambio. Una forma de diseñar un parámetro de orden es separar a la red en subredes y definir sus magnetizaciones, de tal forma de sumarlas o restarlas según sea conveniente. Para la fase de Néel se pueden definir un parámetro de orden, m_N , a partir de la resta de magnetización por sitio de dos subredes (m_A y m_B), donde una de ellas tiene espines $+1$ y la otra -1 . Para el caso de la red de panal de abejas, estas dos subredes corresponden a cada uno de los dos tipos de sitio de la celda unidad de la red. Luego de normalizar por sitio, se obtendrá que m_N valdrá $+1$ o -1 para temperaturas por debajo de T_c , y será cero para la fase paramagnética (ec. (4.2)). En la Fig. 4.4 se observa el parámetro de orden $m_N = \frac{1}{2}(m_A - m_B)$ por sitio para una copia para la fase de Néel (tomándose como punto característico $J_2 = 0,1$ y $J_3 = 0,4$) para dos ejecuciones independientes de la simulación. En la figura de la izquierda se muestra el parámetro de orden correspondiente a $m_N = 1$ mientras que a la derecha el caso en que toma el valor $m_N = -1$, diferenciando así los dos posibles estados de Néel.

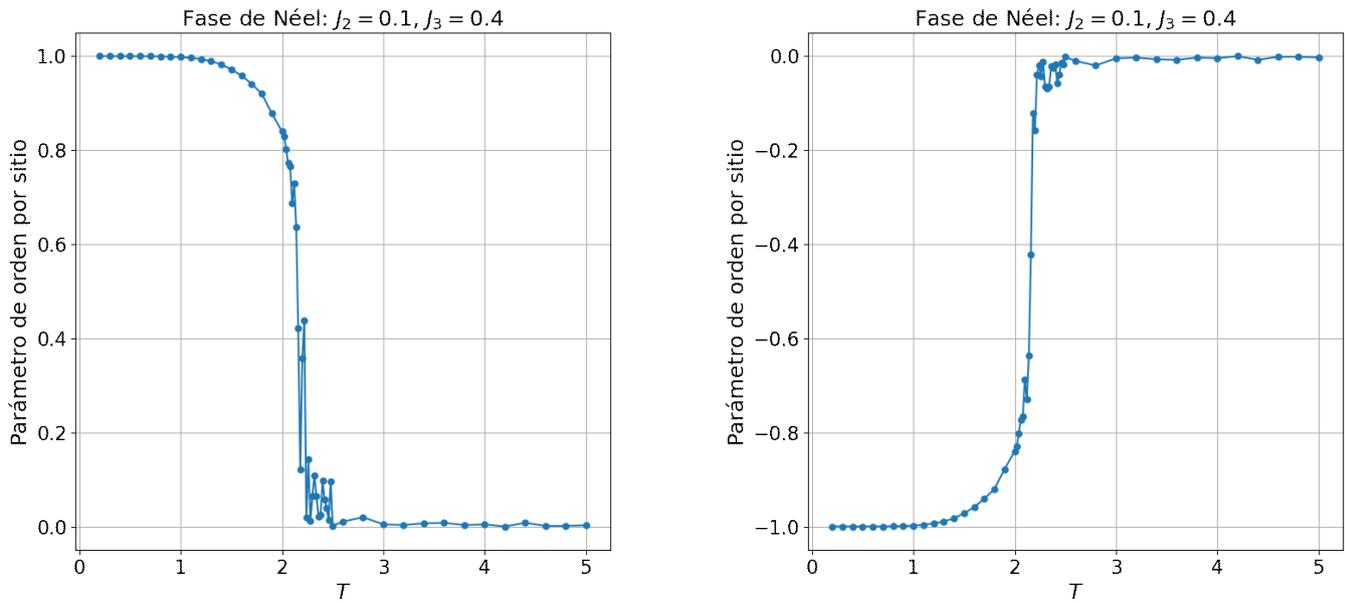


Figura 4.4: Parámetro de orden en función de la temperatura para un punto en la fase de Néel ($J_2 = 0,1$ y $J_3 = 0,4$) obtenido con simulaciones de MC para $L = 12$ para los dos posibles estados del sistema.

$$m_N = \frac{1}{2}(m_A - m_B) = \begin{cases} \pm 1 & \text{si } T < T_c \\ 0 & \text{si } T > T_c \end{cases} \quad (4.2)$$

A partir de las fluctuaciones de la energía es posible calcular el calor específico utilizando la ec. (1.6). Para cada una de las fases halladas se realizaron cinco copias, para luego promediarlas y hacer estadística sobre los datos obtenidos a partir de la simulación. En la Fig. 4.5 se muestra el C_v por sitio promediado a partir de las cinco copias en función de la temperatura para la fase de Néel ($J_2 = 0,1$ y $J_3 = 0,4$) con $L = 24$. El error estadístico (barras rojas) se calculó a partir de la desviación estándar dividida la raíz del número de copias. Para bajas y altas temperaturas, las barras de error están contenidas dentro del punto correspondiente al C_v . Entorno a la temperatura de transición las barras de errores son más grandes, debido a que hay más fluctuaciones térmicas.

Se calculó numéricamente la entropía del sistema a partir de lo expresado en la subsección 3.2. Esto debe ser tenido en cuenta, ya que la integración numérica puede arrojar resultados no esperados debido a lo sensible que es a ruidos en los datos a integrar. Así, debió asegurarse de obtener calores específicos con una cantidad considerable de puntos, es decir,

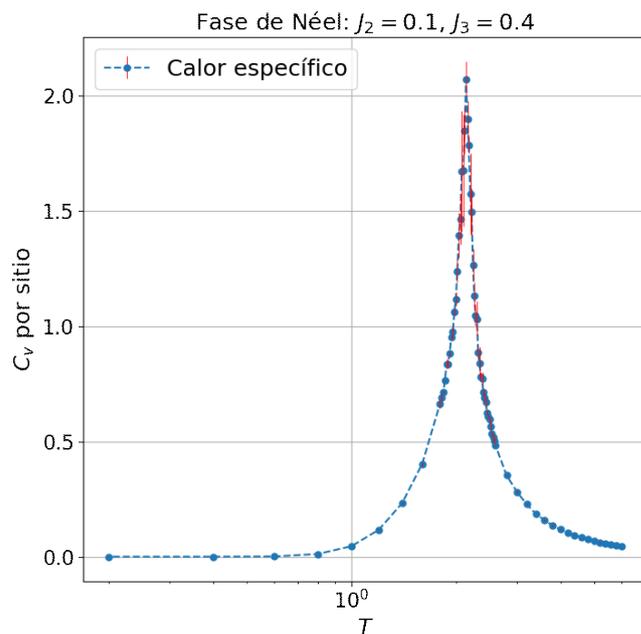


Figura 4.5: Calor específico por sitio en función de la temperatura (en escala logarítmica) para un punto en la fase de Néel ($J_2 = 0,1$ y $J_3 = 0,4$) calculado con simulaciones MC, promediando 5 copias, para $L = 24$. Las líneas rojas denotan las barras de error.

un barrido fino en temperaturas, sobre todo entorno a la temperatura de transición.

Al realizar el cálculo de la entropía a partir del calor específico (ec. (1.9)) es necesario fijar el valor de la constante de integración S_T con un criterio acorde al problema en cuestión. Para variables tipo Ising, a altas temperaturas (temperaturas arbitrariamente mayores a la de transición) el sistema se encuentra en su fase paramagnética, lo cual conlleva a tener 2^N estados debido a que en cada uno de los N sitios existen 2 estados posibles. Teniendo esto en cuenta, la entropía en dichas condiciones está dada por $S_T = k_B N \ln(2)$. Al igual que se consideró anteriormente, la entropía también se calculó por sitio y la constante de Boltzmann se tomó igual a 1. Así, la constante de integración toma el valor de $\ln(2)$ lo cual se refiere a que a altas temperaturas el sistema se encuentra en su fase paramagnética, y esto se observa como una asíntota horizontal para S . Se barrió la temperatura en el rango $0,01K - 50K$ de tal manera de obtener curvas bien definidas. El paso utilizado se afinó entorno a la temperatura de transición del sistema y a bajas temperaturas.

En la Fig. 4.6 se muestra el calor específico (izquierda) y la entropía (derecha) por sitio en función de la temperatura para un punto en la fase de Néel ($J_2 = 0,1$ y $J_3 = 0,4$). La entropía fue calculada mediante integración numérica a partir del calor específico

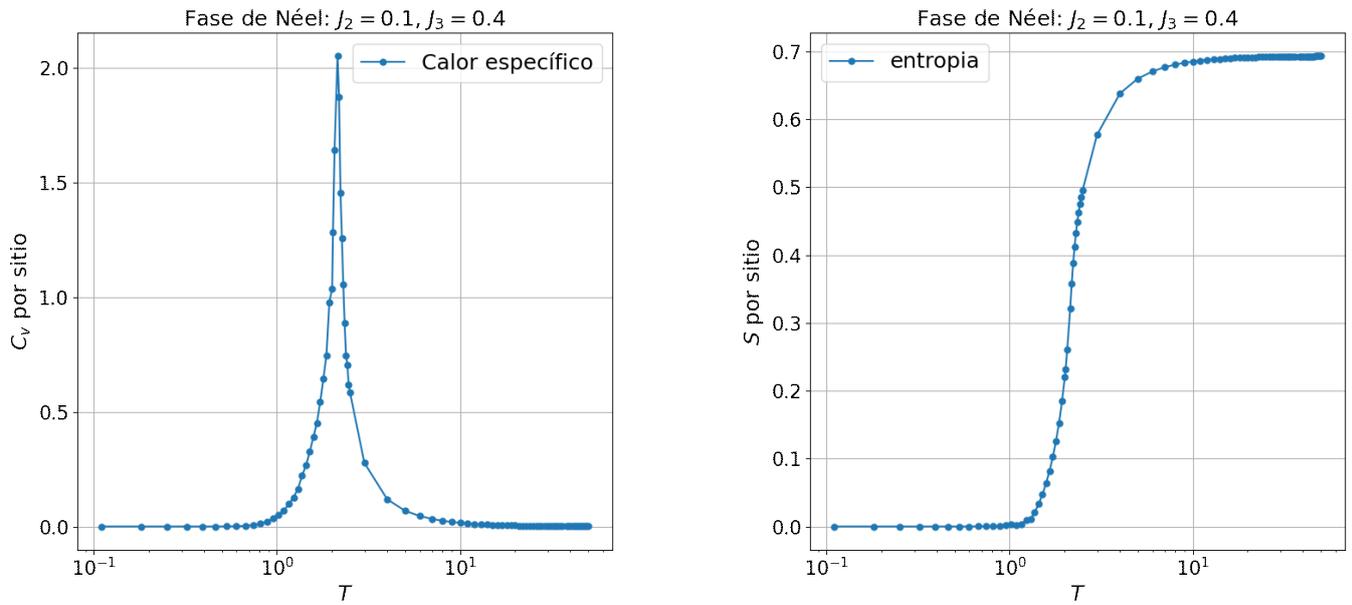


Figura 4.6: Calor específico (izquierda) y entropía (derecha) ambos por sitio en función de la temperatura para un punto de la fase de Néel ($J_2 = 0,1$, $J_3 = 0,4$) obtenidos con simulaciones de MC para $L = 24$. A altas temperaturas la entropía se acerca a $\ln(2)$.

presentado. Se puede apreciar que a bajas temperaturas el sistema no presenta entropía residual, lo cual es consistente con el hecho de estar trabajando en una fase ordenada. La entropía finita está fuertemente relacionada con el desorden del sistema a bajas temperaturas, con lo cual es esperable que en las fases ordenadas se satisfaga de forma usual la Tercera Ley de la Termodinámica. Al ser la fase de Néel una fase bien ordenada y muy estudiada [22][32] se tomó como referencia para comparar con los casos de entropía finita, que discutiremos más adelante.

4.1.2. Fase Franjas

Los órdenes correspondientes a las fase de Franjas se presentan en la Fig. 4.7, donde se muestran tres configuraciones de espines. Se observan franjas formadas por espines $+1$ o -1 intercaladas. Entre las diferentes configuraciones, estas franjas se encuentran rotadas unas respecto de las otras. Esto permite interpretar cuando el sistema se estabiliza en uno de estos tres estados se rompe una simetría, que en este caso es una simetría de rotación en un ángulo de 120° , permitiendo tres posibles orientaciones de franjas de espines. Por otro lado, de forma análoga a la fase de Néel, se encuentra también la ruptura de simetría

respecto al cambio de paridad del espín. Así, se tiene una degeneración en esta fase de orden $2 \times 3 = 6$, 2 por la inversión del espín y 3 por las tres posibles direcciones de las franjas.

Para diferenciar a estos tres estados, se puede definir un parámetro que caracterice a cada uno de ellos. Luego, para distinguir toda esta fase de cualquier otra, se puede definir un parámetro de orden total sumando los tres parámetros. Cuando el sistema selecciona uno de los tres estados en particular, todos los parámetros darán cero, excepto el que caracteriza ese estado específico. En la Fig. 4.8 se muestra la celda magnética unidad para cada una de las tres posibles direcciones. Se observa que estas celdas están rotadas en 120° una respecto de la otra debido a la simetría ante rotaciones que tiene esta fase. Además, se evidencia que es posible definir cuatro subredes para definir los parámetros. Cada sitio de la celda magnética corresponde a una subred diferente, denotadas por A , B , C y D .

Para distinguir entre cada tipo de franja, fue necesario definir un parámetro de orden para cada tipo de franja, m_{F_j} con $j = 1, 2, 3$. Para cada caso se identificó la celda magnética y se definieron cuatro subredes $i = A, B, C, D$ (ver Fig. 4.8) de tal manera que cada una de ellas cuente con espines que fueran todos $+1$ o -1 , siendo la magnetización por sitio por subred m_i . Luego, se definieron los parámetros $m_{F_j} = \frac{1}{4}(m_A - m_B - m_C + m_D)$ para cada una de las tres posibles direcciones, que resultará ± 1 en la fase de franjas correspondiente. Cada m_{F_j} con $j = 1, 2, 3$ corresponde a una de las direcciones dadas en la Fig. 4.7, respectivamente.

Para distinguir una fase tipo franjas de cualquier otra, se define un parámetro de orden total m_F , presentado en la ec.(4.3). Notemos que para promediar copias, es necesario tomar el módulo del parámetro de orden, de manera de que no se cancelen los valores y así obtener un parámetro que valga 1 si el sistema está en cualquiera de los estados de la fase de Franjas.

$$m_F = \frac{1}{3}(m_{F_1} + m_{F_2} + m_{F_3}) = \begin{cases} \pm 1 & \text{si } T < T_c \\ 0 & \text{si } T > T_c \end{cases} \quad (4.3)$$

A continuación en la Fig. 4.9 (extremo izquierdo), para $J_2 = 0,9$ y $J_3 = 0,7$, se muestra la superposición de los tres parámetros m_{F_i} que caracterizan cada una de las tres posibles direcciones de la fase Franjas (dirección 1, 2 y 3, respectivamente), para una copia, en

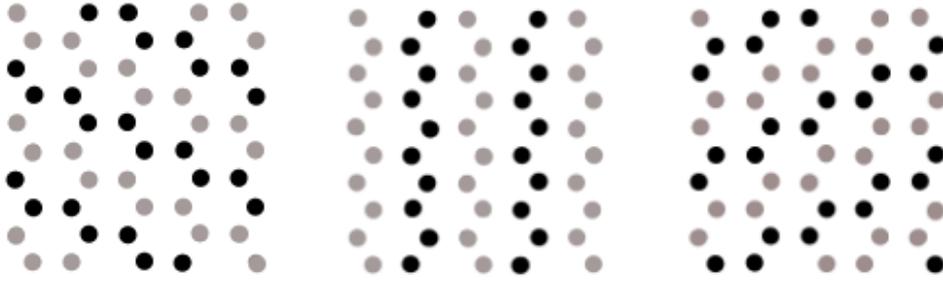


Figura 4.7: Configuraciones de espines para la fase Franjas con $L = 24$. Se observan las tres posibles direcciones (dirección 1, 2 y 3, respectivamente) que puede tomar el sistema para minimizar su energía. Los puntos negros representan espines $+1$ y los grises -1 .

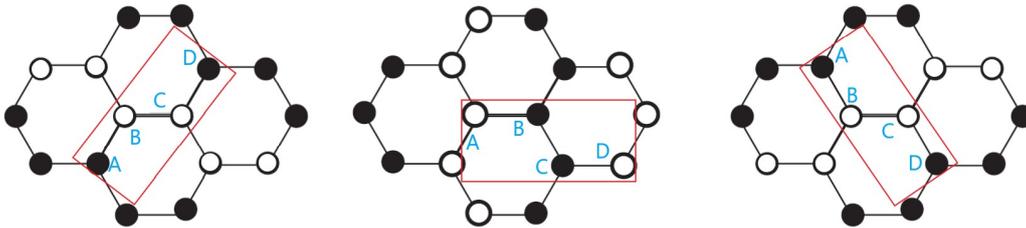


Figura 4.8: Celda magnética unidad (rectángulo rojo) para cada una de las posibles direcciones de la fase Franjas. Se denotan las cuatro subredes definidas con A , B , C y D . Los círculos negros denotan espines $+1$ mientras que los círculos blancos, espines -1 .

función de la temperatura, donde se ve que uno de ellos tiende a $+1$ o -1 (en este caso a $+1$) y los otros dos a 0 . Luego, se muestra la configuración de espines a $T = 0,1$ (centro) correspondiente a la dirección que coincide con el parámetro m_{F_1} . El parámetro de orden total m_F , definido previamente, se presenta en el extremo derecho de la figura.

Para el mismo punto del espacio de parámetros, se grafican la energía (E) (Fig. 4.10a) y el calor específico (C_v) en función de la temperatura en la Fig. 4.10b. Para el C_v se realizaron 5 copias para luego promediarlas. El error estadístico fue calculado de manera análoga a la fase de Néel. Nuevamente, se observa un error mayor en torno a la temperatura crítica del sistema. Una observación interesante es que el pico del C_v se ve mucho más pronunciado que para la fase de Néel. Este análisis sobre la forma de la curva permite discutir cuestiones sobre el tipo de transición, la cual en este caso parece ser de primer orden, ya que ese pico presentado en la Fig. 4.10b es consecuencia de un salto o discontinuidad en la energía (Fig. 4.10a). Notar que a bajas temperaturas la energía tiende al valor $E_F = -1,45$ (Fig. 4.10a), lo cual es consistente con lo expresado en la ec. (4.1).

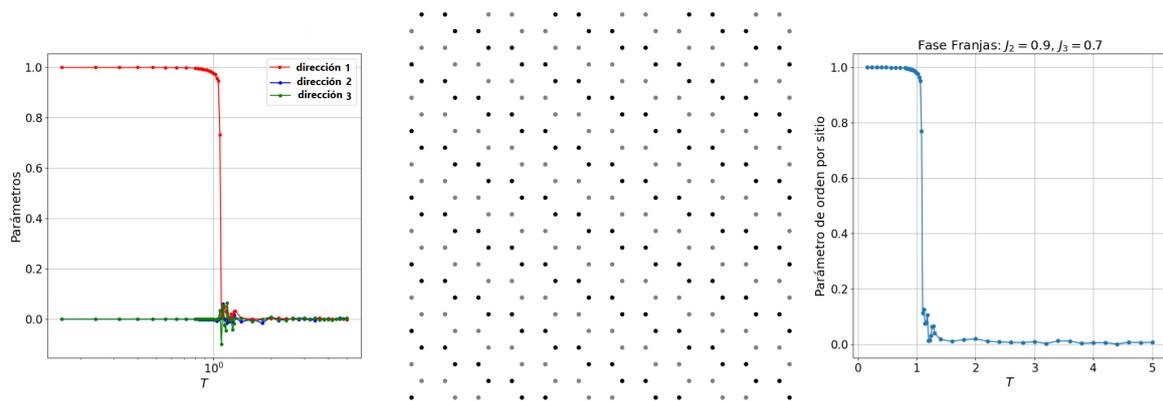


Figura 4.9: Superposición de los parámetros m_{F_i} en función de la temperatura (extremo izquierdo) que definen al parámetro de orden total por sitio m_F (extremo derecho) para un punto en la fase Franjas ($J_2 = 0,9$, $J_3 = 0,7$) obtenidos con simulaciones MC para una copia con $L = 12$. En el centro se observa la configuración de espines correspondiente a $T = 0,1$. Dirección 1, 2 y 3 hacen referencia a las tres posibles direcciones debido a la ruptura de la simetría de rotación según la Fig. 4.7 de izquierda a derecha, respectivamente.

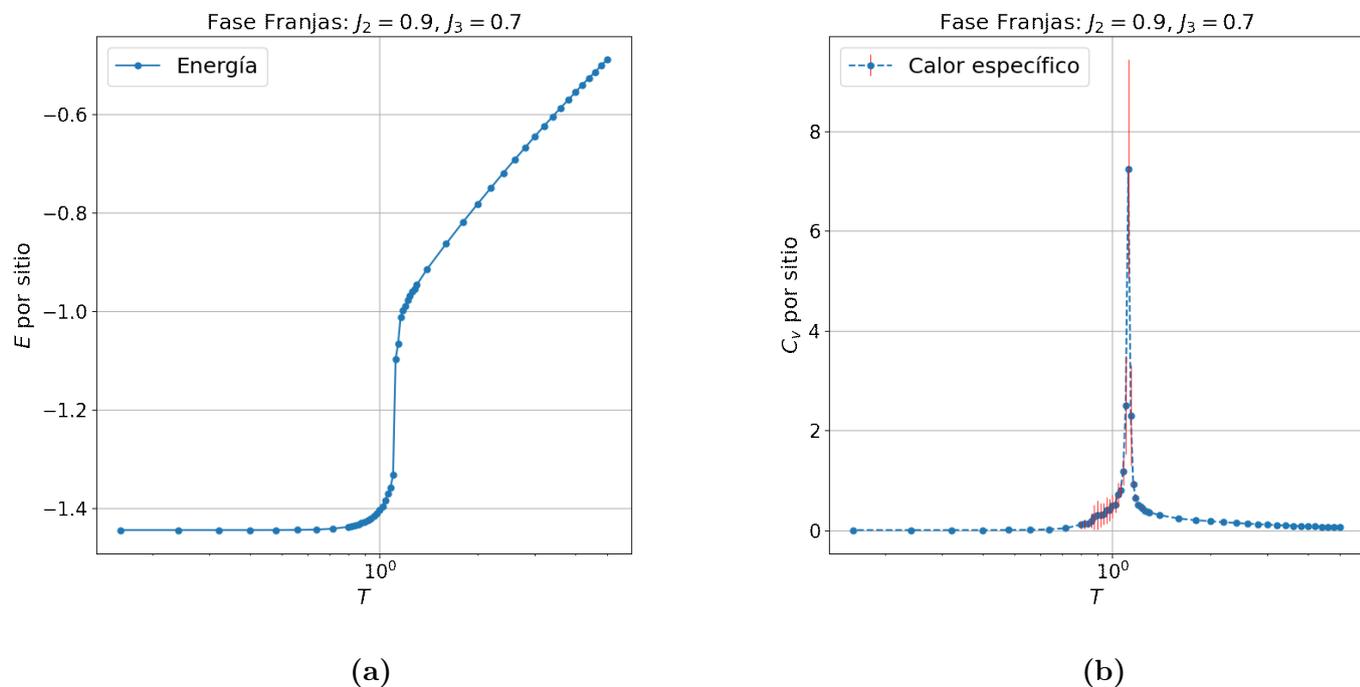


Figura 4.10: Energía (a) y calor específico (b) por sitio en función de la temperatura (en escala logarítmica) para $J_2 = 0,9$ y $J_3 = 0,7$ (fase de Franjas) obtenidos con simulaciones de MC con $L = 24$. Para el C_v se promediaron cinco copias independientes.

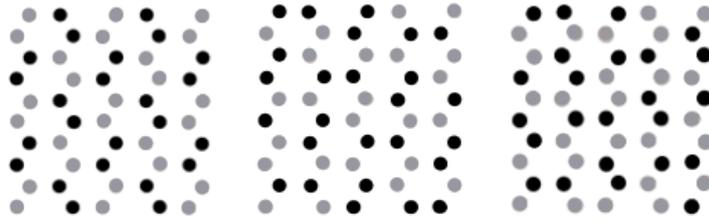


Figura 4.11: Configuración de espines a baja temperatura para la fase de Pares Alternados con $L = 24$. Se muestran los posibles órdenes que puede tomar el sistema en esta fase (dirección 1, 2 y 3, respectivamente). Los puntos negros representan espines $+1$ y los grises -1 .

4.1.3. Fase de Pares Alternados

Para la fase de Pares Alternados, en la Fig. 4.11 se muestran dos configuraciones de espines a temperatura $T = 0,1$ para $J_2 = 0,9$ y $J_3 = 0,3$. Se observa que nuevamente se rompen ciertas simetrías. Si se comparan la figura del extremo izquierdo con la del extremo derecho se aprecia una rotación en un ángulo de 120° ; es decir que, al igual que en la fase Franjas, se rompe la simetría de rotación. Además, también el sistema presenta degeneración debido al cambio de paridad del espín. De esta manera, esta fase cuenta con una degeneración de orden $3 \times 2 = 6$, 3 por las tres posibles direcciones de rotación, y 2 por la inversión del espín.

Para distinguir entre cada uno de los estados posibles de esa fase, nuevamente se definieron tres parámetros de orden, de manera similar a lo realizado en la fase de Franjas, cada uno de ellos conformado por ocho subredes $i = A, B, C, D, E, F, G, H$, de tal manera que al sumar o restar la magnetización por sitio por subred m_i convenientemente permitan definir el parámetro de orden. A partir de la Fig. 4.12, donde se indica la celda magnética unidad y las subredes, se definieron los parámetros $m_{A_j} = \frac{1}{8}(m_A - m_B - m_C + m_D - m_E + m_F + m_G - m_H)$, de manera que en cada tipo de orden de esta fase m_{A_j} valdrá ± 1 . Luego, para diferenciar cualquier estado en esta fase de cualquier otra, se definió el parámetro de orden total m_{Al} (ec. (4.4)), el cual es la suma de tres parámetros m_{A_1} , m_{A_2} y m_{A_3} ,

$$m_{Al} = \frac{1}{3}(m_{A_1} + m_{A_2} + m_{A_3}) = \begin{cases} \pm 1 & \text{si } T < T_c \\ 0 & \text{si } T > T_c \end{cases} \quad (4.4)$$

A continuación, para $J_2 = 0,9$ y $J_3 = 0,7$, en la Fig. 4.13 (izquierda) se muestra la

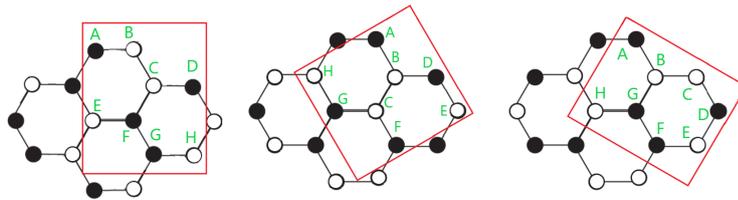


Figura 4.12: Celda magnética unidad (rectángulo rojo) para dos de las posibles direcciones de la fase de Pares Alternado, donde una está rotada 120° respecto de la otra. Se indican las ocho subredes definidas con A, B, C, D, E, F, G y H en cada caso. Los puntos negros denotan espines $+1$ mientras que los contornos espines -1 .

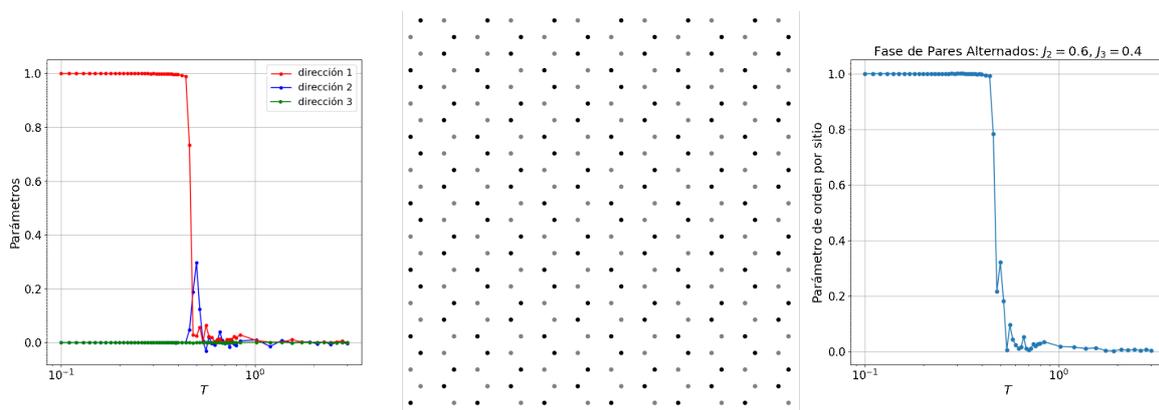


Figura 4.13: Superposición de los tres parámetros m_{A_i} en función de la temperatura (extremo izquierdo), que definen al parámetro de orden total por sitio m_A (extremo derecho), para un punto en la fase de Pares Alternados ($J_2 = 0,6, J_3 = 0,4$) obtenidos con simulaciones MC para una copia con $L = 12$. En el centro se observa la configuración de espines correspondiente a $T = 0,1$. Dirección 1, 2 y 3 hacen referencia a las tres posibles direcciones debido a la ruptura de la simetría de rotación según la Fig. 4.11 de izquierda a derecha, respectivamente.

superposición de los tres parámetros m_{A_i} en que caracterizan cada uno de los estados (es decir, las tres posibles direcciones) de la fase de Pares Alternados, en función de la temperatura, para una copia, de tal manera que uno de ellos va a $+1$ o -1 (en este caso a $+1$) y los otros dos van a 0 . Luego, se muestra la configuración de espines a $T = 0,1$ correspondiente (derecha). Si se suman todos los parámetros m_{A_i} , se obtiene el parámetro de orden total m_A , ya definido, que se presenta en la Fig. 4.13 (extremo derecho).

Nuevamente, para $J_2 = 0,9$ y $J_3 = 0,7$, en la Fig. 4.14a se muestra la energía por sitio en función de la temperatura y en la Fig. 4.14b se presenta el calor específico en función de la temperatura obtenido a partir del promedio de cinco copias, calculado como en los casos anteriores el error estadístico denotado por las barras rojas, las cuales son considerables entorno al máximo del calor específico, mientras que a bajas y altas temperaturas las

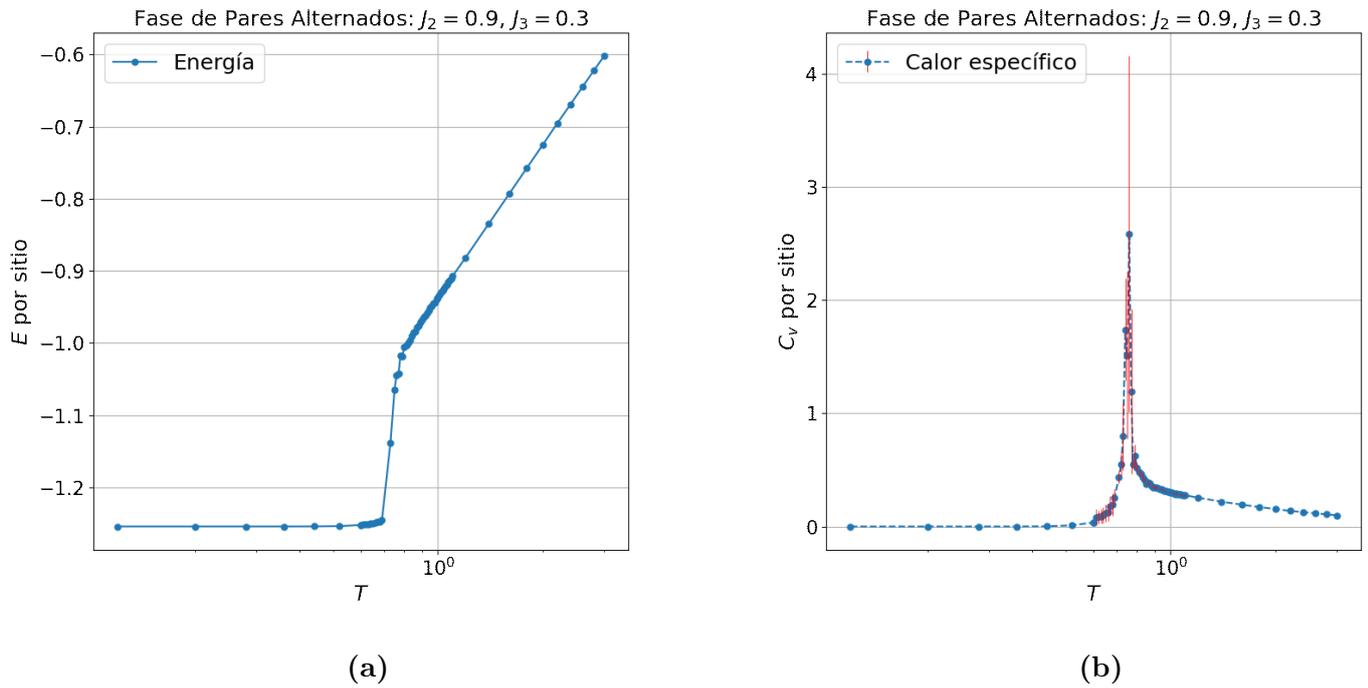


Figura 4.14: Energía (a) y calor específico (b) ambos por sitio en función de la temperatura (en escala logarítmica) para $J_2 = 0,9$ y $J_3 = 0,7$ (fase de Pares Alternados) obtenidos con simulaciones de MC con $L = 24$. Para el C_v se promediaron cinco copias.

barras están contenidas en el punto obtenido en la simulación (azul). Notar que a bajas temperaturas la energía se acerca al valor $E_A = -1,25$ (Fig. 4.14a), lo cual es consistente con lo expresado en la ec. (4.1). Observando ambas curvas, en este caso se observa un salto en la energía, que coincide con el pico en el calor específico, sugiriendo una transición de primer orden.

4.2. Punto Altamente Frustrado

Como se ha mencionado previamente, existe un punto del diagrama de fases de particular interés llamado Punto Altamente Frustrado (*PAF*), cuyas coordenadas corresponden a $J_2 = J_3 = \frac{J_1}{2}$; al trabajar con $J_1 = 1$, se tiene que $J_2 = J_3 = 0,5$ (Fig. 4.1). En este punto las energías de las tres fases ordenadas coinciden, es decir, $E_N = E_F = E_A$. Veremos que en este punto este sistema está aún más degenerado.

Para poder entender qué representa el *PAF*, es posible reescribir el Hamiltoniano del sistema teniendo en cuenta la relación entre las constante de intercambio que correspondan

en función del espín total de una plaqueta hexagonal, representada en la Fig. 4.15. Así, se obtiene

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{nn} \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{nnn} \sigma_i \sigma_j + J_3 \sum_{nnnn} \sigma_i \sigma_j = \frac{J_1}{2} \sum_{\gamma} \sigma_{\gamma}^2 - cte \quad (4.5)$$

donde $\sigma_{\gamma} = \sum_{l \in \gamma} \sigma_l$ es el espín total de la plaqueta hexagonal γ , y cte es una constante consecuencia de armar el término cuadrático. A partir de esta última expresión del Hamiltoniano, se puede observar que el mínimo de energía se dará cuando $\sigma_{\gamma} = 0$, que en este caso implica tener tres espines down y tres up por cada plaqueta hexagonal. Como estas plaquetas están unidas por los bordes, esto da lugar a una degeneración considerable del estado fundamental en el *PAF*.

La degeneración macroscópica del estado fundamental se evidencia analizando la entropía a bajas temperaturas. En la Fig. 4.16 se muestra la energía (extremo izquierdo), el calor específico C_v (centro) y la entropía S (extremo derecho), todos por sitio, del sistema en el *PAF*, calculada a partir de la integración numérica del calor específico, como se vio en la subsección 3.2. Se observa que a bajas temperaturas S no tiende a cero, es decir que el sistema posiblemente presenta entropía residual. A altas temperaturas el sistema se encuentra en su fase paramagnética, como se mencionó anteriormente, por lo que S tiende a $\ln(2)$, el valor de la constante de integración elegida. Esta entropía residual significa

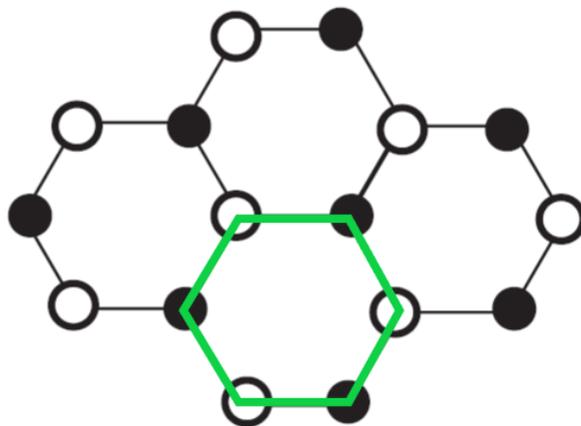


Figura 4.15: Esquema de la red panel de abejas. En verde se muestra la plaqueta hexagonal utilizada para reescribir el Hamiltoniano en el punto altamente frustrado. Los círculos negros denotan espines $+1$ mientras que los blancos espines -1 .

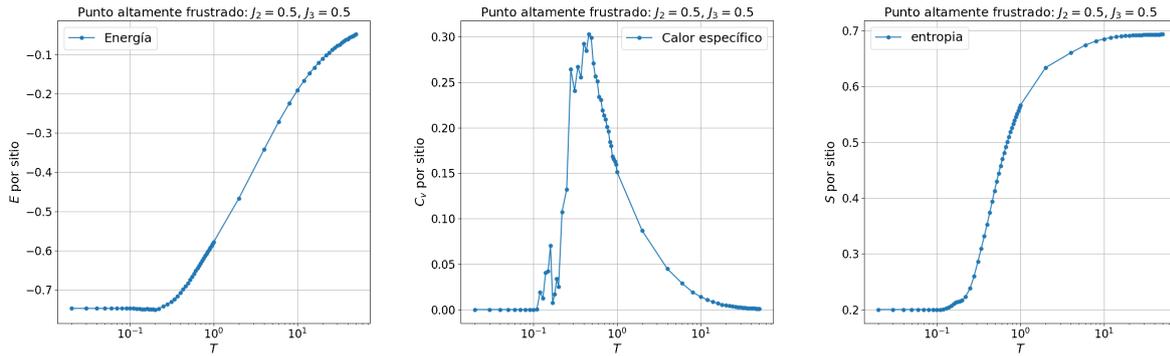


Figura 4.16: Energía (extremo izquierdo), calor específico (centro) y entropía (extremo derecho) por sitio en función de la temperatura obtenida con simulaciones MC para el punto altamente frustrado para una copia con $L = 24$. A altas temperaturas la entropía se acerca a $\ln(2)$.

que aún a bajas temperaturas se observa un desorden como consecuencia de la gran degeneración del estado fundamental. Esto es consistente con los resultados mencionados en la subsección 2.3 para el caso de espines de Heisenberg y el caso cuántico. Es importante remarcar que la energía del sistema a bajas temperaturas, como se muestra en la Fig. 4.16 (extremo izquierdo), toma el valor $E_N = E_F = E_A = -0,75$ dado por la ec. (4.1).

4.3. Líneas degeneradas

Cada una de las fases ordenadas está separada por una línea degenerada, como se observa en la Fig. 4.1. Sobre estas líneas, la energía para dos de esas fases limitantes es la misma. Es decir, sobre la línea punteada verde (vertical) $E_N = E_F$, sobre la línea punteada roja (horizontal) $E_A = E_F$ y por último, sobre la línea punteada azul (diagonal) $E_N = E_A$. En las subsecciones siguientes, analizaremos el comportamiento del sistema en estas líneas, con el objetivo de ver si podemos obtener más información sobre el comportamiento del sistema a bajas temperaturas en esta parte del diagrama de fases. Específicamente, estudiaremos el calor específico, la entropía por sitio calculada a partir de la integración numérica de éste y la energía en función de la temperatura, obtenidos a partir de las simulaciones de Monte Carlo.

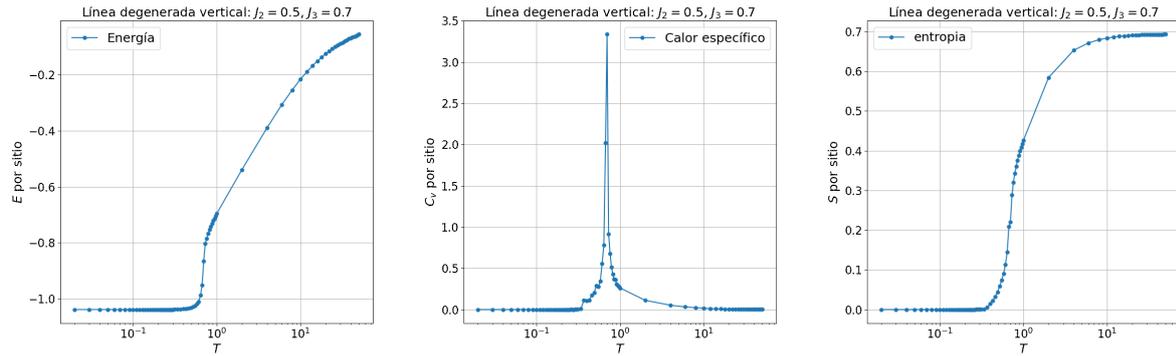


Figura 4.17: Energía (extremo izquierdo), calor específico (centro) y entropía (extremo derecho) por sitio en función de la temperatura obtenida con simulaciones MC para un punto de la línea degenerada vertical ($J_2 = 0,5$ y $J_3 = 0,7$) para una copia con $L = 24$. A altas temperaturas la entropía se acerca a $\ln(2)$.

4.3.1. Línea degenerada vertical

Análogamente a los casos anteriores, se estudió la línea degenerada vertical tomando el punto $J_2 = 0,5$ y $J_3 = 0,7$. En la Fig. 4.17 se presentan la energía (extremo izquierdo), el C_v (centro) y S (extremo derecho) en función de la temperatura, todos por sitio. Se observa que a bajas temperaturas el sistema llega a una energía cercana a $E_N = E_F = -1,05$ lo cual es consistente con la ec. (4.1). Para el C_v se observa que el pico es bastante pronunciado, por ejemplo, respecto al *PAF* e inclusive la fase de Néel, lo cual es consistente con el salto que se observa en la energía, sugiriendo una transición de primer orden a un cierto estado. Respecto a S se ve que el sistema no cuenta con entropía residual. Esto se retomará al hablar del factor de estructura en la sección siguiente. En la Fig. 4.18 se muestra la configuración de espines obtenida para este punto de la línea degenerada a la temperatura más baja de la simulación con valor $T = 0,02$. Se pueden observar dos ordenes localizados, por un lado un orden del estilo Franjas y por el otro de Néel. Esto indica cierta tendencia del sistema a ordenarse según a alguna de las fases mencionadas, que son las que están limitadas por esta línea. Sería interesante estudiar esta línea para redes de mayor tamaño para ver si el sistema logra o no estabilizarse en alguna de las dos fases, lo cual dejaremos como continuación de este trabajo.

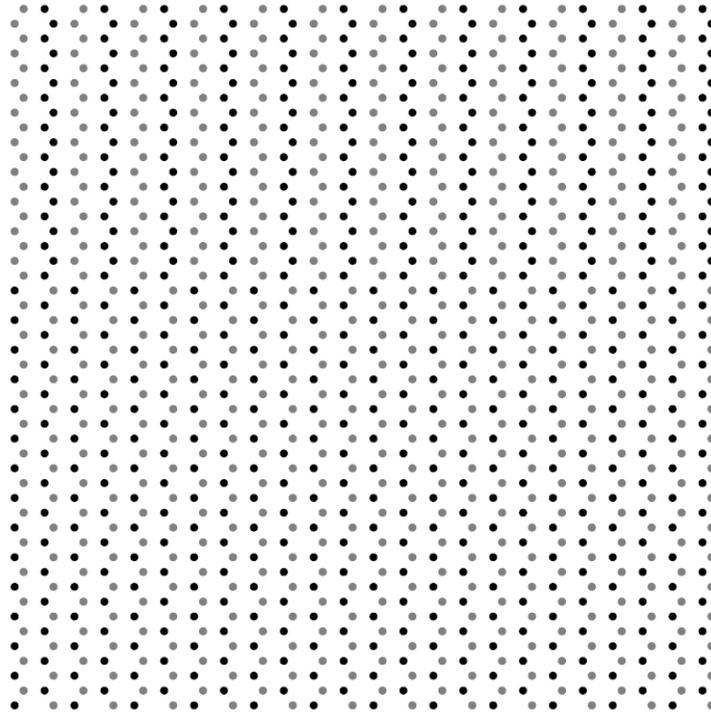


Figura 4.18: Configuración de espines a temperatura $T = 0,02$ para un punto de la línea degenerada vertical ($J_2 = 0,5$ y $J_3 = 0,7$) para $L = 24$. Los puntos negros representan espines $+1$ y los grises -1 .

4.3.2. Línea degenerada horizontal

Para estudiar la línea degenerada horizontal, se tomó el punto $J_2 = 0,8$ y $J_3 = 0,5$. En la Fig. 4.19 se presentan la energía (extremo izquierdo), el C_v (centro) y la entropía (extremo derecho) en función de la temperatura, todos por sitio. Se observa que a bajas temperaturas el sistema tiene una energía muy próxima a $E_F = E_A = -1,05$ lo cual está de acuerdo con las ecuaciones en (4.1). Luego, como en el caso de la línea degenerada vertical, se observa que a bajas temperaturas el sistema no cuenta con entropía residual, lo cual lleva a esperar cierto orden del sistema a bajas temperaturas. Ahora bien, en este caso la configuración de espines a bajas temperaturas no evidencia un orden específico o localizado (Fig. 4.20), pero eso no significa que no exista, ya que visualmente es posible perder información. Nuevamente, como veremos más adelante, para este análisis será de gran utilidad el estudio del factor de estructura. Además, como en el caso anterior, para estudiar el comportamiento de baja temperatura también sería necesario recurrir a simulaciones de redes con tamaños más grandes, y utilizar otro tipo de algoritmos para comparar resultados.

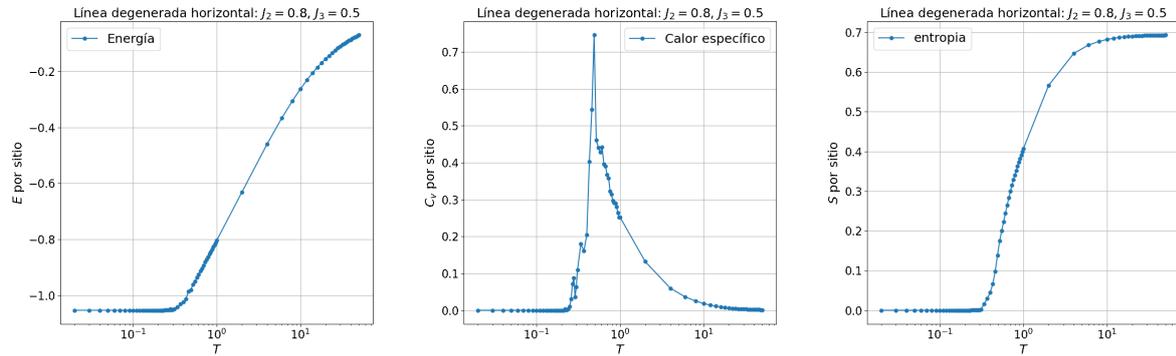


Figura 4.19: Energía (extremo izquierdo), calor específico (centro) y entropía (extremo derecho) por sitio en función de la temperatura obtenida con simulaciones MC para un punto de línea degenerada horizontal ($J_2 = 0,5$ y $J_3 = 0,7$) para una copia con $L = 24$. A altas temperaturas la entropía se acerca a $\ln(2)$.

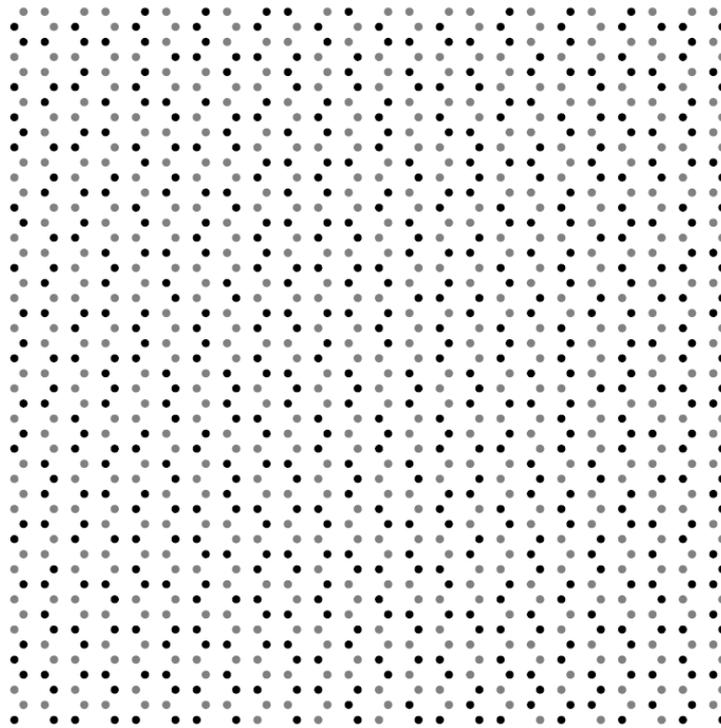


Figura 4.20: Configuración de espines a la temperatura $T = 0,02$ para un punto de la línea degenerada horizontal ($J_2 = 0,8$ y $J_3 = 0,5$) con $L = 24$. Los puntos negros representan espines $+1$ y los grises -1 .

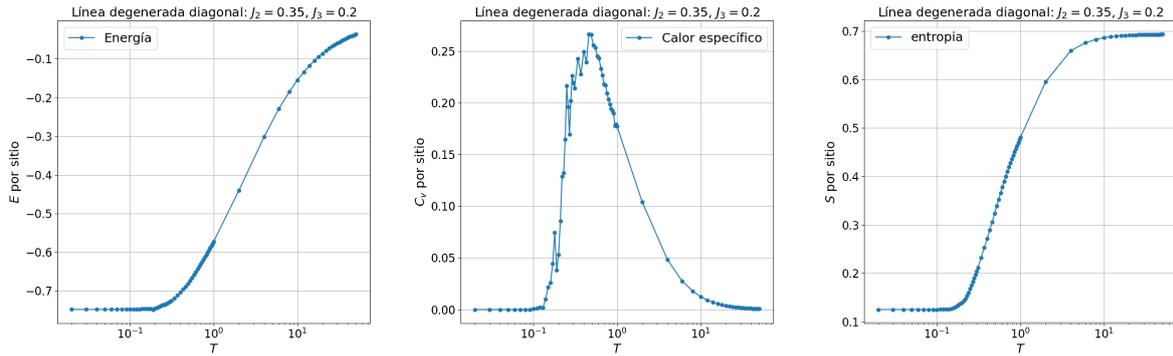


Figura 4.21: Energía (extremo izquierdo), calor específico (centro) y entropía (extremo derecho) por sitio en función de la temperatura obtenida con simulaciones MC para un punto en la línea degenerada diagonal ($J_2 = 0,35$ y $J_3 = 0,2$) para una copia con $L = 24$. A altas temperaturas la entropía se acerca a $\ln(2)$.

4.3.3. Línea degenerada diagonal

Para finalizar esta sección, nos enfocamos en la línea degenerada diagonal, tomando el punto $J_2 = 0,35$ y $J_3 = 0,2$. En la Fig. 4.21 se presenta la energía (extremo izquierdo), el C_v (centro) y la entropía (extremo derecho) por sitio en función de la temperatura. Se observa que a bajas temperaturas el sistema llega a un valor de energía similar a $E_N = E_A = -0,75$, acorde a la ec. (4.1). En este caso el calor específico toma una forma similar al del *PAF*, lo que lleva a pensar en una posible entropía residual. Efectivamente, al observar el gráfico del extremo derecho se ve que a bajas temperaturas el sistema cuenta con entropía finita no nula. Algo para notar es que este valor es menor al obtenido para el *PAF*.

A modo de cierre de esta sección, se presentan en la Fig. 4.22 los calores específicos para las fases ordenadas y el *PAF*, en la Fig. 4.23a los calores específicos para las líneas degeneradas y el *PAF*, y por último, en la Fig. 4.23b a la entropía por sitio de las líneas degeneradas, la fase de Néel y el *PAF*, con el fin de comparar el comportamiento antes mencionado de esas magnitudes físicas para las diferentes fases. Se vuelve a hacer énfasis en el hecho de la evidente posibilidad de que la línea degenerada diagonal y el *PAF* cuenten con entropía finita (Fig. 4.23b), y la similitud entre la forma de las curvas de los calores específicos, que no presentan picos y son más "chatos" que en los otros casos (Fig. 4.23a).

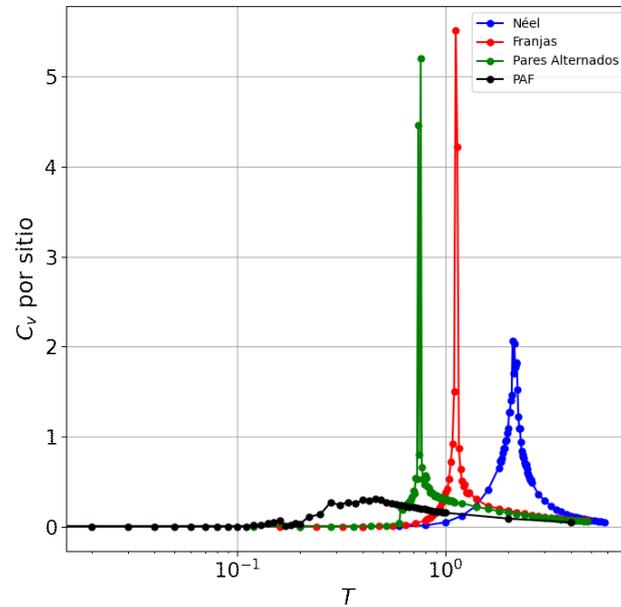


Figura 4.22: Calor específico por sitio en función de la temperatura para puntos tomados en las fases ordenadas y el punto altamente frustrado obtenidos con simulaciones de MC para $L = 24$.

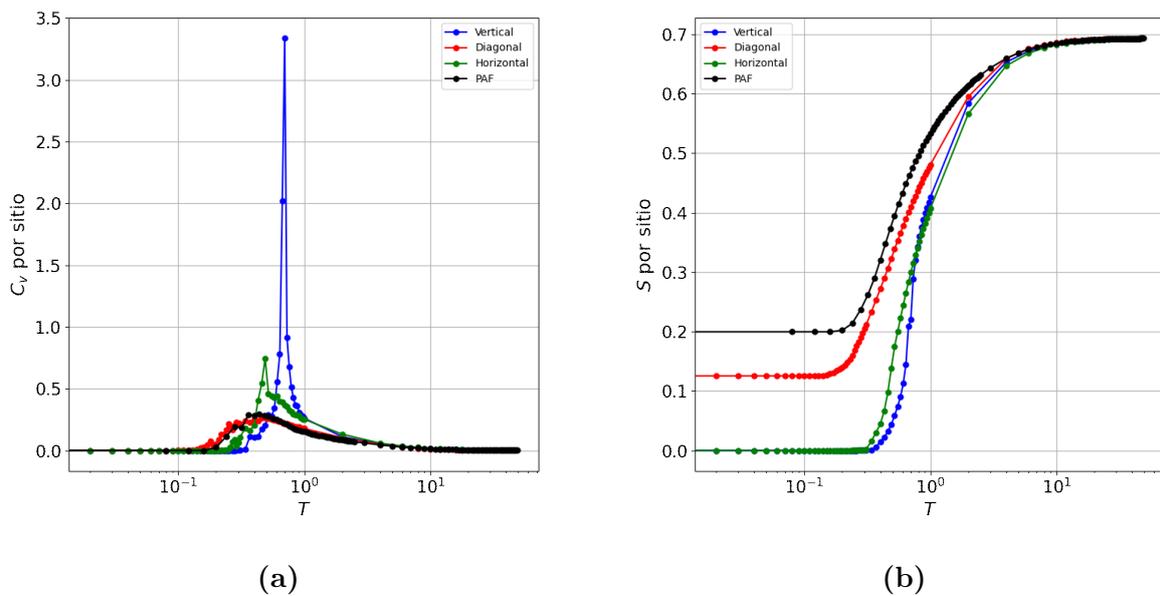


Figura 4.23: Calor específico (a) y entropía (b) por sitio en función de la temperatura para puntos en las líneas degeneradas y el punto altamente frustrado obtenidos con simulaciones de MC para $L = 24$. A altas temperaturas las entropías se acercan a $\ln(2)$.

4.4. Factor de estructura

Se calculó el factor de estructura (ec. (3.12)) para cierto conjunto de constantes de intercambio para cada fase hallada como así también en las líneas degeneradas y en el *PAF* para redes con $L = 16, 24, 30$ y 60 con el fin de observar algún cambio debido a la dimensión de la red. En el caso de las fases de Néel, Franjas y de Pares Alternados, a baja temperatura el sistema se encuentra completamente ordenado con lo cual se trabajó con configuraciones de espines (es decir, las coordenadas del sitio y su espín correspondiente) a temperaturas lo suficientemente bajas para que esto ocurra ($T = 0,1$). Para el caso de las líneas degeneradas y el *PAF*, fue necesario guardar la configuración de espines cada cierta cantidad de pasos Monte Carlo a una temperatura tal que la simulación no se hubiese estancado.

En la Fig. 4.24 se muestra el factor de estructura para un punto en la fase de Néel ($J_2 = 0,1$, $J_3 = 0,4$) a temperatura $T = 0,1$ para una red de $L = 24$. Los hexágonos denotan la primera zona de Brillouin (negro) y la zona extendida (amarillo). Es evidente que los máximos de intensidad se corresponden con los vértices de la zona extendida, aunque se observa un leve corrimiento en dos de ellos, lo cual puede deberse a un problema de redondeo numérico en el cálculo del factor de estructura. Como ya se comentó, al ser la fase de Néel bien conocida, se espera que todos los picos del factor de estructura coincidan con puntos de la zona de Brillouin extendida ya mencionados [9]. La barra a la derecha del gráfico presentado muestra la escala de intensidades. Puede observarse que los picos cuentan todos con la misma intensidad, lo cual indica que no existe una dirección privilegiada para la dispersión, como era de esperarse.

Análogamente se presentan los factores de estructura para un punto de las fases Franjas ($J_2 = 0,9$, $J_3 = 0,7$) (Fig. 4.25a) y de Pares Alternados ($J_2 = 0,9$, $J_3 = 0,3$) (Fig. 4.26a). En el primer caso, se observa que los máximos de intensidad se ubican en la primera zona de Brillouin pero no en sus vértices, sino que uno de ellos se encuentra a la mitad del segmento que une dos vértices, y el otro pico simétricamente opuesto a éste último, donde uno de ellos fue llamado M_+ en la ec. (2.5). Es importante resaltar que debido a la simetría ante rotaciones que presenta esta fase, esos dos picos observados puede ubicarse en otros puntos del hexágono de la primera zona de Brillouin, pero siempre en la mitad

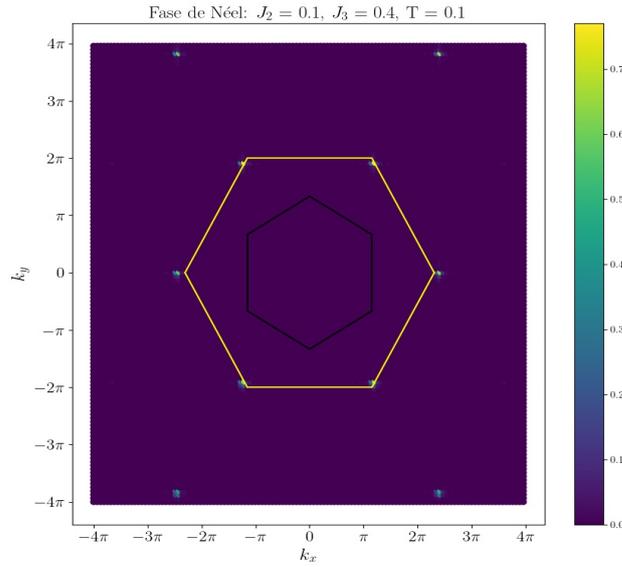


Figura 4.24: Factor de Estructura en el espacio de momentos para un punto en la fase de Néel ($J_2 = 0,1, J_3 = 0,4$) con $L = 24$ a $T = 0,1$. El hexágono negro representa la primera zona de Brillouin mientras que el amarillo representa la zona extendida.

y uno simétricamente opuesto al otro. Es decir, en los diferentes puntos M . Nótese que son tres tipos de factores de estructura distintos, coincidiendo con las tres rotaciones posibles de las franjas. Entonces, si se suman los factores de estructura para todos los casos posibles, se encuentra que los máximos de intensidad se ubican en todos los puntos M de la primera zona de Brillouin (Fig. 4.25b).

Al considerar un punto en la fase de Pares Alternados ($J_2 = 0,9, J_3 = 0,3$), se ven cuatro máximos que se encuentran entre ambos hexágonos, es decir que ninguno de ellos toca alguna de las zonas. En la Fig. 4.26a se observa el factor de estructura de una de las realizaciones. En este caso, nuevamente al tener en cuenta las tres rotaciones posibles y sumar los factores de estructura correspondientes, se obtiene el gráfico presentado en Fig. 4.26b.

Luego, en la Fig. 4.27a, se muestra el factor de estructura para el punto altamente frustrado para una red con $L = 60$ a $T = 0,17$, temperatura a la cual se aseguró que la simulación no quedara estancada en un mínimo de energía. Se observa que el factor de estructura es plano, es decir que no se evidencian picos de máxima intensidad. Ahora bien, si se mira con especial atención se puede ver que comienzan a formarse ciertos agujeros de tal forma que en los vértices de la zona de Brillouin queda una concentración de puntos con

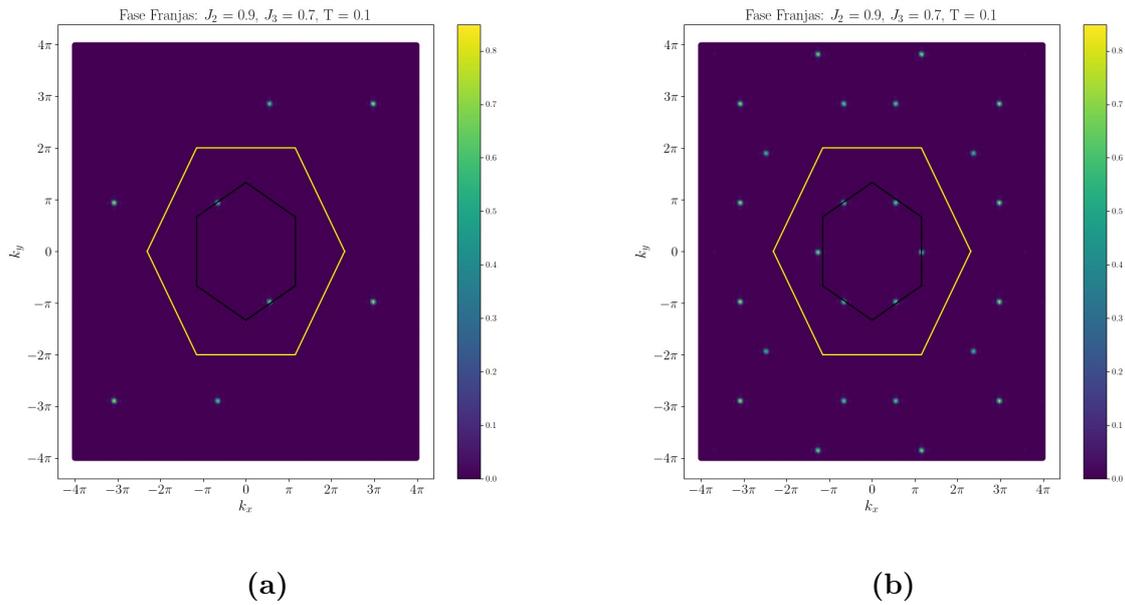


Figura 4.25: Factor de Estructura en el espacio de momentos para un punto en la fase Franjas ($J_2 = 0,9$, $J_3 = 0,7$) con $L = 24$ a $T = 0,1$. En (a) se muestra una dirección específica, mientras que en (b) la suma de los factores en las tres direcciones posibles. El hexágono negro representa la primera zona de Brillouin mientras que el amarillo representa la zona extendida.

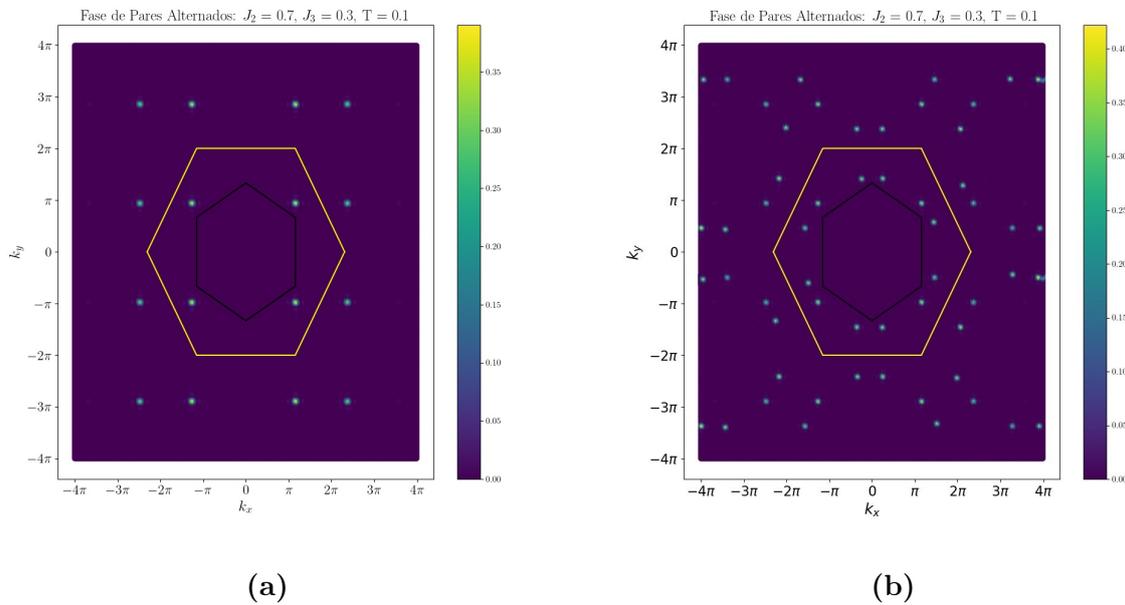


Figura 4.26: Factor de Estructura en el espacio de momentos para un punto en la fase de Pares Alternados ($J_2 = 0,7$, $J_3 = 0,3$) con $L = 24$ a $T = 0,1$. En (a) se muestra una dirección específica, mientras que en (b) la suma de los factores en las tres direcciones posibles. El hexágono negro representa la primera zona de Brillouin mientras que el amarillo representa la zona extendida.

intensidad no nula. Esto es consistente a la formación de los *pinch points*. Ahora bien, debido a la estructura de la red y de las plaquetas del *PAF*, se podría pensar que no es factible que aparezcan dichos puntos en el sistema. Esto se analiza en base a que la presencia de *pinch points* está en general relacionada con una divergencia nula de cierta cantidad asociada al espín de la plaqueta. Esto sucede en el caso de que los espines se ubiquen de tal manera que el "flujo" saliente y entrante sean iguales, pero en este sistema de estudio no es posible. Sin embargo, estos *pinch points* pueden verse en el factor de estructura de este mismo punto altamente frustrado para espines de Heisenberg (Fig. 3.4). La similitud entre ambos factores de estructura y la entropía residual nos permiten decir que en el *PAF* para espines tipo Ising el sistema sería un "líquido de espín".

Para el caso de un punto en la línea degenerada diagonal ($J_2 = 0,35$, $J_3 = 0,2$) (Fig. 4.27b) se observa algo similar a lo visto para el *PAF*: no se ven picos de intensidad, sino que hay ciertas zonas planas con concentración de puntos y nuevamente se observa la formación de "pinch points". Recordando que la forma del calor específico en un punto de esta línea tiene forma similar al del *PAF* (Fig. 4.23a) y que presentaba entropía residual, también podría ser que en esta línea el sistema se comporte como un "líquido de espín". Para confirmar esto, sería necesario realizar un estudio más extenso, que dejaremos como continuación de este trabajo.

Para un punto en la línea degenerada horizontal ($J_2 = 0,5$, $J_3 = 0,7$), se grafica en la Fig. 4.28a el factor de estructura obtenido para una copia a $T = 0,61$. Se observan máximos de intensidad que se ubican en los vértices de la zona de Brillouin. La aparición de picos es consistente con lo discutido en la subsección 3.3, donde si bien no pudo caracterizarse un orden, se observó que el sistema no tenía entropía residual (Fig. 4.20). Ahora bien, entorno a esos picos se observa una dispersión difusa, lo cual puede deberse a fluctuaciones térmicas entorno a la temperatura a la cual se calculó el factor de estructura. Para verificar esto, se realizó nuevamente el cálculo a una temperatura menor ($T = 0,21$) encontrando que efectivamente los máximos de intensidad se ubican en los vértices de la primera zona de Brillouin (Fig. 4.28b).

Por último, para la línea degenerada vertical, en la Fig. 4.29 se muestra el factor de estructura obtenido para una copia para $J_2 = 0,5$ y $J_3 = 0,7$ a $T = 0,54$. Se observan máximos de intensidad lo cual, como en el caso anterior, es consistente con lo obtenido

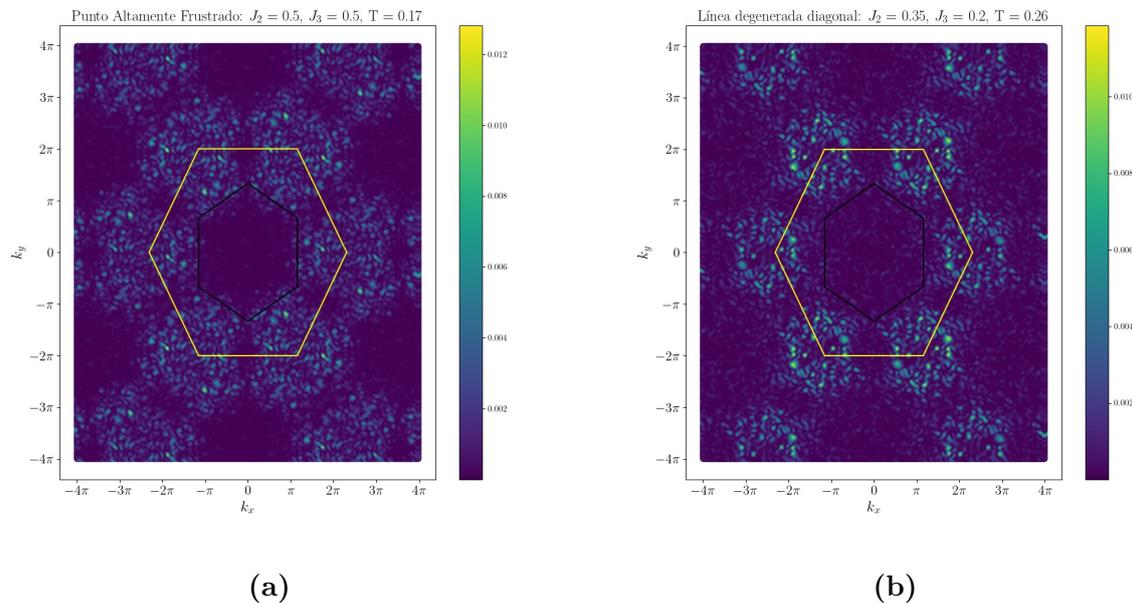


Figura 4.27: Factor de Estructura en el espacio de momentos para el punto altamente frustrado (a) a $T = 0,17$ y un punto en la línea degenerada diagonal ($J_2 = 0,35$, $J_3 = 0,2$) (b) a $T = 0,26$ con $L = 60$ y 24 , respectivamente. El hexágono negro representa la primera zona de Brillouin mientras que el amarillo representa la zona extendida.

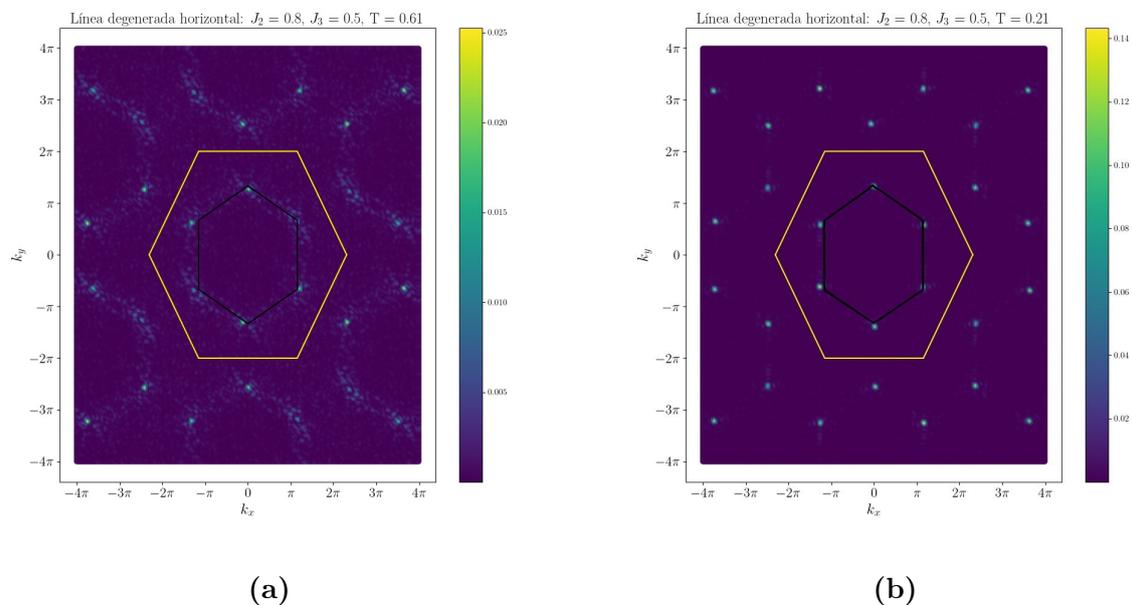


Figura 4.28: Factor de Estructura en el espacio de momentos para un punto en la línea degenerada horizontal ($J_2 = 0,8$, $J_3 = 0,5$) a $T = 0,61$ (a) y a $T = 0,21$ (b) con $L = 24$. El hexágono negro representa la primera zona de Brillouin mientras que el amarillo representa la zona extendida.

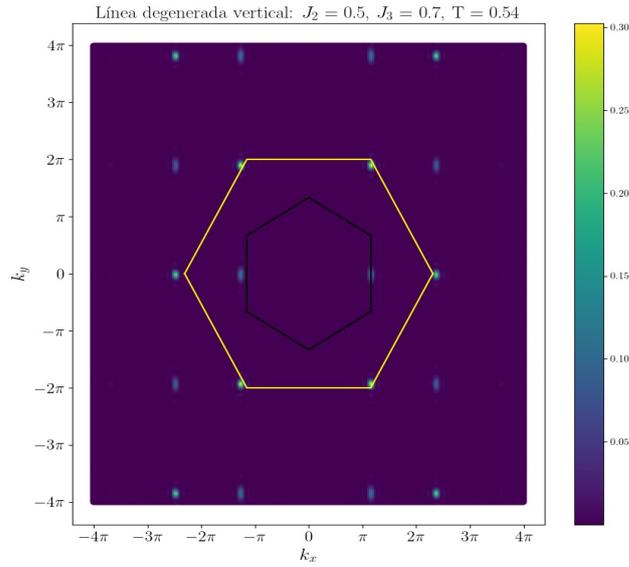


Figura 4.29: Factor de Estructura en el espacio de momentos para un punto en la línea degenerada vertical ($J_2 = 0,5$, $J_3 = 0,7$) con $L = 24$ a $T = 0,1$. El hexágono negro representa la primera zona de Brillouin mientras que el amarillo representa la zona extendida.

previamente. Particularmente, se observan picos de intensidad primarios en los vértices del hexágono correspondiente a la zona extendida (como se encontró para la fase de Néel), y también se visualizan puntos secundarios más difusos en el hexágono correspondiente a la primera zona de Brillouin (como se encontró para la fases Franjas, en cierta dirección). Esto es debido a la degeneración de la línea degenerada vertical, observando así órdenes localizados (Fig. 4.18), donde se observa una coexistencia de fases en una transición de primer orden. Es necesario realizar copias y promediar para estudiar cómo evolucionan las intensidades observadas en el factor de estructura.

En resumen, en este capítulo hemos presentado el diagrama de fase a bajas temperaturas para la red panal de abejas con interacciones antiferromagnéticas hasta terceros vecinos, obtenido a partir simulaciones Monte Carlo mediante el algoritmo de Metropolis con condiciones periódicas de borde utilizando variables de espín tipo Ising. Fue posible hallar y caracterizar tres posibles fases ordenadas del sistema en las condiciones expuestas, calculando a partir de las simulaciones la energía, el calor específico y la entropía, como así también construir una expresión analítica para la energía de cada fase ordenada. En particular, se estudiaron las diferentes simetrías que presentan las fases respecto al

cambio de paridad del espín y rotación, lo cual permitió la elaboración de los respectivos parámetros de orden. Luego, se prestó especial atención al punto altamente frustrado (*PAF*) hallando la posible presencia de entropía residual, para luego centrarnos en el análisis de tres líneas degeneradas del sistema encontrando la presencia de posible entropía residual para la línea degenerada diagonal. Para profundizar un poco más el análisis, se calcularon los factores de estructura para ciertos conjuntos de constantes de intercambio para cada fase, el *PAF* y las líneas degeneradas.

Como trabajo a futuro es interesante pensar en profundizar el análisis sobre el *PAF* con el fin de estudiar el comportamiento a bajas temperaturas como así también la presencia de entropía residual. Esto lleva naturalmente a querer profundizar también el estudio en las líneas degeneradas, y particularmente en la diagonal, como se expresó. Luego, es posible trabajar con tamaños mayores de la red con el fin de descartar fluctuaciones debidas al tamaño y realizar un número considerable de copias para realizar los correspondientes promedios y caracterizar con más precisión cada fase, y también analizar en detalle las transiciones de fase. Además, para estudiar el comportamiento de baja temperatura, también sería necesario utilizar otro tipo de algoritmos para comparar resultados.

5. Conclusiones

En este trabajo se estudiaron las propiedades magnéticas del modelo $J_1 - J_2 - J_3$ antiferromagnético en la red panal de abejas utilizando simulaciones Monte Carlo mediante el algoritmo de Metropolis con condiciones periódicas de borde utilizando variables de espín tipo Ising. A partir de dichas simulaciones, se logró construir el diagrama de fases de baja temperatura del sistema encontrando tres fases ordenadas: Néel, Franjas y Pares Alternados. Debido a la ruptura de ciertas simetrías se halló que estas fases cuentan con una degeneración del nivel fundamental de orden dos, seis y seis, respectivamente. Teniendo esto en cuenta, se construyeron los parámetros de orden que caracterizan cada fase. Para la fase de Néel, se calculó la entropía en función de la temperatura mediante integración numérica, encontrando que no presenta entropía residual, como era esperable. Como otro elemento de análisis, se calcularon los factores de estructuras para las tres fases, encontrando máximos de intensidad en ciertas direcciones del espacio de momentos, lo cual da cuenta del orden de dicha fase. Para las fases de Franjas y Pares Alternados, donde se rompe la simetría de rotación de 120° , esta ruptura de simetría se vio reflejada en el factor de estructura.

Se estudió especialmente el punto altamente frustrado (*PAF*) ($\frac{J_1}{2} = J_2 = J_3$), observando la presencia de entropía residual, lo cual proviene de la gran degeneración del nivel fundamental. A partir del estudio del factor de estructura, se encontró que este punto no presenta picos de intensidad sino que es plano, lo cual está de acuerdo con el desorden del sistema a bajas temperaturas. Además, se observó que parecería observarse una estructura similar a la observada para espines de Heisenberg en trabajos anteriores. Toda esta información lleva a proponer que en este punto el sistema se comporta como un "líquido de espín".

Por último, se estudiaron las tres líneas degeneradas del diagrama de fase que separan dos de las tres fases ordenadas: línea degenerada vertical, horizontal y diagonal. Se encontró, a partir del estudio de la energía y del calor específico en determinados puntos, que en la línea degenerada vertical se observaría un comportamiento similar una transición de primer orden, mientras que, en la línea diagonal, el C_v resultó similar al *PAF*. Esto llevó a la idea de una posible entropía residual en estas líneas. Solo se halló entropía residual

en la línea diagonal, observando en el factor de estructura regiones planas, sin picos de intensidad. Para las líneas restantes, el factor de estructura arrojó picos de intensidad lo cual está de acuerdo con la ausencia de entropía residual.

Como trabajo a futuro, se propone estudiar el sistema para tamaños mayores, para estudiar las diferentes magnitudes físicas presentadas en este trabajo en función del tamaño de la red y así tener un análisis más completo, caracterizando las transiciones de fase, y en particular de los posibles órdenes de baja temperatura en las líneas degeneradas.

Una extensión del trabajo sería estudiar la respuesta del sistema frente a la aplicación de un campo magnético externo en la dirección de los espines. También sería posible aplicar un campo transversal con el fin de estudiar aspectos cuánticos. Por último, una modificación de interés es considerar distorsiones de la red, ya que existen compuestos tales que cuentan con la estructura de la red panal de abejas pero la distancia entre primeros vecinos no es la misma, lo cual ampliaría la aplicación de este trabajo a otros sistemas con propiedades, tal vez, muy diferentes.

Referencias

- [1] L. Balents; *Spin liquids in frustrated magnets*. Nature 464, 199–208 (2010).
- [2] R. K. Pathria; Paul D. Beale. *Statistical Mechanics*. Second Edition. (1987)
- [3] L. Onsager. *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an orderdisorder transition*. Phys. Rev. **65** 117-149 (1944).
- [4] Diep. *Frustrated Spin Systems*. Second Edition. (2013)
- [5] G. H. Wannier. *Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net* Phys. Rev. **79** (1950).
- [6] W. Krauth. *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*. (2006)
- [7] S. H. Simon. *The Oxford Solid State Basics*. Oxford University Press. Oxford University Press, New York. (2013).
- [8] C. Lacroix; P. Mendels; Frédéric Mila. *Introduction to Frustrated Magnetism*. (2011)
- [9] S. Nishimoto; V. M. Katukuri; V. Yushankhai; H. Stoll; U. K. Robler; L. Hozoi; I. Rousochatzakis; J. van den Brink. *Strongly frustrated triangular spin lattice emerging from triplet dimer formation in honeycomb Li_2IrO_3* . Nat Commun. 7:10273. (2016)
- [10] N. W. Ashcroft; N. David Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College, Philadelphia. (1976)
- [11] F. A. Kassan-Ogly; A. K. Murtazaev; A. K. Zhuravlev; M. K. Ramazanov; A. I. Proshkin. *Ising model on a square lattice with second-neighbor and third-neighbor interactions*. (2014).
- [12] P.W. Anderson. **Ordering and Antiferromagnetism in Ferrites**. Phys. Rev. **102** 1008 (1956)
- [13] J. Villain. *Insulating spin glasses*. Phys. B **33** 31 (1979)
- [14] M. Zukovic; M. Borovsky; A. Bobák; T. Balcerzak; K. Szalowski. *Spin-glass-like ordering in a frustrated $J_1 - J_2$ Ising antiferromagnet on a honeycomb lattice*. Phys. Pol. **137** 619 (2020)

- [15] M. Zukovic; M. Borovsky; A. Bobák; T. Balcerzak; T. Lucivjansky. *Tricritical behaviour of the frustrated Ising antiferromagnet on the honeycomb lattice*. Physics Letters A **380** 2693-2697 (2016)
- [16] R. Moessner and J. T. Chalker. *Low-temperature properties of classical geometrically frustrated antiferromagnets*. Phys. Rev. B **38** 12049 (1998)
- [17] R. Moessner; J. T. Chalker. *Properties of a Classical Spin Liquid: The Heisenberg Pyrochlore Antiferromagnet*. Phys. Rev. Lett. **80** 2929-2932 (1998)
- [18] H. D. Rosales; D. C. Cabra; C. A. Lamas; P. Pujol; M. E. Zhitomirsky. *Broken discrete symmetries in a frustrated honeycomb antiferromagnet*. Phys. Rev. B **87** 104402 (2013)
- [19] C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. (1953)
- [20] C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. (1996)
- [21] S. Sorella; Y. Otsuka; S. Yunoki. *Absence of a Spin Liquid Phase in the Hubbard Model on the Honeycomb Lattice*. Sci Rep **2** 992 (2012)
- [22] J. B. Fouet; P. Sindzingre; C. Lhuillier. *An investigation of the quantum $J_1 - J_2 - J_3$ model on the honeycomb lattice*. Eur. Phys. J. B **20** 241–254 (2001)
- [23] N. M. R. Perez. *The transport properties of graphene: An introduction*. (2010)
- [24] S.M. Dubois; Z. Zanolli; X. Declerck; J. C. Charliera. *Electronic properties and quantum transport in Graphene-based nanostructures*. Eur. Phys. J. B **72** 1–24 (2009)
- [25] S. M. Winter, A. A. Tsirlin, M. Daghofer, J. van den Brink, Y. Singh, P. Gegenwart and R. Valentí; *Models and Materials for Generalized Kitaev Magnetism*. J. Phys. Condens. Matter (topic review) **29** (2017)
- [26] X. Liu; T. Berlijn; W. G. Yin; W. Ku; A. Tsvelik; Y. Kim, H. Gretarsson; Y. Singh; P. Gegenwart; J. P. Hill. *Long range magnetic ordering in Na_2IrO_3* . Phys. Rev. B **83** (2011)
- [27] H. Hung; L. Wang; Z. Gu; G. A. Fiete. *Topological phase transition in a generalized Kane-Mele-Hubbard model: A combined Quantum Monte Carlo and Green's function study*. Phys. Rev. B **87** (12) (2013)

- [28] O. Smirnova; M. Azuma; N. Kumada; Y. Kusano; M. Matsuda; Y. Shimakawa; T. Takei; Y. Yonesaki; N. Kinomura. *Synthesis, Crystal Structure, and Magnetic Properties of $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ Oxynitrate Comprising $S = 3/2$ Honeycomb Lattice*. J. Am. Chem. Soc. **131**, 23, 8313–8317. (2009)
- [29] L. Janssen and M. Vojta, J. *Heisenberg-Kitaev physics in magnetic fields Phys. Cond. Matter.* **31** (topic review) (2019)
- [30] J. Rehn; A. Sen; K. Damle; R. Moessner. *Classical Spin Liquid on the Maximally Frustrated Honeycomb Lattice*. Phys. Rev. Lett. **177** (2016)
- [31] F. A. Gómez Albarracín, H. D. Rosales. *Multiple pseudo-plateaux states and antiferromagnetic pair selection in the XY model in the highly frustrated honeycomb lattice*. J. Phys. Cond. Matter (accepted) (2021)
- [32] D. C. Cabra, C. A. Lamas, H. D. Rosales. *Quantum disordered phase on the frustrated honeycomb lattice*. Phys. Rev. B **83**, 094506 (2011)
- [33] R. F. Bishop, P. H. Y. Li, O. Götze, J. Richter, and C. E. Campbell. *Van Hove singularity in the magnon spectrum of the antiferromagnetic quantum honeycomb lattice*. Phys. Rev. B **92**, 224434
- [34] J. Thijssen. *Computational Physics*. Second Edition. 12. (2012)
- [35] M. E. J. Newman; G. T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, New York. (1999)
- [36] M. Zukovic. *Residual entropy of spin- s triangular Ising antiferromagnet*. Eur. Phys. J. B **86** 283 (2013)
- [37] A. Honecker; S. Wessel. *Magnetocaloric effect in two-dimensional spin-1/2 antiferromagnets*. Physica B: Condensed Matter, 378–380, 1098-1099. (2006)
- [38] F. A. Gómez Albarracín; H. D. Rosales; P. Serra. *Phase transitions, order by disorder, and finite entropy in the Ising antiferromagnetic bilayer honeycomb lattice*. Physical Review E. (2018)
- [39] J. G. Rau; M. J. P. Gingras. *Spin slush in an extended spin ice model*. Nat Commun **7** 12234 (2016)

- [40] H. D. Zhou; S. T. Bramwell; J. G. Cheng; C. R. Wiebe; G. Li; L. Balicas; J. A. Bloxson; H. J. Silverstein; J. S. Zhou; J. B. Goodenough; J. S. Gardner. *High pressure route to generate magnetic monopole dimers in spin ice*. Nat Commun. 2:478. (2011)
- [41] L. Lin; Y. L. Xie; J. J. Wen; S. Dong; Z. B. Yan.; J. M. Liu. Experimental observation of magnetoelectricity in spin ice $Dy_2Ti_2O_7$. J. Phys. Soc. Jpn. 78, 103706 (2009).
- [42] E. Morosan; J. A. Fleitman; Q. Huang; J. W. Lynn; Y. Chen; X. Ke; M. L. Dahlberg; P. Schiffer; C. R. Craley; R. J. Cava. *Structure and magnetic properties of the $Ho_2Ge_2O_7$ pyrogermanate*. Phys. Rev. B **77** 224423. (2008)
- [43] Byron C. den Hertog and Michel J. P. Gingras. *Dipolar Interactions and Origin of Spin Ice in Ising Pyrochlore Magnets*. Phys. Rev. Lett. **84**, 3430
- [44] R. A. Borzi, F. A. Gómez Albarracín, H. D. Rosales, G. L. Rossini, A. Steppke, D. Prabhakaran, A. P. Mackenzie, D. C. Cabra and S. A. Grigera; Nature Communications **7**, 12592 (2016)
- [45] Anjana M. Samarakoon, Kipton Barros, Ying Wai Li, Markus Eisenbach, Qiang Zhang, Feng Ye, V. Sharma, Z. L. Dun, Haidong Zhou, Santiago A. Grigera, Cristian D. Batista and D. Alan Tennant; Nature Communications **11**, 892 (2020)
- [46] W. H. Press; S. A. Teukolsky; W. T. Vetterling; B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*. Second Edition.
- [47] *Object-Oriented Programming in Python Documentation*. (2017)
- [48] J. Knolle; R. Moessner. *A Field Guide to Spin Liquids*. Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **10** 451-472 (2019)