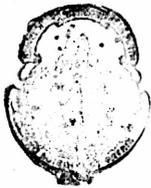




FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS
BIBLIOTECA DEL DEPARTAMENTO
DE FISICA

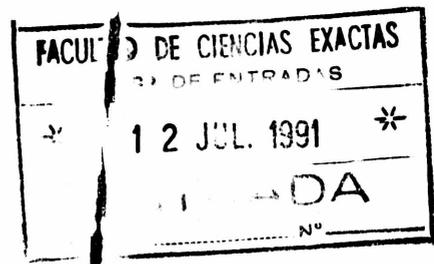
TRANSICIONES DE FASE EN SISTEMAS CUANTICOS DE SPINES

CONSTANCIO MIGUEL ARIZMENDI



FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS
BIBLIOTECA DEL DEPARTAMENTO
DE FISICA

Tesis presentada en la Universidad Nacional de La Plata para optar al
título de Doctor en Física. Director de Tesis : Dr. Luis Epele





FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS
BIBLIOTECA DEL DEPARTAMENTO
DE FISICA

FISICA	JUN 2011
DFC-TES	REC. NUEVO 00083

00050A (TESIS)

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer profundamente tanto al Director de esta tesis Dr. Luis Epele como al Dr. Carlos García Canal .Esta tesis no hubiera sido posible sin su apoyo y comprensión permanentes.

Agradezco también las buenas ideas y el asesoramiento del Dr. Huner Fanchiotti .

Quiero mencionar también en estos agradecimientos al Dr. Horacio Ceva, que me introdujo en los modelos con interacciones competitivas y al Dr. Amalio Fernández Pacheco por utilizar un método variacional que él creó.

INDICE

- Introducción	1
- 1 - Transiciones de Fase - Modelos de Spin	9
- 1.1 - Transiciones de Fase y Fenómenos Críticos	9
- 1.2 - Sistemas de Spin	25
- 1.3 - Modelos Cuánticos - Límite Hamiltoniano de Modelos Clásicos	26
- 2 - Métodos	33
- 2.1 - Método de Grupo de Renormalización	33
- 2.2 - Desarrollo en Series	42
- 2.2.1 - Desarrollo en Series en Bajas Temperaturas - Magnetización en el modelo de Ising Transversal	43
- 2.3 - Método Variacional	49
- 2.3.1 - Introducción	49
- 2.3.2 - Método Variacional Iterativo	50
- 2.4 - Método de Monte Carlo - Aplicación a Sistemas Cuánticos	54
- 2.4.1 - Introducción	54
- 2.4.2 - Método de Monte Carlo	54
- 2.4.3 - Método Estadístico Cuántico de Monte Carlo	56

- 3 - Modelo de Potts	61
- 3.1 - Introducción	61
- 3.2 - Hamiltoniano del Modelo Cuántico de Potts en (1+1) Dimensiones	64
- 3.3 - Grupo de Renormalización	65
- 3.4 - Desarrollo en Bajas Temperaturas	68
- 3.5 - Método Variacional de Bloques	72
- 3.6 - Conclusiones para el Modelo de Potts	74
- 4 - Modelo de Blume-Capel	78
- 4.1 - Introducción	78
- 4.2 - Hamiltoniano del modelo de Blume-Capel Cuántico	82
- 4.3 - Grupo de Renormalización	82
- 4.4 - Método Variacional de Bloques	92
- 4.5 - Conclusiones	93
- 5 - Modelo ANNNI	94
- 5.1 - Modelos con Interacciones Competitivas	94
- 5.2 - Modelo ANNNI	96
- 5.3 - ANNNI 2-D - Determinación de las Líneas de Transición mediante distintos Métodos	101
- 5.3.1 - Métodos Analíticos	101
- 5.3.2 - Métodos Numéricos	104
- 5.4 - No Sirve el Método de Monte Carlo para ANNNI-2D ?	110

- 5.5 - Límite Hamiltoniano de ANNNI 2-D	111
- 5.5.1 - Modelo Clásico Equivalente	113
- 5.6 - Es posible construir el mapa de fases de ANNNI a través de la función y longitud de correlación calculadas por Monte Carlo?	117
- 5.7 - Cálculo de Monte Carlo	119
- 5.7.1 - Función de Correlación	119
- 5.7.2 - Longitud de Correlación	120
- 5.8 - Diagrama de Fases	121
- 5.8.1 - Línea de Transición Ferromagnética-Fluída	123
- 5.8.2 - Línea de Desorden (DOL) y Línea Unidimensional (ODL)	123
- 5.8.3 - Transiciones Desordenada-Flotante Incommensurable-<2>	127
- 5.9 - Conclusiones	131
- 6 - Conclusiones Generales	134
- Referencias	142

INTRODUCCION

Algunas transiciones de fase forman parte de la vida cotidiana. Las distintas fases del agua : hielo, líquido, vapor son fáciles de distinguir y las transiciones de una fase a otra que se pueden observar por un cambio de temperatura : congelación , evaporación , condensación son tan familiares que han sido usadas para definir la escala de temperaturas (grados Celsius).

En la actualidad se conoce una familia inmensa de transiciones de fase : transiciones magnéticas, en ferroeléctricos, en superfluidos, en superconductores , separación de mezclas , orden-desorden en aleaciones ...

Todas estas transiciones han atraído la atención porque presentan un cambio cualitativo caracterizado por el hecho de que una pequeña variación de temperatura (o de otro parámetro como la presión o un campo exterior) desata una modificación espectacular en el sistema. Esto se traduce en el lenguaje de la Física en que para esos valores de los parámetros del sistema, las magnitudes termodinámicas presentan algún tipo de comportamiento no analítico. Este comportamiento singular ha dificultado la comprensión de estos problemas la que, evolucionó en forma lenta hasta la década de los '70, en la que nuevas ideas introducidas por Wilson permitieron entender definitivamente el comportamiento de los así llamados fenómenos críticos.

En esta tesis vamos a estudiar las transiciones de fase que aparecen en fenómenos físicos muy importantes , a saber :

- Compuestos de grafito intercalado, de especial interés porque es posible fabricar con ellos estructuras sintéticas complejas y explorar propiedades físicas en una y dos dimensiones.

- Sistemas metamagnéticos constituidos por planos con iones magnéticos con acoplamiento ferromagnético en el interior de los planos y antiferromagnético entre planos.

- Mezclas He3-He4 con el punto λ que caracteriza la transición de superfluidez.

- Halogenuros de amonio en los que aparece transición orden-desorden debida a las posiciones que toman los tetrahedros de amonio.

- Interacciones competitivas que producen estructuras espacialmente moduladas que por medio de técnicas de alta resolución han sido detectadas en aleaciones, sistemas magnéticos, ferroeléctricos y sistemas de adsorción.

Todos estos fenómenos presentan un amplio espectro de transiciones de fases que hace que su estudio sea de importancia académica:

El caso de los compuestos de grafito intercalado presenta la transición de fase de segundo orden o crítica, del mismo tipo que el punto crítico del agua, caracterizada por fluctuaciones de densidad en todas las escalas posibles, lo que provoca la imposibilidad de distinción entre fases y la transición continua entre ellas.

En las transiciones metamagnéticas, de superfluidez y orden-desorden en halogenuros de amonio aparecen puntos tricríticos que son puntos en donde

una línea de puntos críticos se convierte en una línea de transición de primer orden - en la que la transición, a diferencia de la de segundo orden se hace de forma discontinua - o donde se produce el encuentro de tres líneas críticas.

Las interacciones competitivas producen una gran variedad de características en sus mapas de fases, tales como fases intermedias o incommensurables, puntos multifase con estados fundamentales infinitamente degenerados con entropía finita, puntos de Lifshitz separando fases commensurables, incommensurables y para o ferromagnéticas y líneas de desorden caracterizadas por un mínimo en la longitud de correlación.

Este estudio será realizado mediante modelos que representan a estos sistemas reales y que, mediante la abstracción de aquellas características relevantes desde el punto de vista físico, permiten describir y predecir el comportamiento de los mismos.

Los modelos que se utilizarán son modelos de espines en redes del tipo del modelo de Ising. Estos modelos fueron introducidos inicialmente para describir el comportamiento de materiales ferromagnéticos, pero actualmente son usados para estudiar las transiciones de fase de sistemas de diversos tipos.

En todos los casos se trabajó con la versión del modelo correspondiente al límite hamiltoniano, obtenida a través de la relación entre matrices de transferencia de sistemas de spin tipo Ising en $d+1$ dimensiones y Hamiltonianos cuánticos d - dimensionales a $T=0$. Con

esta elección se logra reducir la dimensión del problema en uno, pero hay que pagar un precio: hay que tratar con operadores cuánticos en lugar de las variables clásicas.

Los métodos más usados para el análisis de las transiciones de fase son: la teoría de campo promedio, el grupo de renormalización, la expansión en series de la temperatura y el método de simulaciones de Monte Carlo. Todos estos son métodos aproximados. Si bien sería siempre deseable la obtención de resultados exactos, esto sólo es posible para unos pocos modelos clásicos en dos dimensiones.

Los modelos de los sistemas que nos proponemos estudiar no presentan soluciones exactas y por lo tanto en una primer instancia es interesante obtener resultados aproximados que describan lo mejor posible el comportamiento de dichos sistemas.

Por otra parte en lo que se refiere a comparaciones con experimentos, los errores en los métodos aproximados son en general más pequeños que los correspondientes a las mediciones experimentales. Además, no siempre la solución exacta provee una comprensión más acabada de las propiedades cualitativas del modelo, como por ejemplo la derivación de Yang en el modelo bidimensional de Ising (Yang 1952) es tan compleja que no mejora el entendimiento del simple resultado numérico que permite calcular el índice crítico $\beta=1/8$. Es más, el concepto de singularidad del tipo de ley de potencias para la susceptibilidad en los modelos de Ising y Heisenberg apareció por primera vez en el trabajo numérico de C. Domb y otros (Domb 1960).

Esta tesis fue realizada con el objeto de hallar los exponentes críticos y mapas de fase característicos de los modelos analizados y, contribuir al mejoramiento de los métodos numéricos (p.ej. Monte Carlo) en modelos cuánticos de spines en la red.

Los modelos (en su versión cuántica) estudiados son:

Modelo de Potts ($q=3$) unidimensional. Presenta una transición de segundo orden y responde experimentalmente a adsorción de monocapas en superficies cristalinas, como los compuestos de grafito intercalado citados antes. Los métodos aplicados en el estudio de la transición fueron: grupo de renormalización en el espacio real, desarrollo en bajas temperaturas y método variacional de bloques.

Modelo de Blume-Capel en una y dos dimensiones cuánticas. Su característica principal es que presenta un punto tricrítico en su diagrama de fases que separa las transiciones de primer y segundo orden. Permite modelar transiciones metamagnéticas, transiciones de superfluidez en mezclas He3-He4 y cambios de fase estructurales en halogenuros. Se lo estudió por medio de los métodos de renormalización en el espacio real y variacional de bloques (Arizmendi 1986).

Por último se realizó el estudio del modelo conocido por el nombre de ANNNI (axial-next -nearest neighbour Ising) (Fisher y Selke 1980) que posee interacciones competitivas ferro y antiferromagnéticas entre primeros y segundos vecinos. Presenta una variedad de propiedades muy rica como estructuras magnéticas moduladas, transiciones entre fases commensurables e incon-

mensurables, puntos multicríticos, líneas de desorden y un punto tricrítico llamado de Lifshitz.

Este modelo describe fenómenos físicos observados recientemente como la fase ordenada magnética modulada que presenta el erbio y otras tierras raras. Además se lo puede relacionar con el antimonio de cerio que presenta capas magnéticas ordenadas con períodos conmensurables con la red.

El mapa de fase de este modelo ha sido determinado mediante el método de la matriz de transferencia, el de fermiones libres y el de variación de cluster, pero hasta ahora el método de Monte Carlo, aplicado por varios autores, había fallado en la determinación del mismo ya que predecía la existencia de un punto de Lifshitz en la frontera ferro-para, hecho que entra en contradicción con la existencia -demostrada analíticamente- de la línea unidimensional.

Una conclusión evidente es que el Monte Carlo (utilizado por estos autores) en el que se calculan las variables tradicionales, (calor específico, susceptibilidad) no resulta de utilidad para este tipo de modelos con interacciones competitivas.

Sin embargo, el cálculo de la longitud de correlación con el método de la matriz de transferencia había llevado a muy buenos resultados. Además en las simulaciones por Monte Carlo los estados estacionarios alcanzados podían ser representativos del mapa de fase correcto.

Esto nos condujo a utilizar un método de Monte Carlo diseñado para calcular funciones y longitudes de correlación para encontrar el mapa de

fases del modelo ANNNI en su versión cuántica en $(1+1)$ dimensiones. Haciendo uso de la equivalencia analítica entre la versión Hamiltoniana del modelo y la versión clásica de dos dimensiones obtenida por medio de la fórmula de Trotter se aplicó Monte Carlo sobre la versión clásica equivalente.

De esta forma se logró la primer aplicación del método de Monte Carlo al modelo ANNNI, así como a otros modelos con interacciones competitivas, en que se obtiene el mapa de fase correcto (Arizmendi 1991)

La organización de esta tesis es la siguiente:

En el capítulo I hacemos una introducción a los fenómenos críticos y a las características sobresalientes de los modelos cuánticos de espines en la red : equivalencia entre teoría de campos y mecánica estadística y relación entre modelos clásicos en $d+1$ dimensiones y modelos cuánticos en d dimensiones obtenidos como límite Hamiltoniano de los anteriores a través de la matriz de transferencia. Con esto pretendemos unificar terminología y tener un marco de referencia teórico para la descripción del trabajo.

El capítulo II se dedica a presentar los métodos que fueron usados en esta tesis. Se introducen el grupo de renormalización, desarrollos en series, método variacional y Monte Carlo estadístico cuántico. En todos los casos se ejemplifica con la aplicación al modelo de Ising transversal.

En el capítulo III se introduce el modelo de Potts y la aplicación de grupo de renormalización, desarrollo en series de bajas temperaturas y método variacional de bloques para hallar el exponente crítico β y el punto crítico

de la transición en el modelo de Potts cuántico en una dimensión. Se termina con una comparación entre los métodos y con resultados obtenidos con otros métodos numéricos.

En el capítulo IV se presenta el modelo de Blume-Capel y la aplicación, a la versión Hamiltoniana del mismo, del grupo de renormalización y del método variacional de bloques para hallar las coordenadas del punto tricrítico y los exponentes críticos en una dimensión. Por medio del grupo de renormalización se determinan también las coordenadas del punto tricrítico y los exponentes críticos en dos dimensiones cuánticas así como para la fase antiferromagnética del modelo en la que constituyen los primeros resultados conocidos. Se compara con otros métodos.

El modelo ANNNI es presentado en el capítulo V con un breve resumen de los trabajos dedicados a su análisis. Se presenta el modelo clásico bidimensional equivalente al modelo cuántico en una dimensión por medio de la fórmula de Trotter sobre el que se realizará la simulación de Monte Carlo. Luego se muestra la forma en que se determinaron las transiciones de fase y líneas características del modelo mediante la función y longitud de correlación y, a la luz de estos resultados, se interpretan los resultados erróneos obtenidos anteriormente. Finalmente se muestra el mapa de fases obtenido y se lo compara con resultados anteriores.

En el capítulo VI se enumeran las conclusiones de la Tesis.

CAPITULO N 1

TRANSICIONES DE FASE - MODELOS DE SPIN

El propósito de este capítulo es introducir los conceptos básicos de los fenómenos críticos y los modelos de spin en la red en su versión cuántica.

1.1. TRANSICIONES DE FASE Y FENOMENOS CRITICOS

El descubrimiento y la identificación de fases de sistemas físicos constituye una parte importante de la física de la materia condensada. Se toma un sistema dado, se hace variar algunos parámetros (la temperatura, la presión, los campos exteriores,...) para que aparezcan las diversas fases del sistema y explorar sus dominios de existencia, y se consigna los resultados en un diagrama: el mapa de fases.

Vamos a considerar tres mapas de fase característicos.

El primero (Fig. 1.1) es un diagrama presión-temperatura con los dominios de existencia de tres fases. Se distinguen dos puntos particulares en el diagrama ; un punto en la unión de tres fases, que es conocido como punto triple y un punto en el que finaliza la frontera entre las fases líquida y gaseosa, conocido como punto crítico. A temperaturas y presiones mayores que las del punto crítico (P_c, T_c) se pasa de forma continua de la fase líquida a la gaseosa.

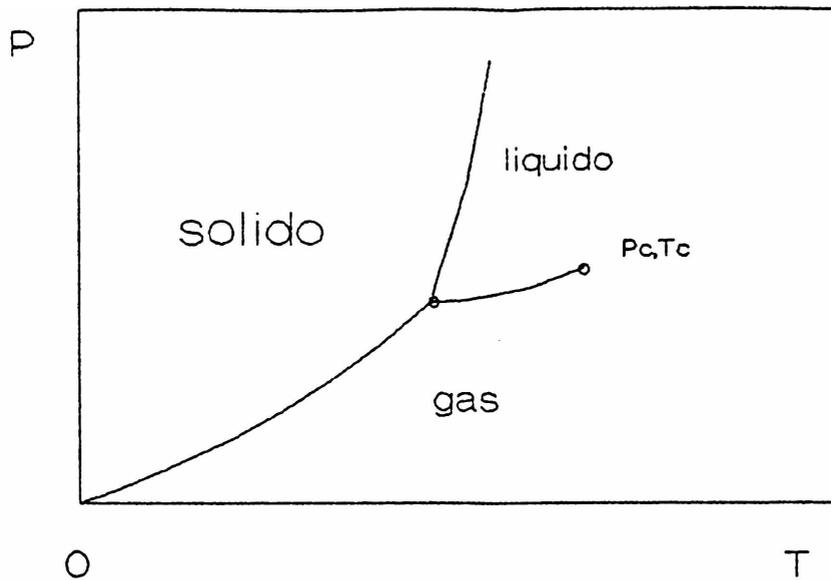


Fig. 1-1 : Diagrama de fases solido-liquido-gas.

El segundo (Fig. 1.2) es un diagrama campo magnético-temperatura para una transición de tipo ferromagnético; se observa una frontera sobre el eje horizontal que también finaliza en un punto crítico.

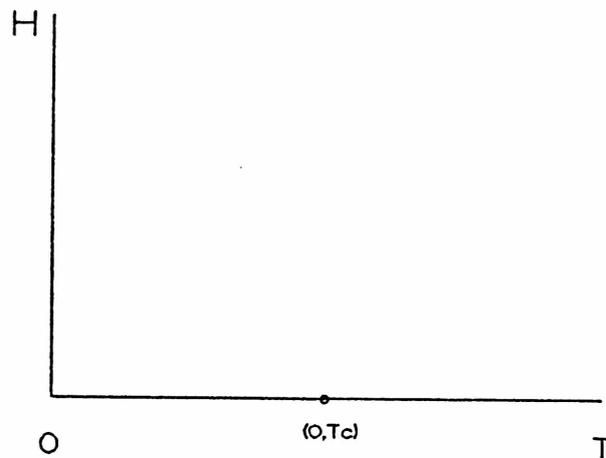


Fig. 1.2: Diagrama de fases ferromagnético.

En presencia de un campo magnético externo H distinto de cero el material presentará una magnetización no nula que indicaremos con M . Si se tiende a cero el campo H , el valor de M disminuirá, tendiendo a un valor M_0 distinto de cero, donde M_0 es la magnetización espontánea del sistema.

Si se cambia el sentido del campo H , también deberá cambiar el sentido de M . Por lo tanto la función $M(H)$ deberá ser impar, de la forma que se muestra en la figura N° 1-3

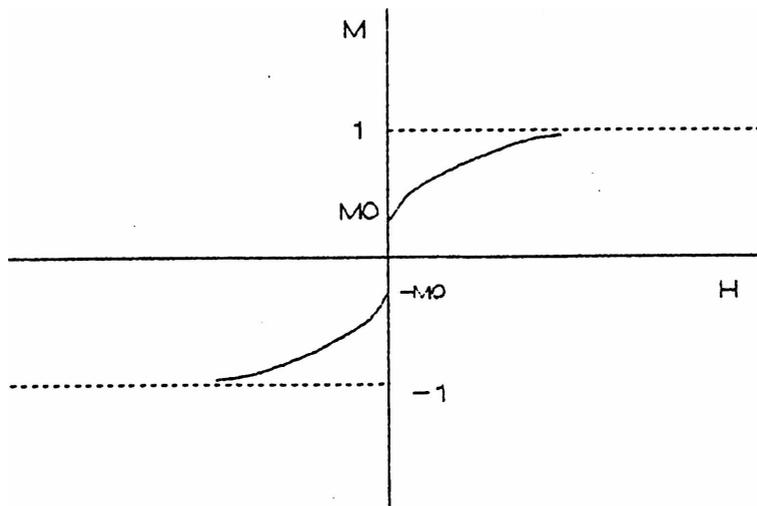


Fig. 1.3: Variación de la magnetización M en función del campo externo H para $T < T_c$

Se dice, en este caso que el sistema sufre una transición de fase de primer orden en $H=0$, cambiando repentinamente, en forma discontinua, de una magnetización positiva a una negativa.

Estas consideraciones se aplican al caso en el que el material está a

temperatura ambiente ($T < T_c$).

Si se aumenta la temperatura, se observa que $M(H)$ presenta una gráfica similar a la anterior, pero con un valor menor de M_0 . Finalmente, si la temperatura T se incrementa hasta el valor crítico T_c , llamado temperatura de Curie, M_0 se anula y $M(H)$ resulta ser una función continua en $H=0$, pero con una pendiente infinita, como se muestra en la figura siguiente:

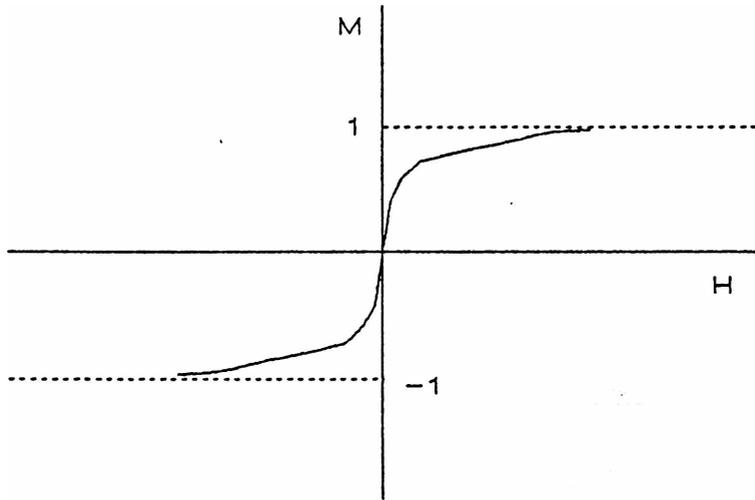


Fig. N° 1.4 Variación de la magnetización en función del campo externo
a $T=T_c$

Si T se incrementa por encima de T_c , $M(H)$ sigue siendo continua en $H=0$, pero ahora con derivadas de todo orden en ese punto que se conoce como punto crítico. Obviamente, la función $M(H,T)$ debe ser singular en ese punto, y uno de los aspectos más interesantes de la Mecánica Estadística es el estudio de

este comportamiento singular en las proximidades del punto crítico.

La transición de fase que ocurre en ese punto se denomina de segundo orden, a diferencia de las que ocurren en los demás puntos de la línea de corte, que son de primer orden.

La magnetización espontánea M_0 es una función de la temperatura, y puede ser definida como

$$M_0(T) = \lim_{H \rightarrow 0^+} M(H,T) \quad (1.1.1)$$

resultando positiva para $T < T_c$ e idénticamente nula para $T > T_c$, como puede verse en la figura siguiente.

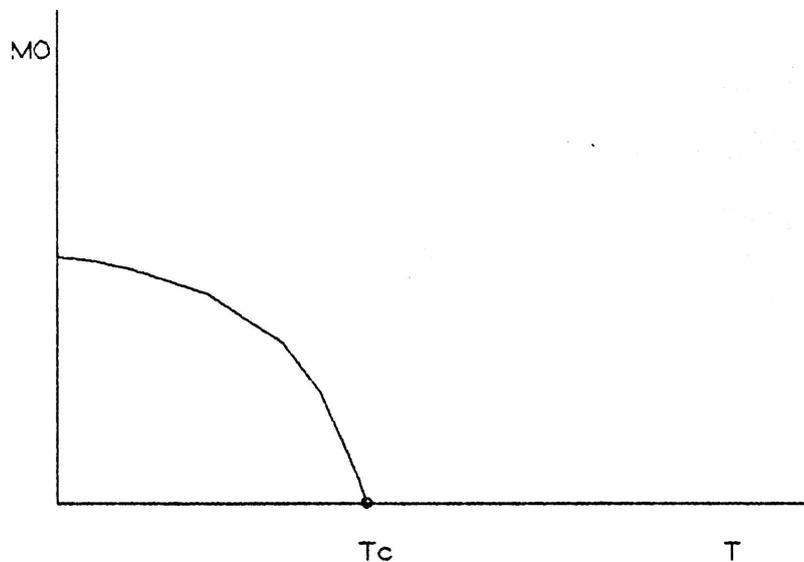


Figura N° 1.5 Magnetización espontánea en función de la temperatura

La magnitud $M_0(T)$ se conoce como parámetro de orden de la transición de fase. En la región $T < T_c$ el sistema se encuentra en un estado magnéticamente ordenado, y en ese caso el parámetro de orden resulta distinto de cero. Para $T > T_c$ se está en la zona desordenada, lo cual se manifiesta en el hecho de que el parámetro de orden se anula en esa región.

En las transiciones de primer orden, el parámetro de orden resulta discontinuo, cambiando abruptamente desde el valor $M_0 \neq 0$ a $M=0$. En las transiciones de segundo orden, en cambio, se produce un cambio continuo del mismo, desde una fase a otra.

El tercer diagrama (Fig. 1.6) es también un diagrama campo magnético-temperatura pero esta vez para un material que presenta una transición de tipo antiferromagnético (imantación alternada en la fase ordenada). Se observa en el diagrama dos fases separadas por una línea en la que se distinguen las transiciones de segundo orden o de puntos críticos (trazo continuo) y las de primer orden (trazo de guiones). El punto que separa ambos tipos de transiciones se conoce como punto tricrítico.

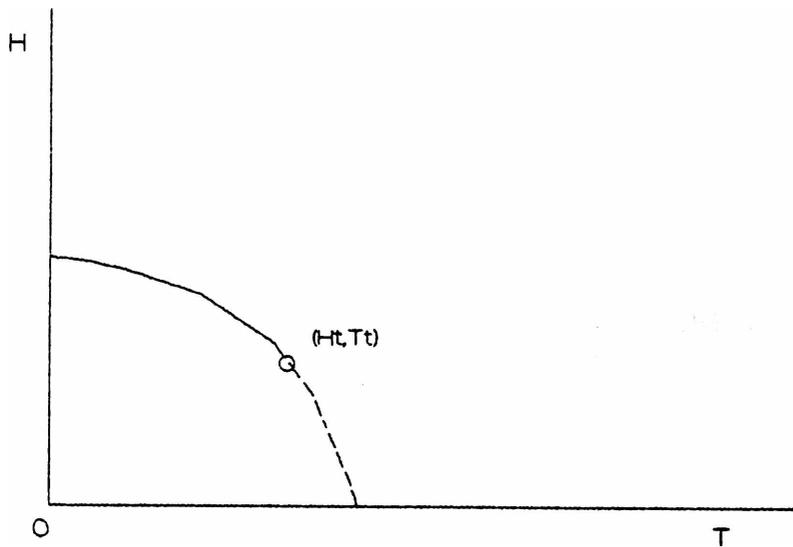


Fig. 1.6: Diagrama de fases antiferromagnético (metamagnetismo)

Estas consideraciones se aplican a cualquier tipo de transición de fase, como por ejemplo las transiciones sólido-líquido, orden-desorden en aleaciones, estado conductor-aislador, etc.

En todos los casos es posible definir un parámetro adecuado que caracterice las fases del sistema, como ocurre con M_0 en los materiales ferromagnéticos.

Podemos definir, entonces, de manera general, el parámetro de orden de un sistema como una magnitud que se anula en la fase desordenada y resulta no nulo en la región ordenada del sistema, sirviendo, de esta manera, para caracterizar las transiciones de fase que ocurren en el mismo.

La elección del parámetro de orden adecuado, en cada caso particular,

no es un problema sencillo, y no resulta posible dar un procedimiento general que permita definirlo sin ambigüedad en todos los casos.

Otra magnitud de importancia en el estudio de los fenómenos críticos es la susceptibilidad magnética, que se define como

$$\chi(H,T) = \frac{\partial M(H,T)}{\partial H} \quad (1.1.2)$$

Esta cantidad mide el grado de respuesta del sistema a la presencia de un campo externo, y resulta divergente en $H=0$ y $T=T_c$, como puede verse en la figura 1.4.

El objeto de la Mecánica Estadística es calcular las funciones termodinámicas tales como $M(H,T)$, a partir de las fuerzas microscópicas entre los componentes elementales del sistema.

Dicho cálculo se realiza a través del conocimiento de la función partición Z , la cual viene dada por

$$Z = \sum_i e^{\{-E(i)/kT\}} \quad (1.1.3)$$

donde i simboliza un estado del sistema, $E(i)$ es la energía o Hamiltoniano, calculada en el estado i , k es la constante de Boltzmann, y la suma se realiza sobre todos los estados posibles, compatibles con los vínculos externos del sistema.

La energía libre del sistema se define como

$$F = -kT \log (Z) \quad (1.1.4)$$

La probabilidad $P(i)$ de que el sistema se encuentre en el estado i se expresa a través del factor de Boltzmann

$$P(i) = Z^{-1} e^{(-E(i)/kT)} \quad (1.1.5)$$

Por lo tanto si X representa alguna propiedad observable del sistema, con un valor $X(i)$ en el estado i , entonces el promedio termodinámico observado es el valor medio $\langle X \rangle$

$$\langle X \rangle = Z^{-1} \sum_i X(i) e^{(-E(i)/kT)} \quad (1.1.6)$$

En particular, la energía interna U , por ejemplo, se expresa como

$$U = \langle E \rangle = Z^{-1} \sum_i E(i) e^{(-E(i)/kT)} \quad (1.1.7)$$

El problema básico de la Mecánica Estadística es, por lo tanto, calcular la suma sobre estados que aparece en la expresión 1-3. Para sistemas con variable continua, esta suma se convierte en una integral, y para sistemas cuánticos, en el cálculo de la traza de un operador.

Antes de continuar con la introducción de las magnitudes físicas fundamentales, es conveniente definir con más precisión el tipo de modelos que se utilizan para describir el comportamiento de un material ferromagnético.

Se considera al material como compuesto por moléculas, las cuales se encuentran ubicadas en los sitios de una red espacialmente regular.

Supondremos que dicha red consta de N sitios, y , por lo tanto, de N moléculas indicadas por un índice $i=1, \dots, N$.

Cada molécula posee un momento magnético que puede orientarse solamente a lo largo de ciertas direcciones, o en el caso más simple en dos direcciones opuestas.

En ese caso cada molécula i tiene dos configuraciones posibles o estados, los cuales pueden ser indicados por una variable de spin σ_i con valores $+1$ o -1 . El estado de los spines sera indicado por:

$$\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_N) \quad (1.1.8)$$

Existen 2^N valores de σ y cada valor especifica un posible estado del sistema. El Hamiltoniano E sera entonces una función $E(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ de los N spines $\sigma_1, \dots, \sigma_N$, o más brevemente una función $E(\sigma)$ de σ . La misma se compone de dos partes

$$E(\sigma) = E_0(\sigma) + E_1(\sigma) \quad (1.1.9)$$

donde E_0 representa la contribución de las fuerzas intermoleculares dentro del material y E_1 es la contribución eventual proveniente de las interacciones entre los espines y un campo magnético externo H .

Debido a que se elige el sistema de unidades de tal manera que σ_i representa el momento magnético de la molécula i , $E(i)$ se puede expresar como:

$$E_1(\sigma) = - H \sum_i \sigma_i \quad (1.1.10)$$

donde H es proporcional a la componente del campo en la dirección del eje de magnetización.

La función de partición será entonces una función de H , T y N dada por

$$Z_N(H,T) = \sum_{\sigma} e^{\{-[E_{\sigma}(\sigma) - H \sum \sigma_i]/kT\}} \quad (1.1.11)$$

Desde el punto de vista físico, es de esperar que la energía libre de un sistema de dimensiones macroscópicas ($N \sim 10^{23}$) sea proporcional al tamaño del sistema. Por lo tanto es razonable suponer que en el límite termodinámico, la magnitud

$$f(H,T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \log [Z_N(H,T)] \quad (1.1.12)$$

existe, donde $f(H,T)$ es la energía libre por sitio.

También resulta de utilidad definir la función partición por sitio K , dada por:

$$K = \lim_{N \rightarrow \infty} (Z_N)^{1/N} \quad (1.1.13)$$

La demostración rigurosa de la existencia de estos límites ha sido realizada para una gran variedad de modelos.

Es importante destacar que, para N finito, Z es una función suma de funciones analíticas y positivas de H y T . Por lo tanto, f y M son también funciones analíticas.

La discontinuidad que presenta M en las transiciones de primer orden y la singularidad en el punto crítico, pueden ocurrir solamente cuando se toma el límite termodinámico.

Una magnitud de fundamental importancia, como se verá en lo que sigue, en el estudio de los fenómenos críticos, es la función correlación de dos

puntos, por ejemplo entre los spins σ_i , σ_j :

$$\Gamma_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (1.1.14)$$

Si $E_0(\sigma)$ es translacionalmente invariable, como sucede con la mayoría de los modelos más usuales, entonces $\langle \sigma_i \rangle$ es independiente de i , y por lo tanto

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle = M(H,T) \quad (1.1.15)$$

Además, en ese caso Γ_{ij} dependerá solo del vector \vec{r}_{ij} que une los sitios i y j , o sea

$$\Gamma_{ij} = \Gamma(\vec{r}_{ij}) \quad (1.1.16)$$

Lejos de la zona crítica, $\Gamma(\vec{r})$ decae exponencialmente a cero cuando $|\vec{r}| \rightarrow \infty$. De una manera más precisa, si \vec{k} es un versor fijo en una dirección arbitraria, se tiene

$$\Gamma(x \vec{k}) \sim x^{-\tau} e^{(-x/\xi)} \quad (1.1.17)$$

donde τ es un número independiente de x , y ξ es la denominada longitud de correlación en la dirección \vec{k} , que resulta ser función de H y T , y es divergente e independiente de \vec{k} cuando $T \rightarrow T_c$.

Este comportamiento de la función correlación es la característica fundamental de los fenómenos críticos, ya que todas las propiedades más importantes de los mismos pueden ser explicadas a través de la divergencia de la longitud de correlación.

Esta divergencia muestra esencialmente, el carácter cooperativo de los fenómenos críticos, indicando que dos spins σ_i y σ_j se encuentran correlacionados, aún para distancias de separación muy grandes, en las proximidades del punto crítico.

Debido a que las singularidades que presentan las magnitudes físicas para $T \sim T_c$ vienen dadas, en general, por potencias de la temperatura reducida

$$t = (T - T_c) / T_c \quad (1.1.18)$$

dichas singularidades se pueden caracterizar por los llamados exponentes críticos. Consideremos una función $f(t)$ de la temperatura reducida t , la cual se supone positiva y continua para valores suficientemente pequeños de t , y que el límite siguiente existe

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \log [f(t)] / \log [t] \quad (1.1.19)$$

El parámetro λ se denomina exponente crítico asociado a la función f .

Usualmente se indica que el exponente crítico de la función es λ con la notación $f(t) \sim t^\lambda$.

Se introducen a continuación los exponentes críticos de las magnitudes más usuales:

$$\begin{aligned}
M_0(t) &\sim (-t)^\beta & t \rightarrow 0^- \\
M(H, t=0) &\sim H^{1/\delta} & H \rightarrow 0 \\
\chi(0, t) &\sim t^{-\gamma} & t \rightarrow 0^+ \\
\chi(0, t) &\sim (-t)^{-\gamma'} & t \rightarrow 0^- \\
C(0, t) &\sim t^{-\alpha} & t \rightarrow 0^+ \\
C(0, t) &\sim (-t)^{-\alpha'} & t \rightarrow 0^- \\
\xi(0, t) &\sim t^{-\nu} & t \rightarrow 0^+ \\
\xi(0, t) &\sim (-t)^{-\nu'} & t \rightarrow 0^-
\end{aligned}
\tag{1.1.20}$$

En el punto crítico, la función de correlación $\Gamma(\vec{r})$ decae como una ley potencial o algebraica, en lugar del decaimiento exponencial que ocurre fuera de la zona crítica:

$$\begin{aligned}
\Gamma(\vec{r}, T=T_c, H=0) &\sim |\vec{r}|^{-d+2-n} \\
&|\vec{r}| \rightarrow \infty
\end{aligned}
\tag{1.1.21}$$

donde d es la dimensión espacial del sistema, y n es un nuevo exponente crítico.

La notación $X \sim Y$ significa X/Y tiende a un límite no nulo. Los exponentes críticos, definidos anteriormente, son números, independientes de H y T .

Un punto de vista que resultó decisivo en la explicación de las propiedades tan particulares que presentan los fenómenos críticos, fue introducida por Kadanoff en 1965 (Kadanoff 1965). Según el mismo, la divergencia de la longitud de correlación ξ es la responsable del comportamiento singular de algunas magnitudes físicas.

Según esta hipótesis, en la región crítica, ξ es la única longitud relevante del sistema. Como ξ es muy grande para $T \sim T_c$, el sistema no es sensible en ese caso a la estructura de la red. El hecho de que los spines están correlacionados para distancias del orden ξ , y que $\xi \gg a$ (donde a es el espaciamiento de la red), domina las propiedades del sistema en la región crítica.

La aceptación de esta hipótesis lleva a una descripción física muy interesante de un material ferromagnético para $T \sim T_c$. Según esta descripción existirán regiones donde los spines están correlacionados y cuyo tamaño es del orden de ξ . A su vez, cada región de tamaño ξ que posee espines acoplados es un sistema físico suficientemente extenso como para presentar las mismas características que el sistema total. En consecuencia, este subsistema debe consistir, a su vez, de regiones de spines acoplados cuyo tamaño va desde cero hasta ξ .

De acuerdo con este punto de vista, existen fluctuaciones en el sistema, en todas las escalas de longitud desde cero hasta ξ . Si tomamos $T=T_c$, entonces $\xi(T_c)$ se hace infinita y el sistema aparecerá idéntico en todas las escalas de longitud.

Cualquier subsistema presentará, en ese caso, el mismo aspecto que el sistema total, lo cual se puede expresar de una manera más formal diciendo que el sistema resulta invariante ante transformaciones arbitrarias de escala.

De esta manera los potenciales termodinámicos deben presentar esa propiedad de invariancia, y deberán pertenecer, entonces, a la clase de

funciones homogéneas de varias variables.

Utilizando las propiedades matemáticas de estas funciones y el análisis dimensional, se deducen, entonces, una serie de relaciones entre los exponentes críticos (1.1.20), que se conocen como relaciones de escala:

$$\begin{aligned}\gamma &= \gamma' = \beta (\delta - 1) \\ \alpha + 2\beta + \gamma &= 2 \\ \nu &= \nu' && (1.1.22) \\ (2 - n)\nu &= \gamma \\ d\nu &= 2 - \alpha\end{aligned}$$

Una derivación heurística de esta hipótesis, denominada hipótesis de escala, fue dada por Kadanoff en 1966, pero sólo con el advenimiento de la teoría del Grupo de Renormalización, (Wilson 1971), se pudo lograr una explicación de la misma sobre bases sólidas.

Otro concepto fundamental en la teoría de los fenómenos críticos, es el concepto de universalidad, según el cual el comportamiento crítico de un sistema depende sólo de la dimensión espacial, del número de componentes del parámetro de orden, y de las simetrías del Hamiltoniano.

Una consecuencia de gran importancia que se deriva de la universalidad, es el hecho de que cualquier modelo que presente simetrías adecuadas puede ser utilizado para estudiar un determinado fenómeno crítico.

En este hecho fundamental radica la importancia de los modelos de spin, los cuales a pesar de su sencillez proporcionan una buena descripción teórica de los fenómenos críticos.

Se puede tener un Hamiltoniano $E(i)$ muy realista y complicado,

reducirlo a un Hamiltoniano $E_0(i)$ altamente idealizado, y obtener con este último los mismos exponentes críticos que con el primero.

Sobre esta base es que se cree que, por ejemplo, el dióxido de carbono y el modelo de Ising tridimensional tienen los mismos exponentes críticos, y, dentro del error experimental, éste parece ser el caso.

1.2. SISTEMAS DE SPIN :

La manera más general de definir un sistema de spin con variables discretas, consiste en asignar a cada uno de los N sitios de una red regular, indicados por el índice $i=1, \dots, N$, una variable s_i que puede tomar un conjunto finito de valores, por ejemplo $s_i = 1, \dots, q$, donde q es un número entero.

Una configuración del sistema viene dada por el valor de los N spins en cada uno de los sitios, y será indicada por $s = \{s_1, \dots, s_N\}$.

El Hamiltoniano E será, en general, una función arbitraria de σ .

La función de partición, de acuerdo con 1.1.3, vendrá dada por

$$Z = \sum_s e^{\{-E(s)/kT\}} \quad (1.2.1)$$

Cada modelo en particular se obtendrá especificando el valor de q y el tipo de interacciones presentes en la función $E(\sigma)$.

El ejemplo más conocido es el modelo de Ising, que se obtiene del caso general definiendo

$$E(s) = - \sum_{\langle i, j \rangle} J s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (1.2.2)$$

donde $\sum_{\langle i, j \rangle}$ indica una suma sobre todos los pares de sitios vecinos próximos de la red, \sum_i suma sobre todos los sitios y la variable s_i puede tomar valores 1 y -1.

Este modelo fue introducido por Lenz en 1920 como modelo simplificado de ferromagnetismo y fue resuelto por Ising para una dimensión donde no presenta transición de fase a temperatura finita.

1.3. MODELOS CUANTICOS - LIMITE HAMILTONIANO DE MODELOS CLASICOS

Los modelos cuánticos difieren de los clásicos fundamentalmente en que sus hamiltonianos presentan operadores cuánticos en el lugar de las variables clásicas que aparecen en los clásicos (p.ej 1.2.2).

El Hamiltoniano de espín efectivo para una cadena de espines cuánticos general se puede escribir:

$$H = -2J \sum_{i=1}^N \{ a \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + b \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + c \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \}. \quad (1.3.1)$$

σ^x, σ^y y σ^z son operadores de espín representados por las matrices de Pauli y el valor del espín se encuentra entre $1/2 \leq |\sigma| \leq \infty$. Se ha supuesto acoplamiento de espín bilineal, interacciones de vecinos más próximos solamente y la constante de intercambio efectiva J , modificada por los acoplamientos de espín en las diferentes direcciones por los factores a, b, c . El *modelo de Ising* es obtenido con $b=c=0$. El *modelo XY* poniendo $a=0$. Si $a=b=c$ se tiene simetría completa rotacional en el espacio de espín y se obtiene el

modelo de Heisenberg.

Los efectos de un campo magnético aplicado pueden ser representados mediante la suma de un término de Zeeman general $-g\beta \sum_{i=1}^N \vec{\sigma}_i$.

Otro modelo de interés, para nosotros fundamentalmente debido a que es el límite hamiltoniano del Ising clásico bidimensional, es el de *Ising transversal* (Pfeuty 1970) que resulta de tomar $b=c=0$ y retener la componente x del término de Zeeman.

Los modelos cuánticos de spin en la red tienen, debido a las diversas aplicaciones que presentan, gran importancia en física. Podemos mencionar

- Materiales magnéticos que presentan comportamiento cuasi-unidimensional que son representados por modelos cuánticos de spin en una dimensión (Bonner 1981).

- Superconductividad a altas temperaturas: Los compuestos orgánicos cuasi-1-D pueden ser descritos por modelos 1-D directamente relacionados a cadenas de spin cuánticas.

- Equivalencia de los modelos cuánticos con teorías de gauge no triviales en la red con una dimensión espacial y una temporal. Las soluciones relevantes en general tienen características solitónicas y son de interés para los físicos de partículas. Usando esta equivalencia, a través del método de la matriz de transferencia, se han encontrado las siguientes correspondencias entre la teoría de campos y la mecánica estadística de estos modelos de espines en redes (Kogut 1979) :

MECANICA ESTADISTICA	TEORIA DE CAMPOS
Energía libre	Energía del vacío
Función correlación	Propagador
(long. de correlación) ⁻¹	Gap de masa

Tabla 1.1

Estas equivalencias van a ser usadas en esta tesis ,ya que se va usar nomenclatura de teoría de campos o de mecánica estadística indistintamente.

- Equivalencia de modelos clásicos de espin en D+1 dimensiones con modelos cuánticos a temperatura cero en D dimensiones en el límite conocido como Hamiltoniano (Fradkin 1978).Esta equivalencia es de importancia para nosotros, ya que en esta tesis se analizaron modelos cuánticos obtenidos como límite hamiltoniano de modelos de spin clásicos.Como introducción de la formulación hamiltoniana de un modelo clásico de spines en la red se presenta a continuación la construcción del modelo cuántico equivalente al modelo clásico de Ising.El objetivo es reducir la dimensión del problema en uno, en el caso que veremos, de dos a una dimensión.Esto se logra mediante la matriz de transferencia, pero hay que pagar un precio : En la formulación unidimensional hay que tratar con operadores en lugar de las variables clásicas del caso bidimensional.

Para considerar el modelo clásico de Ising tomemos una red bidimensional y coloquemos variables $s(n)$ en los sitios. Identifiquemos una dimensión como la temporal, caracterizada por el paso de red τ y la otra como la espacial con el paso x . La Acción será

$$S = - \sum_n [\beta_\tau s(n+\tau)s(n) + \beta s(n+x)s(n)], \quad (1.3.2)$$

donde el acoplamiento temporal β_τ y el espacial β son parámetros libres. A menos de una constante es conveniente escribir la Acción de la forma

$$S = 1/2\beta_\tau \sum [s(n+\tau)-s(n)]^2 - \beta \sum s(n+x)s(n). \quad (1.3.3)$$

A efectos de construir la matriz de transferencia y encontrar el Hamiltoniano del límite τ continuo de este modelo consideremos dos filas espaciales vecinas y llamemos a los espines en una fila $s(m)$ y a los de la otra $s'(m)$ (ver Fig. 1.7).

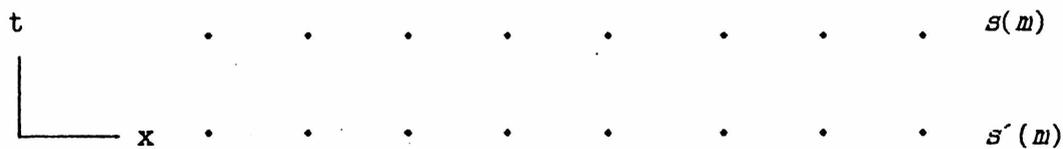


Fig.1.7 variables de espin en filas espaciales adyacentes del modelo de Ising bidimensional.

La Acción se puede escribir como una suma sobre estas filas

$$S = \sum_{n_0} L(n_0+1, n_0), \quad (1.3.4)$$

donde $L = 1/2\beta_\tau \sum_m [s(m)-s'(m)]^2 - 1/2\beta \sum_m [s(m)s(m+1) + s'(m)s'(m+1)]$.

$$(1.3.5)$$

La matriz de transferencia se puede asimilar al "propagador" en la dirección temporal.

$$\hat{T} = e^{-\hat{H}\tau} \quad (1.3.6)$$

Los elementos diagonales de la matriz de transferencia entre estas dos filas estarán caracterizados por $s(m)=s'(m)$ para todo m , esto corresponde a

$$L(0 \text{ flip}) = -\beta \sum_m s(m)s(m+1). \quad (1.3.7)$$

Si hay un solo espin diferente entre las dos filas

$$L(1 \text{ flip}) = 2\beta\tau - 1/2\beta \sum_m [s(m)s(m+1) + s'(m)s'(m+1)], \quad (1.3.8)$$

y si hay n diferentes

$$L(n \text{ flips}) = 2n\beta\tau - 1/2\beta \sum_m [s(m)s(m+1) + s'(m)s'(m+1)]. \quad (1.3.9)$$

Ahora debemos ver como se deben ajustar $\beta\tau$ y β para que la matriz de transferencia cumpla con

$$\hat{T} = e^{-\hat{H}\tau} \approx 1 - \tau\hat{H} + \dots, \quad (1.3.10)$$

cuando $\tau \rightarrow 0$. Para ello se debe cumplir:

$$\hat{T}(0 \text{ flip}) = \exp\{\beta \sum_m s(m)s(m+1)\} \approx 1 - \tau\hat{H}|_{0 \text{ flip}} \quad (1.3.11)$$

$$\begin{aligned} \hat{T}(1 \text{ flip}) &= \exp(-2\beta\tau) \times \exp\{1/2\beta \sum_m [s(m)s(m+1) + s'(m)s'(m+1)]\} \\ &\approx -\tau\hat{H}|_{1 \text{ flip}} \end{aligned} \quad (1.3.12)$$

y en general

$$\hat{T}(n \text{ flips}) = \exp(-2n\beta\tau) \times \exp\{1/2\beta \sum_m [s(m)s(m+1) + s'(m)s'(m+1)]\} \approx -\tau\hat{H}|_{n \text{ flip}} \quad (1.3.13)$$

De (1.3.11) se tiene

$$\beta \sim \tau, \quad (1.3.14)$$

y de (1.3.12),

$$\exp(-2\beta\tau) \sim \tau. \quad (1.3.15)$$

Por lo tanto β y $\exp(-2\beta\tau)$ deben ser proporcionales. Llamando a la constante de proporcionalidad λ

$$\beta = \lambda \exp(-2\beta\tau). \quad (1.3.16)$$

Se puede identificar el paso temporal

$$\tau = \exp(-2\beta\tau), \quad (1.3.17)$$

de forma tal que el acoplamiento entre espines en la dirección espacial es

$$\beta = \lambda\tau. \quad (1.3.18)$$

Estos resultados muestran que para definir una teoría de τ continuo, los acoplamientos se deben ajustar de forma que el acoplamiento temporal crezca en la medida que el espacial disminuye.

Las ecuaciones (1.3.11), (1.3.12) y (1.3.13) en términos de λ quedan

$$\hat{T}(0 \text{ flip}) \approx 1 + \tau [\lambda \sum_m s(m)s(m+1)] = 1 - \tau \hat{H}|_{0 \text{ flip}}, \quad (1.3.19)$$

$$\hat{T}(1 \text{ flip}) \approx \tau \approx -\tau \hat{H}|_{1 \text{ flip}}, \quad (1.3.20)$$

$$\hat{T}(n \text{ flip}) \approx \tau^n \approx -\tau \hat{H}|_{n \text{ flips}}. \quad (1.3.21)$$

Para que se cumplan estas ecuaciones se debe escribir \hat{H} con operadores. Se coloca un operador de espín de Pauli σ^z en cada sitio m y uno de espín flip σ^x , de forma que el Hamiltoniano queda

$$\hat{H} = - \sum_m \sigma^x(m) - \lambda \sum_m \sigma^z(m)\sigma^z(m+1). \quad (1.3.22)$$

Llegamos a un Hamiltoniano cuántico unidimensional que es el del modelo de Ising en un campo magnético transversal (Pfeuty 1970). En este modelo $1/\lambda$ es una variable que juega el papel de la temperatura en el modelo clásico, lo que se puede ver considerando que σ^x es el elemento desordenador en contrapartida con el término de interacción que es el que tiende a que todos los espines se alineen.

En este capítulo se presentaron las características fundamentales de

las transiciones de fase de segundo orden .Luego se introdujeron los modelos cuánticos de espin y sus propiedades fundamentalmente la equivalencia , a través del formalismo de matriz de transferencia ,entre modelos clásicos de espin en $d+1$ dimensiones y modelos cuánticos a $T=0$ en el límite Hamiltoniano.

CAPITULO N 2

MÉTODOS

En este capítulo se describen los métodos aplicados para la resolución de los distintos modelos cuánticos en esta tesis.

2.1 METODO DE GRUPO DE RENORMALIZACION

El grupo de renormalización (RG) ha servido para resolver algunos de los problemas más difíciles de la Física. Estos problemas abarcan un amplio espectro de temas que van desde la Teoría de Campos Fundamentales a los fenómenos críticos en materia condensada. Todos estos problemas tienen en común un número enorme de grados de libertad.

Esta característica no es nueva para los físicos que están acostumbrados a tratar a gases, líquidos o cristales con números típicos de 10^{23} partículas. Sin embargo en condiciones normales los 10^{23} grados de libertad no son importantes ya que se pueden reconstruir las propiedades físicas del sistema macroscópico a partir de las propiedades microscópicas del mismo. Por ejemplo el comportamiento macroscópico de un líquido con 10^{23} moléculas (energía por unidad de volumen, densidad, etc.) puede ser entendido a través de la dinámica de algunas moléculas del mismo líquido.

Existen fenómenos en los cuales esta simplificación no es válida. Dichos problemas sólo pudieron ser resueltos mediante RG. En ellos participan con igual importancia fenómenos de diferentes escalas de longitud.

Se llama longitud de correlación en un sistema extendido con fuerzas de corto alcance a la distancia (medida en unidades de la longitud característica de las interacciones) máxima en la que las variables dinámicas sienten efectos mutuos. En mecánica estadística se puede pensar como el tamaño mínimo que uno puede tomar de un sistema sin cambiar cualitativamente sus propiedades. Así, el líquido que se puede describir con una pequeña muestra se caracteriza por una longitud de correlación ξ muy chica permitiendo que el sistema pueda tratarse con diversos métodos: Desarrollos perturbativos, Hartree Fock, etc. En cambio existe una clase importante de fenómenos que involucran muchos grados de libertad en la región de longitud de correlación. Por ejemplo en el punto crítico de una transición de fase la longitud de correlación ξ diverge. Son precisamente estos fenómenos los que fueron resueltos por medio de técnicas de RG ya que son cualitativamente diferentes de aquellos con sólo unos pocos grados de libertad en la longitud de correlación. Mientras en éstos últimos el comportamiento del sistema está determinado por el tipo y magnitud de las interacciones presentes, en los fenómenos en los que participan muchos grados de libertad los efectos cooperativos son mucho más importantes que el detalle de las interacciones. Esto conduce a la universalidad, o sea que distintos sistemas físicos presenten el mismo comportamiento crítico.

El tratamiento de un problema mediante RG tiene dos ingredientes fundamentales. La primera consiste en reemplazar los grados de libertad originales por un conjunto menor de grados de libertad efectivos. Esta reducción puede ser esquematizada con un ejemplo de un sistema de espines con espacia-

do L_0 y con interacciones de corto alcance descritas por un hamiltoniano \mathcal{H}_0 . Los nuevos grados de libertad pueden ser espines con espaciado $2L_0$ o una densidad de magnetización $M(x)$ dependiendo de una variable continua x y se pide que $M(x)$ sólo contenga fluctuaciones de longitudes de onda mayores que $2L_0$. Esta reducción de grados de libertad es llevada a cabo iterativamente de forma que en cada paso se construyan interacciones efectivas $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \text{etc.}$ que la idea del RG requiere que sean locales, o sea que acoplen los nuevos grados de libertad como los originales. Este proceso se continúa hasta que la separación de grados de libertad efectivos sea del orden de la longitud de correlación ξ . En general esto requiere aproximaciones adecuadas que permitirán que \mathcal{H}_n pueda ser obtenido a partir de \mathcal{H}_{n-1} .

La segunda componente de RG tiene que ver con el objetivo de explicar la forma en que aparece el comportamiento cooperativo. Este debe aparecer en las iteraciones sucesivas del RG. El cambio de escala que se mencionó antes se puede ver como un mapeo de los distintos Hamiltonianos efectivos:

$$\tau(\mathcal{H}_{n-1}) = \mathcal{H}_n .$$

El comportamiento cooperativo que aparece, por ejemplo en el punto crítico, debe ser independiente de la escala. Esto se refleja en la transformación τ cuando

$$\tau(\mathcal{H}^*) = \mathcal{H}^* ,$$

o sea en el o los puntos fijos de la transformación. Si hay varios puntos fijos, cada uno tendrá su dominio de atracción y sus características que determinarán su clase de universalidad.

Existen diferentes maneras de formular el RG. La versión original intro-

ducida por Wilson (ver p.ej. Wilson y Kogut,1974)es aplicable a modelos de espines continuos o clásicos .

Con respecto a los modelos cuánticos de espines en la red ,debido a la no-conmutatividad de los operadores cuánticos ,la versión en el espacio real del RG (Niemeijer y Van Leeuwen 1976) es la más apropiada .

Vamos a presentar una realización del RG en el espacio real (Epele - 1981a) aplicable fundamentalmente a modelos cuánticos de espines en la red y que permite la obtención analítica de la transformación de las constantes de acoplamiento del modelo bajo el cambio de escala y por lo tanto de los exponentes críticos del mismo .

La característica principal de esta realización de RG es considerar bloques de espin (ver Fig.2.1) en los que el espin central interviene en todas las interacciones de espines vecinos próximos en el bloque.De esta forma es posible desacoplar el Hamiltoniano del bloque en las variables de los sitios periféricos tomando autoestados de los operadores de interacción con respecto al espin central y así llegar a expresiones analíticas del RG. Además ,de igual forma que en el método de bloques de Fernández Pacheco (Fernández Pacheco 1979) es posible mantener un equilibrio entre sitios y uniones que preserva la autodualidad del modelo y permite estudiar la fase antiferromagnética sin considerar acoplamientos de orden más alto.

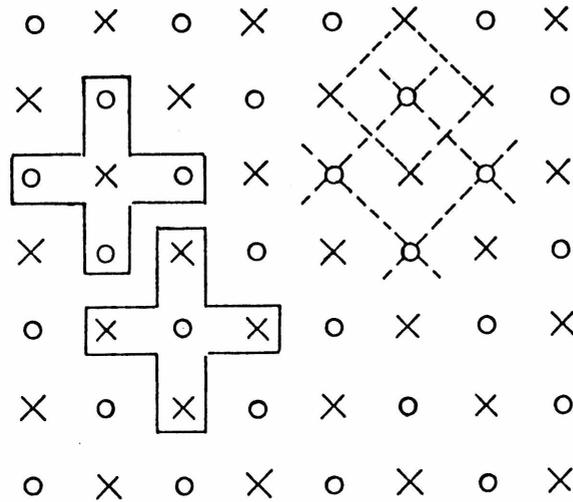


Fig.2.1 Bloques de spin para $d=2, \zeta =4$. Las subredes interpenetradas son indicadas por líneas de guiones

Se presentará como ejemplo su aplicación al modelo de Ising transversal (Epele 1981a) en d dimensiones. El Hamiltoniano será entonces:

$$H = \sum_n -k_x \sigma_x(n) - k_z \sigma_z(n)\sigma_z(n+1) + h \sigma_z(n) . \quad (2.1.1)$$

El Hamiltoniano del bloque (ver Fig.2.1) será:

$$H_b = -k_x \sum_{i=1}^{\zeta} \sigma_x(i) - k_z \sigma_z(0) \sum_{i=1}^{\zeta} \sigma_z(i) + h \sum_{i=1}^{\zeta} \sigma_z(i) , \quad (2.1.2)$$

donde el espin central es el de $i=0$ y ζ es el número de coordinación de la red. En la Fig.2.1 se muestra el bloque correspondiente a la red cuadrada. También se puede ver que la elección de los bloques y el balance sitio-link permite distinguir dos conjuntos de sitios correspondientes a las subredes de la fase antiferromagnética.

La elección de los autoestados de σ_z para el spin central del bloque

permite obtener la siguiente expresión para el Hamiltoniano del bloque

$$H_B = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{\zeta} \mathcal{H}(kz) & 0 \\ 0 & \sum_{i=1}^{\zeta} \mathcal{H}(-kz) \end{bmatrix}, \quad (2.1.3)$$

con

$$\mathcal{H}(kz) = \begin{bmatrix} -kz + h & -kz \\ -kz & kz - h \end{bmatrix} \quad i=1, \dots, \zeta \quad (2.1.4)$$

Aquí se puede apreciar que ya está desacoplada la interacción del espín central con los periféricos. Se diagonaliza y se realiza el truncado de grados de libertad manteniendo los dos autoestados más bajos de H_B que son

$$|\uparrow\rangle = |+\rangle \prod_{i=1}^{\zeta} |\phi(kz)\rangle_i \quad (2.1.5)$$

y

$$|\downarrow\rangle = |-\rangle \prod_{i=1}^{\zeta} |\phi(-kz)\rangle_i \quad (2.1.6)$$

$|\phi(kz)\rangle_i$ es el autovector de $\mathcal{H}(kz)$ con autovalor $-\lambda(kz)$ y está dado por

$$|\phi(kz)\rangle_i = [1 + a^2(kz)]^{-1/2} [-a(kz)|+\rangle + |-\rangle] \quad (2.1.7)$$

$$\text{donde } a(kz) = [-kz + h - \lambda(kz)] / kz \quad (2.1.8)$$

$$\text{y } \lambda(kz) = [kz^2 + (kz - h)^2]^{1/2} \quad (2.1.9)$$

De estas ecuaciones se obtiene

$$H|\uparrow\rangle = -\zeta\lambda(kz)|\uparrow\rangle ,$$

$$H|\downarrow\rangle = -\zeta\lambda(-kz)|\downarrow\rangle . \quad (2.1.10)$$

Luego se debe construir el Hamiltoniano escaleado o "entre bloques" en la base truncada. Para ésto se debe considerar la interacción entre bloques

$$V_{\langle j,j'\rangle} = k\sigma_x^j(0) - k\sigma_z^j\sigma_z^{j'} + h\sigma_z^j(0) , \quad (2.1.11)$$

j y j' son dos bloques vecinos próximos .El Hamiltoniano renormalizado será

$$H' = -k'\sum_j \sigma_x(j) - k'\sum_j \sigma_z(j)\sigma_z(j') + h'\sum_j \sigma_z(j) + \sum_j \varepsilon'I(j), \quad (2.1.12)$$

de esta forma se llega a la expresión de las constantes renormalizadas (primadas) en función de las iniciales.

$$k' = k \left[\frac{1 + a(kz)a(-kz)}{[1+a^2(kz)]^{1/2}[1+a^2(-kz)]^{1/2}} \right]^\zeta ,$$

$$k' = k \frac{\zeta-1}{4} \left[\frac{a^2(kz)-1}{1+a^2(kz)} - \frac{a^2(-kz)-1}{1+a^2(-kz)} \right]^2 , \quad (2.1.13)$$

$$h' = h - \frac{\zeta}{2}[\lambda(kz)-\lambda(-kz)]$$

$$- \frac{kz(\zeta-1)}{2} \left[\left[\frac{a^2(kz)-1}{1+a^2(kz)} \right]^2 - \left[\frac{a^2(-kz)-1}{1+a^2(-kz)} \right]^2 \right] . \quad (2.1.14)$$

Introduciendo las constantes de acoplamiento relativas

$$\eta = kz/k \quad \text{y} \quad \mu = h/k , \quad (2.1.15)$$

queda

$$a(\eta) = -\eta - [1 + \eta^2]^{1/2}, \quad (2.1.16)$$

y la expresión del flujo de η bajo el RG es una expresión analítica que depende solamente del número de coordinación de la red ζ . En el caso $h=0$ se obtiene que el punto fijo de esa transformación cumple:

$$(\zeta-1)\eta^{*2}(1 + \eta^{*2})^{(\zeta-2)/2} = 1. \quad (2.1.17)$$

El autovalor térmico se encuentra linealizando las ecuaciones de RG alrededor de este punto fijo, así se obtiene

$$\lambda_T = 3 + (\zeta-2)\eta^{*2}/(1+\eta^{*2}). \quad (2.1.17)$$

Dado que la ecuación (2.1.16) depende de η^{*2} , se obtendrán dos soluciones para η^* . Como $h < 0$ corresponde a la región antiferromagnética del modelo, la solución negativa de (2.1.16) será el punto fijo antiferromagnético mientras que el valor positivo presentará el comportamiento ferromagnético. En la Tabla 2.1 se pueden ver los resultados obtenidos por este método para el autovalor térmico y exponente crítico para distintos valores de números de coordinación y su comparación con los valores exactos para $\zeta=2$ y con resultados obtenidos por desarrollo en altas temperaturas.

Cuando el campo longitudinal h no es nulo se obtiene el autovalor magnético λ_H de la linealización de las ecuaciones de RG en la dirección del parámetro relevante μ y en el punto fijo ($\eta = \eta^*$, $\mu = 0$)

$$\lambda_H = \frac{1}{\zeta-1} \frac{1 + \eta^{*2}}{\eta^{*2}} \left[1 + \zeta \eta^{*2}/(1+\eta^{*2})^{1/2} + 2(\zeta-1)\eta^{*2}/(1+\eta^{*2})^2 \right]. \quad (2.1.18)$$

Los valores obtenidos de λ_H e μ_H se muestran en la Tabla 2.1. Como era de esperar se obtiene un autovalor irrelevante ($\lambda_H < 1$) para la fase antiferromagnética.

ζ	λ_T	μ_T	$\mu_T(ex)$	λ_H^F	μ_H^F	$\mu_H^F(ex)$	λ_H^A
2	3.0	1.0	1.0	5.828	1.605	1.875	0.172
3	3.296	0.86	0.8	5.859	1.275	1.25	0.341
4	3.417	0.764	0.80	6.098	1.123	1.25	0.261

Tabla 2.1 Autovalores y exponentes críticos obtenidos para distintos números de coordinación ζ . También se muestran los exactos ($\zeta=2$) y los obtenidos con desarrollo en altas T ($\zeta=3,4$).

2.2 DESARROLLO EN SERIES

Los métodos de desarrollo en series se basan en la teoría de perturbaciones. Sin embargo en la mayor parte de los problemas donde se usa teoría de perturbaciones se acepta un cálculo de primer o segundo orden. Por el contrario en las aplicaciones de desarrollos en series en transiciones de fase se necesita estimar la contribución de muchos términos y esto hace necesario una prueba que el desarrollo converge y un método para estimar la magnitud de los términos restantes. En general no hay una prueba rigurosa que las series con que se trabaja sean convergentes ni tampoco se dispone de métodos que permitan estimar la magnitud de los términos remanentes. La estrategia recomendada a seguir es (Stanley 1971) :

- a) Calcular L términos de la serie
- b) Hacer una predicción concerniente al comportamiento límite basada en estos L términos
- c) Hacer una estimación de la serie extendida
- d) Tomar como límites de error la diferencia entre las predicciones de los pasos b) y c)

A pesar de que no hay garantía que las predicciones de las aproximaciones sucesivas converjan al resultado correcto, se confía en estos métodos porque cuando se aplican a casos en los que se conoce la solución exacta se encuentra que las predicciones son extremadamente buenas. Además no se conoce el caso en que las predicciones converjan a un valor incorrecto. Por otro

lado el método de desarrollo en serie ha dado estimaciones precisas de temperaturas críticas. En transiciones de primer orden y puntos tricríticos se ha obtenido precisiones comparables a las del método de Monte Carlo (Wang, 1984).

2.2.1 DESARROLLO EN SERIE EN BAJAS TEMPERATURAS - MAGNETIZACION EN EL MODELO DE ISING TRANSVERSAL

Hay muchas magnitudes termodinámicas de interés que se obtienen usando desarrollo en serie; como en todas se siguen procedimientos parecidos, vamos a mostrar un ejemplo simple en el que se calcula la magnetización y el exponente crítico β , que luego se aplicará al modelo de Potts.

El modelo a considerar es el de Ising transversal con Hamiltoniano:

$$H = \sum_n -\lambda \sigma_z(n)\sigma_z(n+1) - \sigma_x(n), \quad (2.2.1)$$

donde σ_x y σ_z son las matrices de Pauli y $\lambda^{-1} \sim T$ como se vió en el Cap.1. El cálculo se realizará alrededor de $\lambda^{-1} = 0$, donde se sabe que el sistema está magnetizado y se desarrolla una serie de perturbaciones en potencias de λ^{-1} . Para esto es conveniente usar el operador W

$$W = \sum_n 1 - \sigma_z(n)\sigma_z(n+1) - 1/\lambda \sigma_x(n) \quad (2.2.2)$$

e incorporar el campo externo h

$$W \rightarrow W + h \sum_n \sigma_z(n); \quad (2.2.3)$$

para realizar el cálculo perturbativo se descompone W en :

$$W = W_0 + 1/\lambda V, \quad (2.2.4)$$

donde

$$H_0 = \sum_n 1 - \sigma_z(n)\sigma_z(n+1) + h \sum_n \sigma_z(n) , \quad (2.2.5)$$

$$V = - \sum_n \sigma_x(n) . \quad (2.2.6)$$

El estado fundamental de H_0 sería degenerado si $h = 0$, teniendo todos los espines "up"

$$\sigma_z(n)|0\rangle = |0\rangle \text{ para todo } n , \quad (2.2.7)$$

o todos "down"

$$\sigma_z(n)|0\rangle = -|0\rangle \text{ para todo } n . \quad (2.2.8)$$

El operador σ_x actúa como operador de "spin-flip". Eligiendo h pequeño y negativo se rompe la simetría y se selecciona el estado fundamental con todos los espines "up" . La perturbación V invierte espines en este estado fundamental. A medida que se asciende a órdenes más altos en $1/\lambda$ se encontrarán estados intermedios con más espines invertidos.

Para hallar la magnetización

$$M = 1/N \langle \Phi | \sum_n \sigma_z | \Phi \rangle , \quad (2.2.9)$$

donde $|\Phi\rangle$ es un autoestado de W (2.2.2) , notemos que al incorporar el campo externo h a W (2.2.3), se obtiene

$$\langle \Phi | \sum_n \sigma_z | \Phi \rangle = \frac{\partial}{\partial h} E(h) |_{h=0} \quad (2.2.10)$$

$$\text{y por lo tanto } M = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial h} E(h) |_{h=0} . \quad (2.2.11)$$

Para hallar $E(h)$, la energía del estado fundamental , necesitamos los términos de la teoría de perturbaciones a un orden alto. El desarrollo de la energía de un estado $|a\rangle$, cuya energía de orden cero es ϵ_0 , es :

$$E_a = \epsilon_0 + \epsilon_1 \lambda^{-1} + \epsilon_2 \lambda^{-2} + \epsilon_3 \lambda^{-3} + \epsilon_4 \lambda^{-4} + \dots , \quad (2.2.11)$$

donde

$$\epsilon_1 = \langle a | V | a \rangle,$$

$$\epsilon_2 = \langle a | VgV | a \rangle,$$

$$\epsilon_3 = \langle a | VgVgV | a \rangle - \langle a | V | a \rangle \langle a | Vg^2 | a \rangle,$$

$$\begin{aligned} \epsilon_4 = & \langle a | VgVgVgV | a \rangle - \langle a | VgV | a \rangle \langle a | Vg^2 | a \rangle + \langle a | V | a \rangle \langle a | V | a \rangle \langle a | Vg^3 | a \rangle \\ & - \langle a | V | a \rangle \langle a | VgVg^2V + Vg^2VgV | a \rangle \end{aligned}$$

$$y \quad g = (1 - |a\rangle\langle a|) / (\epsilon_0 - \hbar b). \quad (2.2.12)$$

A orden cero tenemos Nh , con N el número de sitios de la red. No hay término de primer orden porque $\langle 0 | V | 0 \rangle$ se anula. A segundo orden aparece una doble aplicación de V sobre el estado fundamental que dará contribución no nula si el espín flipeado en la primera es vuelto a su posición original en la segunda. Un diagrama representando esta contribución se muestra en la Fig.2.2.1 y su valor es:

$$\text{Fig.2.2.1} = [N/(2h - 4)](1/\lambda^2). \quad (2.2.13)$$

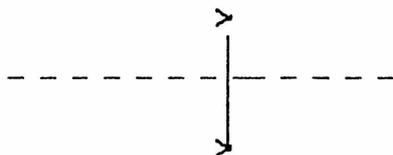


Fig. 2.2.1 Contribucion de segundo orden al desarrollo $1/\lambda$

No hay contribuciones de tercer orden (en general no hay contribuciones de orden impar). A cuarto orden hay dos tipos de contribuciones que consisten en que los dos espines que son invertidos sean o no vecinos. Si no lo son, se rompen cuatro ligaduras, en cambio si son vecinos sólo dos se rompen (ver

Fig. 2.2.2).



Fig.2.2.2 Contribuciones de cuarto orden a $E_0(h)$: a) espines no vecinos
b) espines vecinos

Las contribuciones son:

$$\text{Fig. 2.2.2 (a)} = \frac{2N(N-3)}{(-4+2h)^2(-8+4h)} (1/\lambda)^4, \quad (2.2.14)$$

$$\text{Fig. 2.2.2 (b)} = \frac{4N}{(-4+2h)^2(-4+4h)} (1/\lambda)^4. \quad (2.2.15)$$

y por último está el término

$$- \langle a | V_G V | a \rangle \langle a | V_G^2 V | a \rangle = - \frac{N^2}{(-4+2h)^3} (1/\lambda)^4. \quad (2.2.16)$$

Este término tiene como efecto restar el término en N^2 y asegurar que la energía del vacío sea extensiva, o sea proporcional a N .

Contando todas estas contribuciones se obtiene

$$E_0(h)/N = h + [1/(2h-4)](1/\lambda^2) + [1/(2h-4)^2] \left[\frac{6}{(4h-8)} + \frac{4}{(4h-4)} \right] (1/\lambda^4)$$

$$+ \dots \quad (2.2.17)$$

De esta expresión obtenemos la serie para la magnetización

$$M = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial h} B(h) \Big|_{h=0} = 1 - \frac{1}{8} (1/\lambda^2) - \frac{7}{128} (1/\lambda^4) - \dots \quad (2.2.18)$$

Sabemos que la magnetización se debe anular en la región crítica como una potencia de $(\lambda - \lambda_c)$. Para ver si esto se cumple y hallar esta potencia, que estará directamente relacionada con el exponente crítico β , el método más común utilizado es el llamado del cociente (Stanley 1971).

Si se tiene una serie

$$f(x) = \sum_n a_n x^n, \quad (2.2.19)$$

para una función $f(x)$ que presenta una singularidad de la forma

$$f(x) \underset{x \rightarrow x_c}{\sim} b(x-x_c)^{-\gamma}, \quad x < x_c. \quad (2.2.20)$$

La serie de Taylor para esta función es

$$f(x) \sim b x_c^{-\gamma} \left[1 + \gamma (x/x_c) + \frac{\gamma(\gamma+1)}{2!} (x/x_c)^2 + \dots + \frac{\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+1-1)}{l!} (x/x_c)^l + \dots \right]. \quad (2.2.21)$$

Se verifica el comportamiento de potencia en el cociente de dos coeficientes sucesivos

$$R = a_l/a_{l-1} = (1/x_c) [1 + (\gamma-1/l)]. \quad (2.2.22)$$

Se puede estimar así el punto crítico y el índice crítico γ ya que un

gráfico de R en función de $1/l$ va a dar una recta con intersección x_c^{-1} y pendiente $1/l$. De esta forma se obtiene para el modelo de Ising transversal que estamos considerando $\lambda_c=1$ y $\beta = -\gamma = 1/8$ que coinciden con los de la solución exacta (Pfeuty 1970). Cabe resaltar que no siempre se obtiene el resultado exacto con el desarrollo en serie, sino que en este ejemplo los resultados exactos son funciones de los parámetros del desarrollo λ , lo que permitió obtenerlos con este método aproximado.

2.3. METODO VARIACIONAL

2.3.1 INTRODUCCION

En esta sección vamos a describir el método variacional que emplearemos en los modelos de Potts y de Blume Capel. Este método está basado en la filosofía de bloques de spin, concepto introducido en el célebre artículo de Kadanoff (Kadanoff 1965), y por lo tanto podría encuadrarse, (en una clasificación general) dentro de las técnicas de renormalización en el espacio real. Tempranamente se hizo la observación (Quinn 1982) que estos métodos son una forma de cálculo variacional de Rayleigh-Ritz.

El método de resolución por bloques de spin, cuyo representante tradicional en sistemas hamiltonianos es el propuesto por Drell, Weinstein y Yankielowicz (Drell 1976), consiste en construir progresivamente la función de ondas de un bloque de tamaño 2^n mediante pasos sucesivos en los que se resuelven bloques de $2, 2^2, 2^3$, etc. sitios. Partiendo en cada paso de la etapa anterior, resulta la posibilidad de establecer correlaciones no triviales entre espines alejados, pues el resultado final es una función de ondas de un sistema de muchos grados de libertad.

El método variacional que vamos a describir a continuación, llamado método variacional iterativo (MVI) por sus creadores (Abad, 1986) está pensado de forma de construir aproximadamente los estados de mínima energía de una teoría en la red. La principal diferencia que presenta con el método original de bloques es que, mientras en este último se estudia el flujo de las constantes de acoplamiento de los sucesivos hamiltonianos efectivos, en

el MVI se considera solamente los elementos de matriz indispensables para pasar al paso siguiente ,empleando siempre el mismo hamiltoniano.

Se podría hacer una analogía de esta transformación a bloques cada vez más grandes con el seguimiento de la evolución temporal en Mecánica Cuántica. En Mecánica Cuántica en la representación de Heisenberg evolucionan en el tiempo los operadores, permaneciendo fijos los estados ,mientras que en la de Schrödinger los que cambian en el tiempo son los estados. Según esta analogía el método de Drell sería el equivalente de la representación de Heisenberg, ya que evoluciona (en la renormalización del bloque) el Hamiltoniano efectivo ,mientras que el MVI se asimila a la de Schrödinger ya que evolucionan los estados y los operadores no cambian. En general las versiones RG mas conocidas están construídas a la Heisenberg .

Como en lo que sigue se utilizará terminología de Teoría de Campos, es pertinente recordar al lector la correspondencia entre Teoría de Campos y Mecánica Estadística presentada en el Cap. 1 ,en particular las equivalencias entre :

Densidad de Energía Libre	—————	Densidad de energía del vacío
Inversa de la longitud de correlación	—————	Gap de masa

2.3.2 METODO VARIACIONAL ITERATIVO

Vamos a introducir este método (Abad 1984) por medio del ejemplo que resulta de su aplicación en el modelo de Ising transversal (1+1).

Dado el Hamiltoniano del modelo de Ising transversal

$$H = - \sum_i \frac{\varepsilon}{2} \sigma_{xi} + \Delta \sigma_{zi} \sigma_{zi+1} \quad , \quad (2.3.1)$$

donde los σ_i son los operadores de spin de Pauli y la suma es sobre todos los espines de la red infinita ,el propósito es construir una función de ondas variacional para el vacío o estado fundamental del mismo.

Para ello ,se van resolviendo bloques de espines de tamaño 2^N en la secuencia: $N = 0,1,2,3,\dots$, de forma que la predicción para el vacío $|\phi\rangle$ de H se alcanzará cuando $N \rightarrow \infty$.

$$\boxed{N = 0}$$

Se tiene que el bloque está formado solamente por un espin ,

$$\boxed{\bullet}$$

por lo tanto el hamiltoniano del bloque será:

$$H(0) = - \varepsilon/2 \sigma_z \quad (2.3.2)$$

El primer paso es diagonalizar este Hamiltoniano ,reteniendo un número determinado ,en este caso dos,de autoestados del mismo de menor energía $|0\rangle$ y $|0'\rangle$.En este paso se retiene además la siguiente información:

- valores propios de los dos autoestados retenidos , $E(0)$ y $E'(0)$
- elementos de matriz de los operadores de interacción en este espacio truncado:

$$a(0) = \begin{vmatrix} \langle 0|\sigma_z|0\rangle & \langle 0|\sigma_z|0'\rangle \\ \langle 0'|\sigma_z|0\rangle & \langle 0'|\sigma_z|0'\rangle \end{vmatrix} \quad (2.3.3)$$

De forma que al terminar esta etapa nuestro ansatz para el estado

fundamental de H sería

$$|\phi\rangle = \prod_i |0\rangle_i \quad (2.3.4)$$

y el primer excitado

$$|\phi'\rangle = \left[\prod_{i \neq j} |0\rangle_i \right] |0'\rangle_j, \text{ donde el primado puede estar en cualquier}$$

posición en la red.

De aquí se obtiene la predicción para la densidad de energía del vacío

$$E(0) = E(0)/2^0, \quad (2.3.5)$$

$$\text{el gap } g(0) = E(0') - E(0) \quad (2.3.6)$$

$$\text{y la magnetización } \langle \sigma_z \rangle(0) = \langle a(0) \rangle. \quad (2.3.7)$$

$$\boxed{N = 1}$$

Con la información de $N=0$ pasamos a resolver el problema de dos sitios

$$\boxed{\cdot \quad \cdot}$$

de Hamiltoniano :

$$H(1) = H(0) - \Delta \sigma_z \sigma_z + H(0), \quad (2.3.8)$$

que diagonalizamos en el espacio construido con los autoestados retenidos de la etapa anterior :

$$|1\rangle^k = \sum_{i,j} c_{ij} |0\rangle^i |0\rangle^j, \quad \text{con } |0\rangle^i, |0\rangle^j = |0\rangle, |0'\rangle, \quad (2.3.9)$$

obteniendo los dos autovectores mas bajos $|I\rangle, |I'\rangle$ con sus valores propios $E(1)$ y $E'(1)$ y calculo los elementos de matriz

$$a(1) = \begin{vmatrix} \langle I | \sigma_z | I \rangle & \langle I | \sigma_z | I' \rangle \\ \langle I' | \sigma_z | I \rangle & \langle I' | \sigma_z | I' \rangle \end{vmatrix} \quad (2.3.10)$$

En la misma forma que se calcularon la energía del vacío, el gap y la magnetización en el paso de $N=0$ se obtiene ahora:

$$F(1) = E(1)/2^1, \quad g(I) = E(I') - E(I) \quad (2.3.11)$$

y la magnetización $\langle \sigma_z \rangle(1) = \langle a(1) \rangle$.

Se continúa este proceso iterativo hasta que converge, dando así la energía libre, la magnetización y el gap entre los estados de menor energía. La función de onda $|N\rangle$ con $N \rightarrow \infty$ obtenida en la convergencia está así construida variacionalmente a partir de H .

La forma en que varía la magnetización con la constante de acoplamiento $y = \varepsilon/\Delta$ se muestra en la Fig 2.3.1. Es interesante destacar que el punto de transición coincide con el obtenido con el método de Drell.

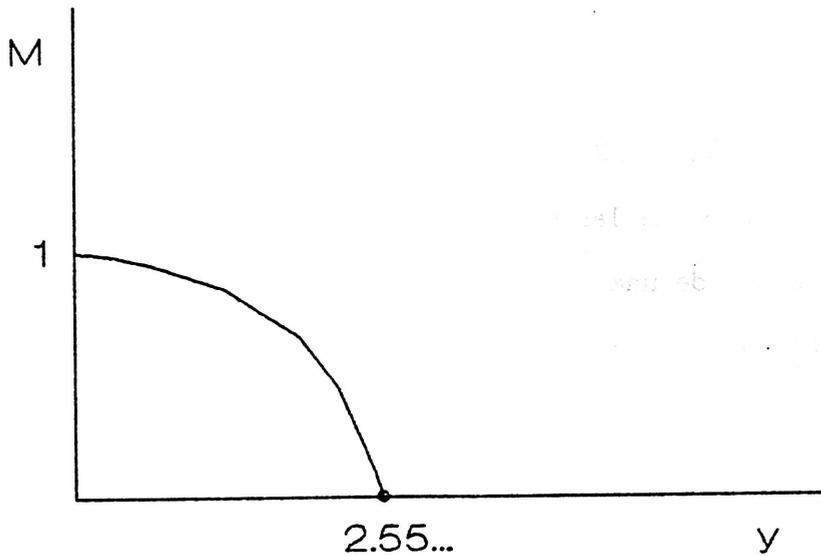


Fig 2.3.1 Variación de la magnetización $M = \langle \sigma_z \rangle$ en función de $y = \varepsilon/\Delta$ obtenida con el método variacional iterativo.

2.4. METODO DE MONTE CARLO - APLICACION A SISTEMAS CUANTICOS

2.4.1. INTRODUCCION

Uno de los métodos aproximados más utilizados en el estudio de sistemas críticos es el de *MONTE CARLO*. En modelos de espines clásicos ha dado excelente resultado y se lo ha aplicado en casi todos los modelos conocidos.

En sistemas cuánticos es posible usar *MONTE CARLO* (MC) pero es inevitable el uso (Feynman 1982) de alguna técnica de aproximación en la que se utilice un sistema semiclásico que se aproxime al sistema cuántico cuando algún parámetro alcanza un valor límite. Algunas de estas técnicas son: MC por formalismo de path-integral (Hirsch, 1981, 1982) y MC por función de Green (Kalos, 1979).

2.4.2. METODO DE MONTE CARLO

La idea básica de las simulaciones de Monte Carlo es representar el sistema por medio de una serie estocástica de configuraciones C_i con la propiedad de que, una vez alcanzado el equilibrio estadístico, la probabilidad de encontrar una configuración definida C sea proporcional a $\exp \{-E(C)\}$. El promedio estadístico de un observable O puede ser aproximado por el valor medio del observable sobre los estados de esta serie

$$\langle O \rangle \approx 1/N \sum_i O(C_i)$$

El paso de una configuración C a la siguiente C' está determinado por una matriz de transición estocástica $P(C \rightarrow C')$. En general, la transición involucra el cambio de una sola de las variables dinámicas por vez. En

nuestras simulaciones de spines en redes corresponderá al cambio de spin de un sitio por vez : $S_j \rightarrow S'_{ij}$. Debido a que la condición de balance detallado no especifica completamente las probabilidades de transición $P(S_j \rightarrow S'_{ij})$ hay variaciones del algoritmo de Monte Carlo que proponen diferentes formas de $P(S_j \rightarrow S'_{ij})$. Las más comunes son el método de Metropolis (Metropolis 1953) y el de baño térmico.

El método de Metropolis consiste en seleccionar un nuevo valor de la variable dinámica con una distribución arbitraria de probabilidad, en nuestro caso invertir el signo del spin $S_j \rightarrow -S_j$. Luego se calcula la variación de energía debida al nuevo valor ($-S_j$) ΔE . Si $\Delta E \leq 0$ el cambio es aceptado y $S'_{ij} = -S_j$. En caso contrario se genera un número aleatorio con distribución uniforme entre 0 y 1 r . Si $\exp(-\Delta E) \leq r$ el cambio es aceptado y $S'_{ij} = -S_j$; si $\exp(-\Delta E) > r$ no se acepta el cambio y $S'_{ij} = S_j$. Su ventaja práctica es que se logra el cambio de estado de manera muy rápida, lo que lo hace muy adecuado al cálculo computacional.

En el método del baño térmico el valor nuevo S'_{ij} se selecciona entre todos los valores posibles de la variable dinámica con una distribución proporcional a $\exp(-E(S'_{ij}))$ sin tener en cuenta el valor anterior de S_j . La ventaja de este método es que considera todos los cambios posibles sin desechar ninguno, cosa que sí sucede en Metropolis. La desventaja es que demanda un mayor esfuerzo computacional.

En nuestros cálculos por Monte Carlo se siguió el método de Metropolis.

2.4.3 METODO ESTADISTICO CUANTICO DE MONTE CARLO

El método estadístico cuántico de Monte Carlo (Suzuki, 1976) consiste en una aproximación general a los sistemas cuánticos de espines que permite simularlos por una computadora clásica.

Este método se basa en una correspondencia entre un sistema cuántico de espines en d -dimensiones y en uno de $d+1$ -dimensiones clásico, a través de la fórmula de Trotter (Trotter 1959)

$$e^{A+B} = \lim_{m \rightarrow \infty} (e^{A/m} e^{B/m})^m \quad (2.4.1)$$

en la que A y B son dos operadores cualesquiera.

Esta fórmula permite realizar aproximaciones a la función partición del sistema cuántico d -dimensional Z^Q en términos de funciones partición de sistemas clásicos $d+1$ -dimensionales Z_m :

$$Z^Q = \lim_{m \rightarrow \infty} Z_m, \quad (2.4.2)$$

$$\text{donde } Z_m = \text{Tr} [(e^{A/m} e^{B/m})^m]. \quad (2.4.3)$$

La dimensión adicional es la responsable de los efectos cuánticos como la no-conmutatividad del operador relevante. Esta dirección se conoce con el nombre de dimensión cuántica o de *TROTTER*.

Como ejemplo vamos a dar el caso del modelo de Ising transversal en una dimensión y en una red de N espines. El Hamiltoniano es

$$H = H_1 + H_2 = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \Gamma \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \quad (2.4.4)$$

La función partición del sistema cuántico se aproxima por (2.4.1) y en este caso se tiene

$$Z^N = \text{Tr} (e^{-\beta H}),$$

$$A = J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \quad \text{y} \quad (2.4.5)$$

$$B = \Gamma \sum_{i=1}^N \sigma_i^x,$$

con $\beta = 1/kT$. Reemplazando en (2.4.3) se obtiene

$$Z_m = \text{Tr} \left(e^{(\beta J / m \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)} e^{(\beta \Gamma / m \sum_{i=1}^N \sigma_i^x)} \right) \quad (2.4.6)$$

Para obtener el estado fundamental se necesita otra transformación adicional, definiendo una nueva variable $n = \beta \Gamma$ luego si $n \rightarrow \infty \Rightarrow T \rightarrow 0$.

La función partición a T=0 es:

$$Z^{\alpha} = \lim_{\substack{m \rightarrow 0 \\ n \rightarrow \infty}} \text{Tr} \left(e^{(J/m \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + 1/m \sum_{i=1}^N \sigma_i^x)^{mn}} \right) \quad (2.4.7)$$

Introduciendo un conjunto completo de estados entre las $2mn$ exponenciales dentro de la traza y usando la identidad

$$\langle S | e^{\sigma^x/m} | S \rangle = (1/2 \sinh(2/m))^{1/2} e^{(SS^* - 1/2) \ln(\coth(1/m))} \quad (2.4.8)$$

con $S = \pm 1$ variable de espín escalar, se obtiene

$$Z^{\alpha} = \lim_{\substack{m \rightarrow 0 \\ n \rightarrow \infty}} \left((1/2 \sinh(2/m))^{Nnm/2} \text{Tr} \left(e^{\mathcal{H}^1} \right) \right), \quad (2.4.9)$$

con

$$\mathcal{H}^1 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n \times m} \left(J/m^2 S_{ij} S_{i+1j} + 1/2 \ln(\coth(1/m)) S_{ij} S_{ij+1} \right) \quad (2.4.10)$$

La simulación por el método de Monte Carlo puede ser realizada sobre un modelo clásico bidimensional con N espines horizontales y $n \times m$ espines verticales (dimensión de Trotter) descrito por \mathcal{H}^1 y condiciones de contorno periódicas.

Es decir que se pasa de un sistema cuántico unidimensional :

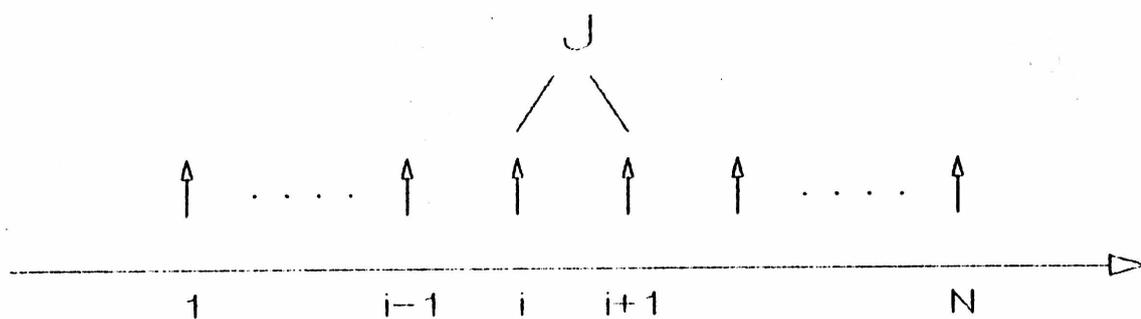


FIGURA N^o 2.4. Cada punto de la red i esta representado por un operador de Pauli σ^j .

a uno clásico bidimensional:

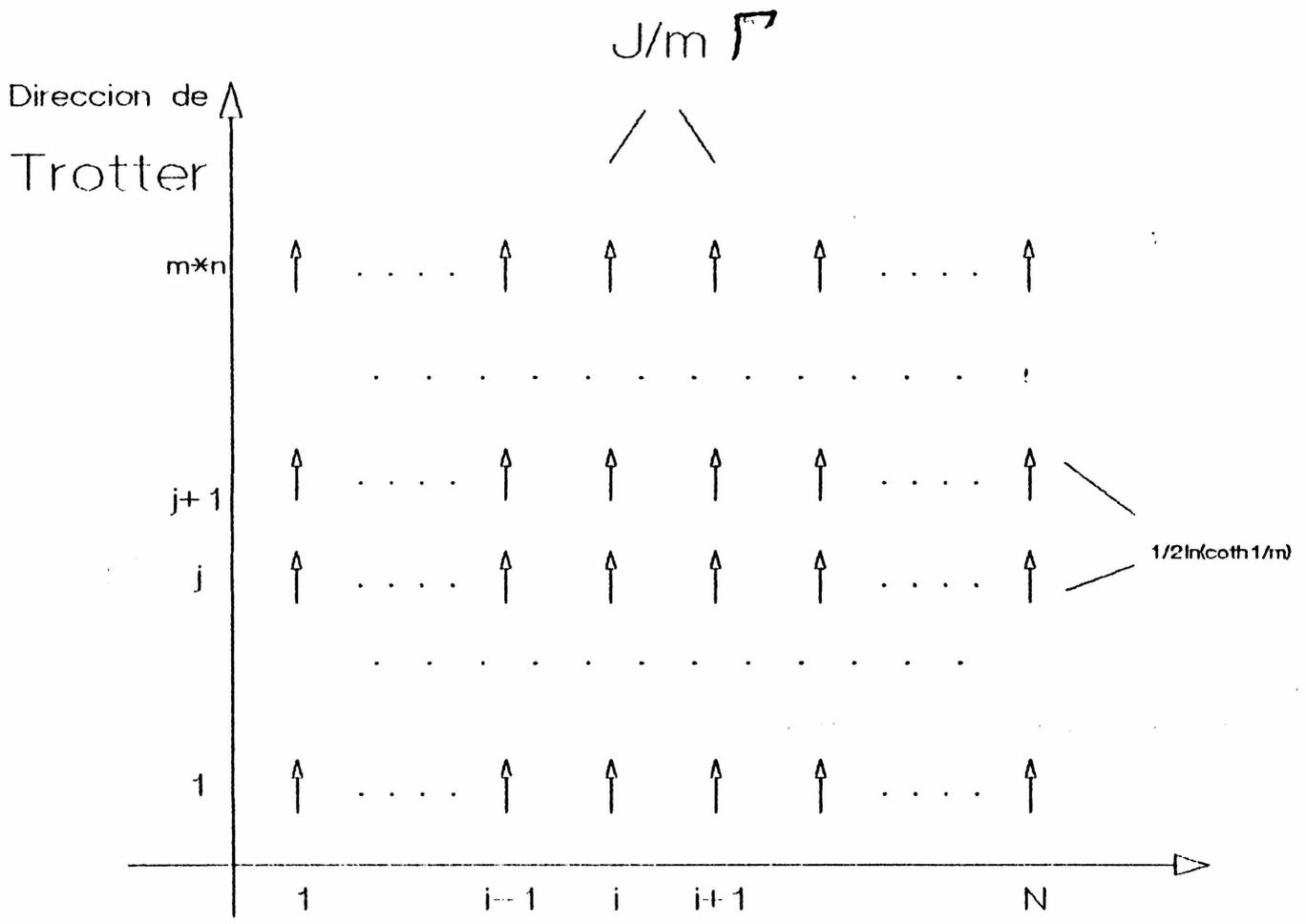


FIGURA N° 2.4.2 La red bidimensional tiene N espines horizontales y m*n espines en la dimension de TROTTER

sobre el que se aplicará el método de Monte Carlo.

Con esta breve descripción de la versión de Monte Carlo cuántico que se va a utilizar terminamos la revisión de los métodos aplicados en esta tesis.

CAPITULO N 3

MODELO DE POTTS

3.1. INTRODUCCION

El modelo de Potts es una generalización del modelo de Ising que consiste en un sistema de spines en un plano ,con cada spin apuntando a una de las q direcciones especificadas por los ángulos

$$\theta_n = 2\pi n/q , \quad n=0,1,\dots,q-1. \quad (3.1.1)$$

La interacción más general de primeros vecinos depende del ángulo relativo entre los dos vectores. Es un sistema con simetría $Z(q)$ con Hamiltoniano:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J(\theta_{ij}) , \quad (3.1.2)$$

donde la función $J(\theta)$ es 2π periódica y $\theta_{ij} = \theta_{n_i} - \theta_{n_j}$ es el ángulo entre los dos spines en los sitios vecinos i y j . La versión standard del modelo de Potts es con

$$J(\theta_{ij}) = r \delta(n_i, n_j) , \quad (3.1.3)$$

y es la que se estudiará en este trabajo.

El modelo de Potts no sólo presenta una transición orden - desorden de interés teórico sino que también es realizable en forma experimental.

Para la realización experimental de un sistema de spines se debe buscar sistemas reales que pertenezcan a la misma clase de universalidad, o sea que tengan los mismos exponentes críticos. Un ejemplo de sistema real de dos dimensiones es la transición que ocurre en monocapas y submonocapas adsorbidas por superficies cristalinas. Domany *et al* (1977) mostraron que los sistemas adsorbidos pueden ser clasificados usando la teoría de Landau y el Hamiltoniano de Landau-Ginzburg-Wilson de los adátomos considerados como un gas en la red, de forma que las transiciones que pertenecen a las distintas clases de universalidad de modelos de spin bidimensionales pueden ser realizadas eligiendo apropiadamente la matriz del substrato y el adátomo de cobertura.

Para el caso que vamos a estudiar en este capítulo: $q=3$ y una dimensión cuántica, equivalente a dos dimensiones clásicas; se pueden encontrar realizaciones experimentales en compuestos de grafito intercalado (GIC) (Zabel y Chow 1986), en particular la adsorción de átomos de He⁴ en grafito a 1/3 de cobertura, así como la adsorción de Kriptón en grafito (Berker 1978).

El modelo de Potts en dos dimensiones concuerda para $q>4$ con la predicción de campo promedio (Mittag y Stephen 1974) que predice una transición de primer orden. Para $q<4$ presenta transición de segundo orden.

En las transiciones continuas son de fundamental importancia los exponentes críticos térmico ν_t y magnético ν_h definidos a través del comportamiento crítico de la energía libre $f(q, r, h)$:

$$f(q, r, 0) \sim |r - r_c|^{2/\gamma_t}, \quad r \sim r_c \quad (3.1.4)$$

$$f(q, r_c, h) \sim |h|^{2/\gamma_h}, \quad h \sim 0. \quad (3.1.5)$$

A partir de estos exponentes es posible definir el resto de los exponentes críticos. den Nijs (1979) hizo la conjetura para el exponente térmico:

$$\gamma_t = 3(1 - u) / (2 - u), \quad q \leq 4 \quad (3.1.6)$$

con $0 \leq u = (2/\pi) \cos^{-1}(\sqrt{q}/2) \leq 1$,

mientras que para el exponente magnético Nienhuis *et al* (1980) conjeturaron que:

$$\gamma_h = (3 - u)(5 - u)/4(2 - u). \quad (3.1.7)$$

Estas suposiciones han sido verificadas con un alto grado de precisión numérica (Nightingale 1980, Blöte 1981). A través de las mismas es posible obtener una predicción para los exponentes críticos del modelo de Potts. En este capítulo se obtendrá por distintos métodos el exponente β que controla el comportamiento de la magnetización :

$$M \sim |T - T_c|^\beta, \quad T \rightarrow T_c^-, \quad (3.1.8)$$

y se compararán los resultados de los distintos métodos entre sí y con el valor de β conjeturado. Los resultados obtenidos anteriormente por distintos métodos de aproximación para este exponente se muestran en la Tabla 3.1 (Extraídos de Wu, 1982).

Los métodos utilizados permiten además obtener el punto en el que se produce la transición de fase. Dado que este punto es exclusivo de la versión hamiltoniana del modelo, supondremos que su valor exacto es el que brinda la mejor aproximación de los distintos métodos.

Los métodos aplicados fueron: el de grupo de renormalización (RG), desarrollo en bajas temperaturas (LT) y el método variacional de bloques (MV).

3.2. HAMILTONIANO DEL MODELO CUANTICO DE POTTS EN (1+1) DIMENSIONES

Para obtener el modelo cuántico equivalente al modelo clásico de Potts en (1+1) dimensiones se utiliza el método de la matriz de transferencia, descrito anteriormente. El hamiltoniano cuántico que se obtiene es:

$$H = \sum_i -\alpha Q_i - r/2 (s_{z_i} s_{z_{i+1}} + 3s_{z_i}^2 s_{z_{i+1}}^2 - 2s_{z_i}^2 s_{z_{i+1}}^2), \quad (3.2.1)$$

$$\text{con } Q = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad s_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad s_z^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.2.2)$$

3.3. GRUPO DE RENORMALIZACION

El método de renormalización empleado (Epele 1981a) ha sido descrito en forma general en la introducción.

$$\dots \boxed{* \quad *}_{1 \quad 2} \boxed{* \quad * \quad *}_{1 \quad 2 \quad 3} \boxed{* \quad *}_{1 \quad 2} \dots$$

En este modelo el hamiltoniano del bloque con el que se trabajó es:

$$H_B = \sum_{i=1}^3 -\alpha Q_i - r/2 (s_{z_i} s_{z_{i+1}} + 3s_{z_i}^2 s_{z_{i+1}}^2 - 2s_{z_i}^2). \quad (3.3.1)$$

Los operadores en H_B se expresan en la base de autovectores de s_z del sitio central :

$$|+ \rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |0 \rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |- \rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (3.3.2)$$

y el hamiltoniano del bloque queda desacoplado:

$$H_B = \begin{bmatrix} H_B^{13} & 0 \\ 0 & H_B^{23} \end{bmatrix}. \quad (3.3.3)$$

Se diagonaliza y se retiene los autovectores correspondientes al autovalor mas bajo (truncado o thinning):

$$\lambda_{\zeta} = -(r+\alpha)/2 - [(r-\alpha)^2/4 + 2\alpha^2]^{1/2}, \quad (3.3.4)$$

$$|\lambda_{\zeta}^+\rangle = [2(1+b^2)]^{1/2} \begin{bmatrix} \sqrt{2}b \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\lambda_{\zeta}^0\rangle = [2(1+b^2)]^{1/2} \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{2}b \\ 1 \end{bmatrix} \text{ y}$$

$$|\lambda_{\zeta}^-\rangle = [2(1+b^2)]^{1/2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \sqrt{2}b \end{bmatrix}, \quad \text{con } b = -\sqrt{2}\alpha/(\lambda_{\zeta}+r). \quad (3.3.5)$$

Los autovectores del block quedan de la forma:

$$|I\rangle = |\lambda_{\zeta}^+\rangle_1 |\lambda_{\zeta}^+\rangle_2 |+\rangle_3,$$

$$|II\rangle = |\lambda_{\zeta}^0\rangle_1 |\lambda_{\zeta}^0\rangle_2 |0\rangle_3 \quad \text{y}$$

$$|III\rangle = |\lambda_{\zeta}^-\rangle_1 |\lambda_{\zeta}^-\rangle_2 |-\rangle_3. \quad (3.3.6)$$

Para hallar el autovalor asociado al campo externo λ_h se toma

$$\lambda_h = \partial h' / \partial h |_{h=0} \quad (3.3.7)$$

$$\text{y como } H = \langle I, II, III | H_0 + h s_z | I, II, III \rangle_{\lambda_c} = H_0 + h' s_z, \quad (3.3.8)$$

finalmente se obtiene

$$h' = (1 + (2b_c^2 - 1)/(1 + b_c^2)) h, \quad (3.3.9)$$

$$y \lambda_h = (1 + (2b_c^2 - 1)/(1 + b_c^2)) |_{b_c = (1 + \sqrt{3})/\sqrt{2}}, \quad (3.3.10)$$

en donde se ha especializado el parámetro b_c en el punto crítico, de aquí se obtiene :

$$\lambda_c = \begin{pmatrix} 2.366 \\ 0.634 \end{pmatrix}. \quad (3.3.11)$$

En las sucesivas aplicaciones de renormalización la interacción en la dirección correspondiente al autovalor menor que uno tiende a desaparecer, mientras que aquella del autovalor mayor que uno se refuerza, y es por lo tanto ésta última la que va a dar cuenta de la correlación a gran escala característica del punto crítico. Por esta razón se llama a los autovalores menores que uno y a las direcciones asociadas a los mismos irrelevantes, mientras que a los autovalores mayores que uno y a las direcciones asociadas se los conoce como relevantes ya que es a través de ellos que se obtiene la forma característica en que responde el sistema

crítico a la variación de los parámetros físicos (en este caso el campo magnético externo).

Por esta razón se usará el autovalor relevante ($\lambda_c > 1$) para calcular el exponente crítico asociado al campo externo y_h :

$$y_h = \ln(\lambda_h) / \ln(3) , \quad (3.3.12)$$

usando que el número de coordinación en esta red unidimensional es 2. Así se obtiene $y_h = 0.784$, un valor bastante alejado del exacto $y_h = 1.866$.

Para obtener el exponente β se puede usar la igualdad (Ravndal 1975)

$$\beta = (1 - y_h/2) / y_t/2 ,$$

con y_h recién obtenido e $y_t = 1.15$ (Epele 1981b) resultante del mismo RG. Así se obtiene $\beta = 0.1165$, una muy buena aproximación al valor exacto $\beta_{ex} = 1/9 = .1111$ y del mismo orden que las mostradas en la Tabla 3.1.

Con esta misma realización del RG se había obtenido anteriormente el valor del punto crítico $\alpha/r = 1/3$ (Epele 1981b). Este es el que se toma como mejor aproximación.

3.4. DESARROLLO EN BAJAS TEMPERATURAS

El desarrollo en bajas temperaturas (ver Cap. 2) consiste en calcular perturbaciones al estado fundamental del hamiltoniano cuántico a $T=0$, con este propósito se toma el hamiltoniano de Potts (3.2.1) con campo externo

para una red unidimensional de N spines:

$$H = \sum_m -\alpha Q_m + r (1 - \delta s_m, s_{m+1}) + h s_m, \quad (3.4.1)$$

que se puede escribir , eliminando un factor,

$$H = \sum_m (-1/\lambda) Q_m + (1 - \delta s_m, s_{m+1}) + h s_m, \quad (3.4.2)$$

aquí conviene distinguir la parte perturbativa :

$$H = (-1/\lambda) V + W_0, \quad (3.4.3)$$

con $V = \sum_m Q_m$, la perturbación y

$$W_0 = \sum_m (1 - \delta s_m s_{m+1}) + h s_m. \quad (3.4.4)$$

Para $h=0$ se tiene un estado fundamental triplemente degenerado. Nosotros vamos a trabajar con $h < 0$ y $h \simeq 0$ lo que nos da un estado fundamental todo "up" : $|\hat{\uparrow}\rangle = \sum_m \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}_m$.

El desarrollo perturbativo de la magnetización se hace en potencias de $1/\lambda$ ($\sim T$) :

$$M = 1/N \left(\frac{\partial E^0}{\partial h} \Big|_{h=0} + \frac{\partial E^1}{\partial h} \Big|_{h=0} \cdot 1/\lambda + \frac{\partial E^2}{\partial h} \Big|_{h=0} \cdot 1/\lambda^2 + \dots \right) \quad (3.4.5)$$

E^0 es la energía del estado fundamental :

$$E^0 = \langle \hat{\uparrow} | W_0 | \hat{\uparrow} \rangle = Nh. \quad (3.4.6)$$

Por otra parte

$$V | \hat{\uparrow} \rangle = \sum_m Q_m \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}_m = \sum_m \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}_m, \quad (3.4.7)$$

$$\text{lo que implica que } E^1 = \langle \uparrow | V | \hat{\uparrow} \rangle = 0. \quad (3.4.8)$$

$$E^2 = \langle \hat{\uparrow} | V g V | \hat{\uparrow} \rangle, \quad (3.4.9)$$

$$\text{con } g = \frac{|\leftarrow \rangle \langle \leftarrow|}{E^0 - E_{\leftarrow}} + \frac{|\downarrow \rangle \langle \downarrow|}{E^0 - E_{\downarrow}}, \quad (3.4.10)$$

$$|\leftarrow \rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ y } |\downarrow \rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (3.4.11)$$

$$\text{obteniéndose } E^2 = N \frac{3h - 4}{2(h-1)(h-2)}. \quad (3.4.12)$$

$$E^2 = \langle \uparrow | V g V g V | \uparrow \rangle - \langle \uparrow | V | \uparrow \rangle \langle \uparrow | V g^2 V | \uparrow \rangle = \langle \uparrow | V g V g V | \uparrow \rangle, \quad (3.4.13)$$

de aquí resulta

$$E^3 = 2N/(h-2)(2h-2). \quad (3.4.13)$$

El último término del desarrollo que se calculó fue el cuarto, aquí la energía que interviene es:

$$E^4 = \langle \uparrow | VgVgVgV | \uparrow \rangle - \langle \uparrow | VgV | \uparrow \rangle \langle \uparrow | Vg^2V | \uparrow \rangle, \quad (3.4.14)$$

este cálculo da

$$E^4 = N \left\{ \frac{-6}{(h-2)^2} \left[\frac{1}{2h-4} + \frac{1}{3h-4} \right] \frac{6}{(2h-2)^2} \left[\frac{1}{3h-4} + \frac{1}{4h-4} \right] \right. \\ \left. + \frac{4}{(h-2)^2} \left[\frac{1}{2h-2} + \frac{1}{3h-3} \right] + \frac{4}{(2h-2)^2} \left[\frac{1}{3h-3} + \frac{1}{4h-2} \right] \right\} \quad (3.4.15)$$

y los términos que intervienen en el desarrollo son:

$$\frac{1}{N} \frac{\partial E^0}{\partial h} \Big|_{h=0} = 1; \quad \frac{1}{N} \frac{\partial E^2}{\partial h} \Big|_{h=0} = -3/4; \\ \frac{1}{N} \frac{\partial E^3}{\partial h} \Big|_{h=0} = -1/2; \quad \frac{1}{N} \frac{\partial E^4}{\partial h} \Big|_{h=0} = -1.208333. \quad (3.4.16)$$

El desarrollo de M en bajas temperaturas (3.4.5) es entonces:

$$M = 1 - 3/4 (1/\lambda)^2 - 1/2 (1/\lambda)^3 - 1.208333 (1/\lambda)^4 + \dots \quad (3.4.17)$$

A este desarrollo se le aplicó la prueba del cociente (ver Cap. 2) en la que se obtiene que el cociente de dos términos en el desarrollo da:

$$R_1 = a_l/a_{l-1} = \frac{1}{T_c} \left(1 - \frac{\beta+1}{l}\right). \quad (3.4.18)$$

Utilizando el primero, segundo y cuarto término del desarrollo (3.4.17)

se obtuvieron:

$$\beta = 0.1892 \quad \text{y} \quad \lambda_c = 3.95;$$

valores no muy alejados de los conjeturados:

$$\beta_{con} = 1/9 = .1111 \quad \text{y} \quad \lambda_{con} = 3$$

(Epele 1981b). Este resultado es aceptable ya que estos desarrollos son menos precisos a medida que uno se acerca al punto crítico.

3.5. METODO VARIACIONAL DE BLOQUES

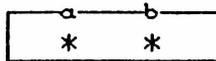
El método variacional de bloques (Abad 1984) también fue usado para hallar el punto crítico y el índice β en el modelo cuántico de Potts en una dimensión.

Como ya se explicó antes, este método consiste en un proceso iterativo en el que se van resolviendo en cada paso bloques de un número creciente de spines, comenzando por un bloque de un sitio, luego uno de dos sitios y se

continúa duplicando el número de sitios en el bloque correspondiente a cada paso. La resolución en cada paso consiste en hallar autovalores y autovectores del hamiltoniano, quedándose con los correspondientes a las menores energías.

En este caso se comienza con resolver el hamiltoniano (3.2.1) de lo que resultan tres autoestados: $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$. Se expresa el operador de spin en esta base.

En el paso siguiente se toma un bloque de dos sitios:



cuyo hamiltoniano se puede escribir:

$$H^{(1)} = H_a^{(0)} + H_b^{(0)} + H_{ab}. \quad (3.5.1)$$

$H_a^{(0)}$ y $H_b^{(0)}$ son los Hamiltonianos de un sitio resueltos en el paso previo y H_{ab} es el término de interacción entre sitios que conciden con los bloques del paso anterior y por lo tanto se usa la representación obtenida en ese paso. De esta forma se expresa $H^{(1)}$ en la base $|1\ 1\rangle, |1\ 2\rangle, |1\ 3\rangle, |2\ 1\rangle, \text{etc.}$ y se resuelve reteniendo los 3 autoestados de menor energía para expresar los operadores del paso siguiente con ellos. Así se genera un proceso iterativo con bloques cada vez más grandes hasta que se obtiene convergencia en la matriz de spin. Otros resultados de interés son: 1) el gap de energía entre el estado fundamental y el primer excitado y 2) la densidad de energía libre $F = E(0)/2^N$.

La transición de segundo orden se puede detectar por el parámetro de

orden o magnetización ,que se obtiene de la matriz correspondiente al operador de spin,o por la anulación del gap.

La matriz de spin obtenida en la fase ordenada es de la forma

$$s_z = a \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{bmatrix}, \text{ con } a \neq 0, \quad (3.5.2)$$

se esperaba obtener $a \cdot s_z$, pero con s_z dado por la fórmula (6). De cualquier modo esta matriz tiene los mismos autovalores que la matriz de spin normal s_z (3.2.2), de forma que $\langle s_z \rangle = a$ en los autovectores de la matriz de spin obtenida. Los autovectores son: $(1,0,0)$, $(0,1,1)$, $(0,1,-1)$, los dos últimos son una combinación lineal de dos de los autovectores de s_z (3.2.2). No pudo hallarse explicación para este hecho.

El punto crítico se obtuvo simultáneamente por la anulación del gap y del parámetro de orden ($\langle s_z \rangle = a$). Su valor fue $\lambda_c = 2.6845$, bastante aproximado al exacto $\lambda_{c_{ex}} = 3$.

El índice crítico β se determinó por la forma en que se anula la magnetización en las cercanías del punto crítico. Así se obtuvo $\beta = .31$, alejado del exacto $\beta_{ex} = .111$.

3.6. CONCLUSIONES PARA EL MODELO DE POTTS

Los resultados obtenidos para el exponente crítico β y el punto crítico λ_c con los tres métodos propuestos se encuentran en la Tabla 3.2 .

De la comparación de los resultados obtenidos en la Tabla 3.2 se puede decir que el grupo de renormalización es el que da la mayor

aproximación, seguido por el desarrollo en bajas temperaturas y por último el variacional. Cabe aclarar que el RG no siempre es posible, ya que se debe lograr que el hamiltoniano resultante del "scaling" tenga los mismos operadores que el original. Pero, si esto se logra (depende del modelo), es el que da los mejores resultados. Cuando no se puede implementar el RG el apropiado sería el desarrollo en bajas temperaturas, ya que con los primeros términos (lo que significa pocas cuentas) se llega a buenas estimaciones de índices y puntos críticos.

Método	β
Conjeturado	1/9
Desarrollo en serie HT (Miyashita 1979)	0.1064
RG variacional Kadanoff (Dasgupta 1977)	0.107
Monte Carlo RG (Rebbi 1980)	0.101

TABLA 3.1: Resultados obtenidos con distintos métodos numéricos para el exponente crítico β . (Wu 1982)

	λ_c	β
conj.	3.0	.111
RG	3.0	.1165
LT	3.95	.1892
MV	2.68	.311

TABLA 3.2 : Comparación de los valores del exponente crítico β y del punto crítico λ_c conjeturados y obtenidos en este trabajo con los distintos métodos.

CAPITULO N 4

MODELO DE BLUME-CAPEL

4.1. INTRODUCCION

El modelo de Blume-Capel fue introducido por Blume (Blume 1966) y Capel (Capel 1966-1967) a los efectos de reproducir el cambio de fase magnético de primer orden en UO_2 . En él se supone una estructura electrónica para el uranio con un estado fundamental singlete no-magnético y el primer estado excitado un triplete magnético y únicamente interacciones de intercambio isotrópicas bilineales. Con un campo magnético externo lo suficientemente fuerte, uno de los componentes del triplete se ubicará por debajo del singlete y así se obtendrá una solución magnética a $T=0$, obteniendo el cambio de fase cuando T aumenta.

Expresado esto en términos de espines se obtiene un modelo de espín-1 con Hamiltoniano

$$H = J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - \Delta \sum_i (s_i^2), \quad (4.1.1)$$

donde s_i , la variable de espín 1, toma los valores 0, +1, -1. Las constantes de acoplamiento son medidas en unidades de kT y Δ representaría el papel de potencial químico para el estado de $s=0$.

El modelo de Blume-Capel es uno de los modelos del tipo de Ising más simples y presenta un punto tricrítico en su diagrama de fases separando las transiciones de primer y segundo orden.

La diferencia fundamental entre el punto tricrítico y el crítico es que mientras este último requiere dos parámetros termodinámicos para ser ubicado, por ej. un punto crítico ferromagnético común requiere la temperatura T y el campo magnético, el tricrítico necesita tres, el parámetro termodinámico extra puede ser, por ejemplo la concentración. Se debe considerar además de la temperatura T y del campo H acoplado al parámetro de orden M , otro campo h acoplado a una variable m . El punto tricrítico puede ser el punto donde una línea de puntos críticos se convierte en una línea de transición de primer orden o como el punto de encuentro de tres líneas críticas. El del modelo de Blume-Capel es un ejemplo del primero de ellos. Los fenómenos tricríticos presentan mucho interés desde el punto de vista teórico y experimental ya que se ha encontrado que son diferentes de los fenómenos críticos comunes. En un cálculo de grupo de renormalización (Riedel 1972) se mostró que el comportamiento tricrítico de un modelo gaussiano tridimensional es descrito por los exponentes clásicos (mean field) con correcciones logarítmicas. Experimentalmente se ha encontrado comportamiento tricrítico en las transiciones metamagnéticas del DAG (granate de disprosio aluminio) (Landau 1971, Giordano 1975) y del Cl_2Fe (Birgeneau 1974); en separaciones de fase de mezclas $^3\text{He} - ^4\text{He}$ (Peliti 1984) y en la transición de fase estructural del NH_4Cl (Garland 1971). Los sistemas metamagnéticos están constituidos por planos de forma que los iones magnéticos presentan acoplamiento anisótropo ferromagnético en el interior de los planos y antiferromagnético entre ellos. En ausencia de campo magnético externo uniforme, presentan una transición paramagnética - antiferromagnética de segundo

orden con parámetro de orden M la magnetización alternada de los planos y campo conjugado también alternado. Con campo magnético externo y dependiendo de la intensidad de éste se obtendrá transición de primer y segundo orden con un punto tricrítico que separará ambos comportamientos.

En las mezclas He3-He4 aparece el conocido punto λ del He4 que caracteriza la transición de superfluidez. En presencia de He3, el punto λ describe una línea descendiente que llega a la curva de mezclado, obteniéndose el diagrama de fases de la Fig. 4.1. El punto crítico en el máximo de la curva de mezclado es un punto tricrítico. El parámetro de orden es la superfluidez; m es la concentración X y el campo conjugado, h es la diferencia de potenciales químicos del He3 y el He4, $\mu_3 - \mu_4$. En el plano h, T el diagrama de fases corresponde al de la Fig. 4.2. Este sistema para $d=3$ presenta un exponente tricrítico con exponentes clásicos y está bien representado por el modelo de Ginzburg-Landau.

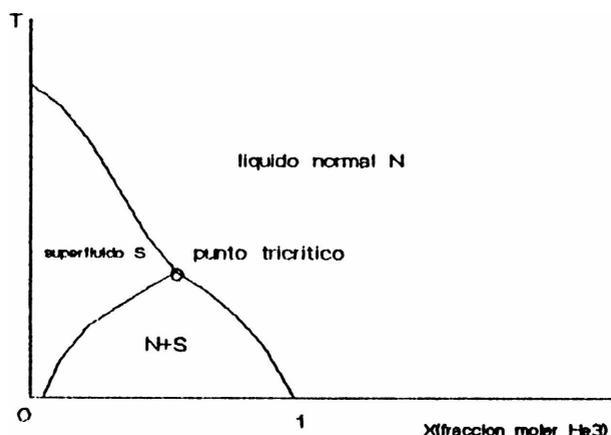


Fig. 4.1 - Diagrama de fases para la mezcla He3-He4 en el plano x, T

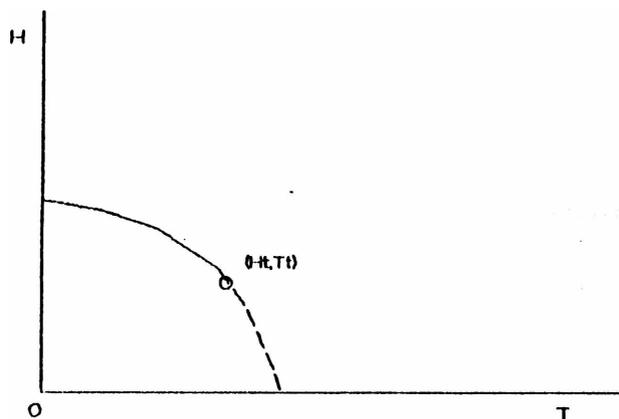


Fig. 4.2 - Diagrama de fases con un punto tricritico en el plano h,T.

En los halogenuros de amonio (NH_4Cl) los tetrahedros de amonio pueden tomar dos posiciones distintas ,posibilitando una transición orden-desorden. A presión ordinaria, el cloruro de amonio presenta una transición de primer orden que se convierte en una de segundo orden para presiones más elevadas, atravesando por lo tanto un punto tricrítico.

Este modelo ha sido estudiado en profundidad, en particular en la red bidimensional. La versión cuántica del modelo ha sido estudiada usando técnicas de " finite size scaling " (Alcaraz 1985) , métodos de grupo de renormalización en el espacio real (Hamber 1980 ,Hu 1980) y aproximaciones de campo promedio (Hamber 1980).

En todos estos trabajos no se tuvo en cuenta el comportamiento antife-

romagnético del modelo. Dado que la realización del grupo de renormalización descrita en el Capítulo 2 (Epele 1981a) permite el estudio simultáneo de las fases ferromagnética y antiferromagnética del modelo nos propusimos "revisitar" el modelo BC en (1+1) y (2+1) dimensiones por medio de esta realización de RG (Arizmendi 1986).

También se hizo el estudio del mapa de fases del modelo BC con el método variacional (MV) descrito en el Capítulo 2 (Abad 1984), (Arizmendi 1986).

4.2. HAMILTONIANO DEL MODELO DE BLUME CAPPEL CUANTICO

El Hamiltoniano de la versión cuántica del modelo en d dimensiones obtenido a través de la matriz de transferencia es (Cap. 1) :

$$H = \sum_i [\gamma (s_x)_i + \delta (s_z)_i^2] - \sum_{\langle ij \rangle} (s_z)_i (s_z)_j \quad (4.2.1)$$

con

$$s_x = 1/\sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad ; \quad s_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.2.2)$$

4.3. GRUPO DE RENORMALIZACION

Es interesante señalar que Bambi Hu (Hu 1980) partiendo del modelo de

Ising de spin 1 en un campo transversal

$$H = K_1 \sum_i (s_x)_i - \sum_{\langle ij \rangle} (s_z)_i (s_z)_j, \quad (4.3.1)$$

aplicando una versión de grupo de renormalización con truncado llega al Hamiltoniano

$$H = K_1 \sum_i (s_x)_i - \sum_{\langle ij \rangle} (s_z)_i (s_z)_j + K_2 \sum_i (s_x)_i^2 + K_3 \sum_i (s_z)_i^2, \quad (4.3.2)$$

que es la versión cuántica correspondiente al límite hamiltoniano del modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG) y de este resultado induce que éste es el modelo cuántico mínimo cerrado bajo grupo de renormalización (no aparecen nuevas interacciones al aplicar el cambio de escala). Nosotros demostramos que BC que corresponde al BEG con $K_2=K_3=0$ es cerrado bajo la realización de grupo de renormalización que empleamos.

El Hamiltoniano del block se escribe

$$H_B = \bigoplus_{l=1}^3 \left\{ \sum_{i=1}^{\zeta} W_{il} \right\} \quad (4.3.3)$$

donde ζ es el número de coordinación de la red y

$$W_{il} = W_l = (2-l)s_z + \delta(s_z)^2 + \gamma s_x. \quad (4.3.4)$$

La ecuación de los autovalores λ_l de esta última matriz es:

$$\lambda_l [(\delta - \lambda_l)^2 - |2-1|] - \gamma^2 (\delta - \lambda_l) = 0 \quad (4.3.5)$$

y los autovectores correspondientes son

$$|\lambda_l\rangle = \frac{|(\delta - \lambda_l)^2 - |2-1||}{a_l} \begin{bmatrix} \gamma\sqrt{2} \\ \delta - \lambda_l + 1 - 2 \\ 1 \\ \gamma\sqrt{2} \\ \delta - \lambda_l + 2 - 1 \end{bmatrix} \quad (4.3.6)$$

con

$$a_l = \{ [(\delta - \lambda_l)^2 - |2-1|]^2 + \gamma^2 [(\delta - \lambda_l)^2 + |2-1|] \}^{1/2}. \quad (4.3.7)$$

Finalmente se retienen los autoestados correspondientes a los tres autovalores más bajos de cada bloque (dos de ellos son degenerados) para realizar el truncado del espacio de Hilbert. Estos estados son :

$$|1\rangle_{\mathbf{B}} = |1\rangle_{\mathbf{O}} \prod_{i=1}^{\zeta} |\lambda_l\rangle ; \quad l=1,2,3. \quad (4.3.8)$$

El próximo paso es construir un Hamiltoniano total que actúe en el

espacio de Hilbert truncado. Para ésto consideramos los elementos de matriz del operador remanente en la base truncada

$$V_{\langle j, j' \rangle} = \gamma s_x^j(0) - (\zeta - 1) s_z^j s_z^{j'} + \delta (s_z^j)^2(0) \quad (4.3.9)$$

donde $\langle j, j' \rangle$ indica dos primeros vecinos en el block y (0) el spin central.

El Hamiltoniano final toma la forma original pero con constantes de acoplamiento renormalizadas

$$H = \sum_j \varepsilon'_0 \mathbb{1}^j + \gamma \sum_j s_x^j - \sum_{\langle j, j' \rangle} s_z^j s_z^{j'} - \delta \sum_j (s_z^j)^2 \quad (4.3.10)$$

donde

$$\varepsilon'_0 = \frac{\zeta a_1^4 \lambda_2}{4(\zeta - 1) \gamma^4 (\delta - \lambda_1)^2} \quad (4.3.11)$$

y

$$\gamma' = \frac{a_1^4 \{ [(\delta - \lambda_2) ((\delta - \lambda_1)^2 - 1) + \gamma^2 (\delta - \lambda_1)]^2 / a_1^2 [\gamma^2 + (\delta - \lambda_2)^2] \}^{\zeta/2}}{4(\zeta - 1) \gamma^3 (\delta - \lambda_1)^2} \quad (4.3.12)$$

$$\delta' = \frac{a_1^4 [\zeta (\lambda_1 - \lambda_2) + \delta]}{4(\zeta - 1) \gamma^4 (\delta - \lambda_1)^2} \quad (4.3.13)$$

Los puntos fijos de estas transformaciones fueron obtenidos numéricamente ,en particular,el punto tricrítico .Linealizando en las cercanías de este punto se obtuvieron los autovalores térmicos, y a través de ellos,los exponentes críticos.En este caso, por tratarse de un punto tricrítico ,presenta dos exponentes críticos ,ya que presenta una variable relevante más que los puntos críticos comunes.Los resultados obtenidos para el punto tricrítico y los exponentes críticos para el modelo en (1+1) dimensiones se encuentran en las tablas 4.1 y 4.2 ,donde se los compara con los resultados de otros métodos.

	γ_{tc}	δ_{tc}
ORG	0.25	0.83
FSS(Alcaraz85)	0.42	0.91
RG(Hamber80)	0.32	0.83
MFA(Hamber80)	1.0	0.68
OV	0.35	0.83

Tabla N 4.1 Coordenadas del punto tricritico para el modelo BC cuantico en (1+1) dimensiones .Resultados obtenidos por distintos metodos.

	y1	y2
Valor conjeturado(Nienhuis,82)	1.8	0.8
ORG $d=1+1$	1.85	0.64
FSS $d=1+1$ (Alcaraz,85)	1.8	0.7
RG $d=1+1$ (Hamber,80)	1.81	0.93
RG $d=1+1$ (Hu,80)	1.76	0.60
RG $d=2$ (Berker,76)	1.84	0.92
RG variacional $d=2$ (Kaufman,81)	1.77	0.52

Tabla N 4.2 Exponentes criticos para el modelo cuantico BC en $(1+1)$ dimensiones. Se muestran tambien los exponentes del modelo BC clasico en 2 dimensiones.

Como en el mapa de fase hay una línea correspondiente a transiciones de primer orden, las transformaciones del grupo de renormalización deben reflejar esto, mostrando alguna peculiaridad respecto de las que están asociadas a transiciones de fase de segundo orden y fenómenos críticos. Las propiedades correspondientes a los grupos de renormalización para transiciones de fase de primer orden fueron estudiadas por Nienhuis y Nauenberg (Nienhuis 1975). Ellos demuestran la necesidad de la existencia de otro punto fijo, además del punto fijo que determina el comportamiento crítico, este otro punto fijo es llamado punto fijo de discontinuidad ya que está asociado a la discontinuidad del parámetro de orden. Las condiciones que debe cumplir este punto fijo de discontinuidad son:

- a) Los puntos que pertenecen a una zona del mapa de fase limitada de un

lado por la superficie crítica son mapeados por las transformaciones de renormalización sucesivas en este punto fijo.

b) En el punto fijo de discontinuidad, el autovalor asociado con el campo ordenador coincide con el cambio de escala L de la transformación de renormalización. Para redes discretas, como en nuestro caso, L es el número de spines en el bloque.

c) El salto del parámetro de orden en el punto fijo de discontinuidad es distinto de cero.

Es fácil verificar que el punto del mapa de fase $\gamma = 0, \delta = 1$ cumple estas condiciones. Esto está de acuerdo con lo obtenido por Hamber (Hamber 1980). Lo vamos a hacer para $\xi = 2$:

$$\gamma = 0 \Rightarrow \lambda_1 = \delta - 1 ; \lambda_2 = 0 , \quad (4.3.14)$$

después del truncado :

$$\begin{cases} \gamma' = \gamma = 0 \\ \delta' = 2(\delta - 1) + \delta, \end{cases} \quad (4.3.15)$$

o sea que el punto fijo para $\gamma = 0$ se obtiene con $\delta = 1$ y

$$\left. \frac{\partial \delta'}{\partial \delta} \right|_{\delta=1, \gamma=0} = 3, \quad (4.3.16)$$

el número de spines en el bloque.

El mapa de grupo de renormalización también muestra un punto fuente

para la fase ferromagnética en $\gamma = 0$, $\delta = -\infty$.

Las tablas 4.3 y 4.4 presentan los resultados correspondientes a (2 + 1) dimensiones y distintos números de coordinación.

	γ_{tc}	δ_{tc}
$\xi=3$	0.28	0.96
$\xi=4$	0.28	1.04

Tabla N 4.3 Coordenadas del punto tricritico para el modelo cuantico BC en (2+1) dimensiones y numeros de coordinacion de la red ξ distintos.

	y_1	y_2
Gaussiano	2	1
ORG $d=2+1, \xi=3$	1.58	0.46
ORG $d=2+1, \xi=4$	1.42	0.38
RG Variacional $d=3$ (Rijkema84)	2.01	0.5
desarrollo 3- ϵ $d=3$ (Chang, 74)	1.97	1.2

Tabla N 4.4 Exponentes criticos para el modelo BC cuantico en (2+1) dimensiones y para el BC clasico en 3 dimensiones.

El diagrama de fases obtenido por medio del flujo de las transformaciones del grupo de renormalización se muestra en la Fig 4.3 (ORG).

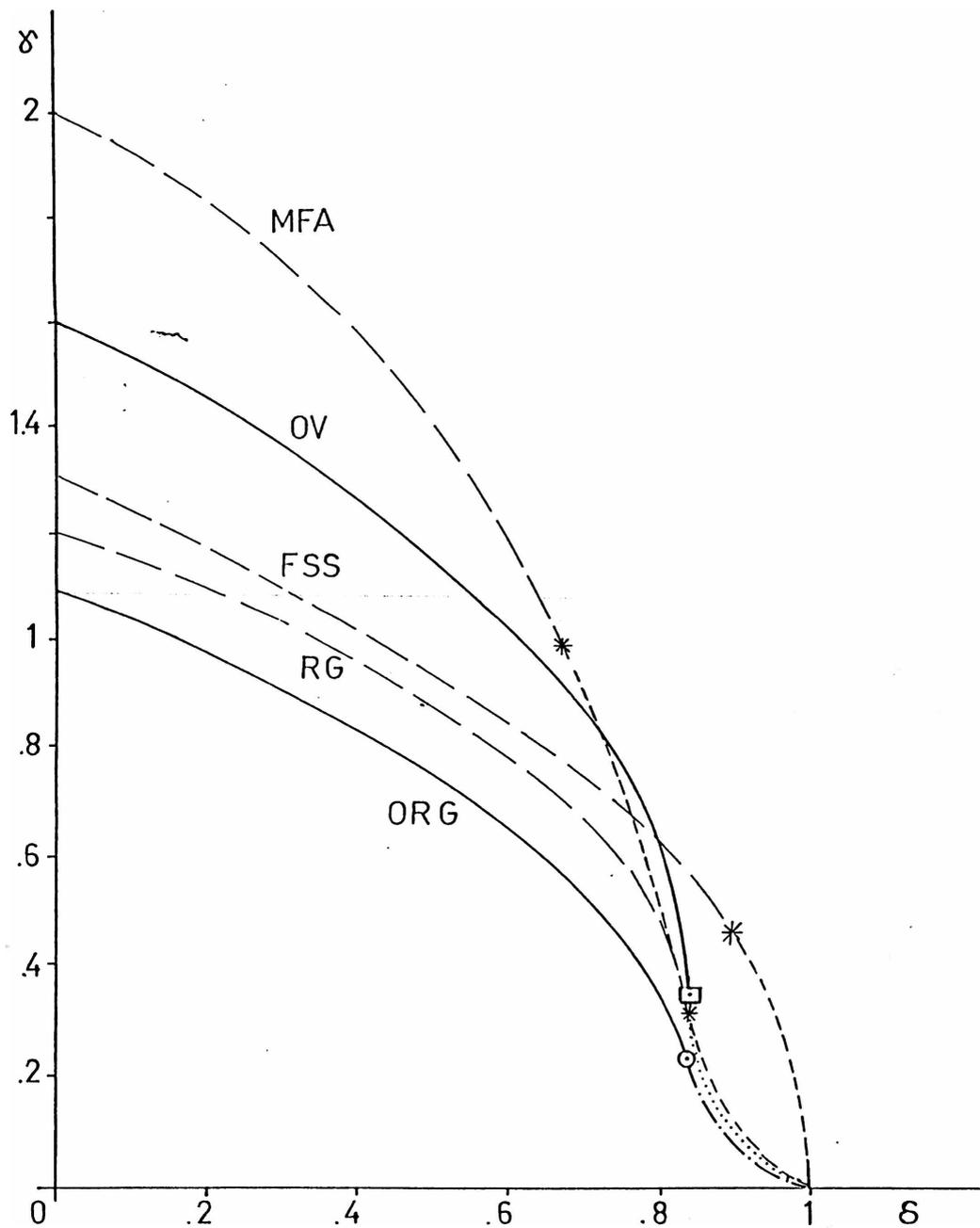


Fig. 4.3 Diagrama de fases (plano (γ, δ)) para el BC cuantico en $(1+1)$ dimensiones. MFA, RG (Hamber 80); FSS (Alcaraz 85); ORG, OV (Arizmendi 86).

Esta realización del grupo de renormalización define dos subredes interpenetradas con respecto a las posibles orientaciones de spin. Este hecho permite estudiar las propiedades antiferromagnéticas del modelo sin incluir acoplamientos de orden más alto. La ubicación del punto tricrítico y los exponentes críticos correspondientes se muestran en la Tabla 4.5. Los exponentes críticos coinciden con los de la fase ferromagnética. Esto se puede entender viendo que el cambio de signo que produce el comportamiento antiferromagnético puede ser absorbido por un cambio de signo de los spines de una de las redes interpenetradas. El diagrama de la fase antiferromagnética puede obtenerse del ferromagnético usando la simetría de las ecuaciones del grupo de renormalización bajo el cambio de los signos de δ y γ junto con la inversión del espectro del hamiltoniano del bloque (Ec.4.3.13 y 4.3.14).

	$\hat{\gamma}_t^c$	$\hat{\delta}_t^c$	$\hat{\nu}_1$	$\hat{\nu}_2$
$\xi=2$	-0.25	-0.83	1.85	0.64
$\xi=3$	-0.28	-0.96	1.58	0.46
$\xi=4$	-0.28	-1.04	1.42	0.38

Tabla N 4.5 Coordenadas de punto tricrítico y exponentes críticos para la fase antiferromagnética en (1+1) y (2+1) dimensiones.

4.4.METODO VARIACIONAL DE BLOQUES

Se ha aplicado el método variacional de bloques (Abad 1984) descrito en el Capítulo 2 al modelo cuántico de Blume Capel en (1+1) dimensiones para encontrar el diagrama de fases. En este caso el hamiltoniano de un sitio aislado es :

$$h_i = \gamma (s_x)_i + \delta (s_z)_i^2, \quad (4.4.1)$$

este hamiltoniano se diagonaliza ,dando lugar a tres autoestados con los que se formará la base :

$$|k\rangle = |i\rangle_1 |j\rangle_2 ; \quad \begin{cases} 1 \leq i \leq 3 \\ 1 \leq j \leq 3 \\ 1 \leq k \leq 9 \end{cases} . \quad (4.4.2)$$

Esta base se usa para resolver el hamiltoniano del bloque de dos sitios

$$H_1 = h_1 + h_2 - (s_z)_1 (s_z)_2 \quad (4.4.3)$$

y luego de la diagonalización se retienen los tres autoestados simétricos de más baja energía. Este procedimiento es iterado obteniéndose luego de $N + 1$ pasos la aproximación variacional al problema de 2^N sitios.

El diagrama de fases de la Fig. 4.3 se determinó a través de la degeneración del estado fundamental de hamiltoniano obtenido en forma variacional, o sea, la línea de transición de fase aparece en aquellos puntos del espacio de parámetros (γ, δ) en los que el primer gap de energía se comienza a anular. El punto tricrítico es aquel en el que se anulan simultáneamente el primer y el segundo gap. Los parámetros del punto tricrítico, obtenido con esta aproximación variacional se encuentran en la Tabla 4.1.

4.5 CONCLUSIONES

Los dos métodos propuestos, la realización del grupo de renormalización y el variacional, conducen a resultados muy razonables para el diagrama de fase y los parámetros tricríticos. Además el grupo de renormalización elegido permite considerar simultáneamente las fases ferromagnética y antiferromagnética, logrando así obtenerse los primeros valores reportados para los parámetros antiferromagnéticos de interés.

Se puede afirmar, por lo tanto, que la realización de grupo de renormalización y la técnica variacional implementadas, son apropiadas no sólo por su simplicidad, sino también por obtener buenos resultados comparados con aquellos obtenidos por métodos más sofisticados.

CAPITULO N 5

MODELO ANNI^(*)

5.1. MODELOS CON INTERACCIONES COMPETITIVAS

Los modelos con interacciones competitivas comparten las características generales de los modelos de spin en redes descriptos en la introducción, el rasgo distintivo que presentan es que muestran fuerzas conflictivas que actúan sobre los espines. Esto se produce cuando el carácter de la interacción depende de la posición relativa de los spines en la red. Por ejemplo, hay interacción ferromagnética entre primeros vecinos y antiferromagnética entre segundos vecinos en una dirección. El diagrama de fases presentará regiones ordenadas en las que predomina alguna de las interacciones y otras regiones en las que la competencia es importante, lo que da lugar a estructuras espacialmente moduladas.

(*) El material presentado en este capítulo constituyó el trabajo de seminario presentado por A.Rizzo en la UBA. El autor de la tesis fue co-director del mismo.

Estas estructuras espacialmente moduladas se encuentran en numerosas aplicaciones experimentales (Yeomans 1988), tales como las aleaciones binarias, los politipos y sistemas magnéticos con fuerte anisotropía axial.

Las aleaciones binarias, fundamentalmente las de metales nobles como Ag₃Mg, CuAu y Au₄Zn, pero también TiAl₃, presentan estructuras moduladas cuando son sometidas a condiciones de contorno de antifase a baja temperatura. Por ejemplo TiAl₃ presenta una estructura cristalina cúbica centrada en las caras en la que se alternan las posiciones de los átomos de Ti y Al al ser sometido a estas condiciones de antifase. Cada una de estas posiciones puede ser representada por un spin "up" o "down" en un modelo de spines con interacciones competitivas.

Los politipos son compuestos contruidos a partir de una o mas unidades estructurales que pueden ser ensambladas de diferentes maneras para obtener fases estables o metaestables. Los ejemplos mas conocidos son los llamados politipos clásicos como el carburo de sílice y el ioduro de cadmio en los que la secuencia de ensamblado de capas puede variar. Alrededor de cien estructuras diferentes se han encontrado en carburo de sílice con períodos del orden de cien capas. Otros politipos se pueden encontrar en espineles, peroskitas, micas, cloritos y muchas otras fases minerales.

Un ejemplo de sistema magnético que presenta estructuras moduladas es el antimoniuo de cerio. En este material una fuerte anisotropía uniaxial hace que los spines apunten en la dirección [100]. Los planos (100) presentan orden ferromagnético y estructuras moduladas con vector de onda en la dirección [100], que varía en función de la temperatura y el campo

magnético aplicado.

5.2. MODELO ANNNI

El primer modelo con interacciones competitivas fue introducido por Elliott (Elliott, 1961) para explicar las fases moduladas observadas en compuestos de tierras raras. El modelo consiste en un Ising ferromagnético cúbico simple con un acoplamiento antiferromagnético adicional entre segundos vecinos a lo largo de un dado " eje fácil ". Este modelo se conoce como ANNNI (" Axial Next Nearest Neighbor Ising ") a partir de un trabajo en que Selke lo llamó de esa manera (Selke 1980).

Esta situación puede ser representada por un sistema que posea un Hamiltoniano de la forma ($k = J_2/J_1$):

$$\mathcal{H} = -J_1 \left(\sum_i S_i S_{i+1} - k \sum_i S_i S_{i+2} \right) \quad (5.2.1)$$

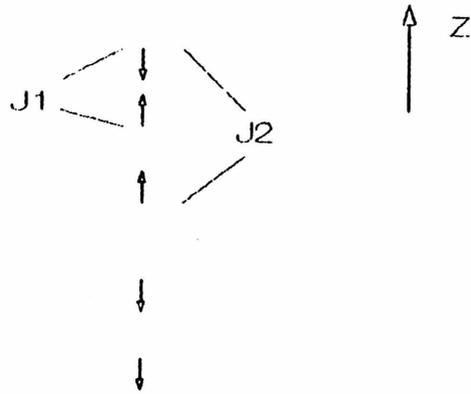


Fig N 5.1. Esquema del tipo de interacción en el modelo ANNNI-1d.
 $J_1 > 0$ y $J_2 < 0$.

El sistema consiste en una cadena de espines equidistantes con interacciones de primeros vecinos ferromagnética ($J_1 > 0$) y antiferromagnética ($J_2 < 0$) en los siguientes (Next-nearest-Neighbour) como está representado en la Fig. N 5.1. Este es el modelo ANNNI en una dimensión, $k = -J_2/J_1$ es la relación de competencia entre ambas interacciones. J_1 favorece la configuración ferromagnética (+ + ... + +) o (- - - ... - - -) o $\langle \infty \rangle$ mientras que J_2 la estructura llamada degenerada o (2,2) o $\langle 2 \rangle$ de la forma (+ + - - + + ... + + - - + +). A temperatura cero el estado fundamental es ferromagnético para $k < 1/2$ y antiferromagnético para $k > 1/2$. El estado fundamental correspondiente a $k = 1/2$ es infinitamente degenerado y este punto es conocido como multicrítico y a las líneas de transición en el plano J_1, J_2 como líneas multifase. En estas líneas se encuentran fases con bandas de espines (serie de espines contiguos con el mismo valor de spin, limitada por espines de valor contrario) de distinta longitud pero de la misma energía.

Ahora consideraremos el modelo ANNNI en una red rectangular de M columnas y N filas. A lo largo de la dirección x se tiene interacciones de primeros vecinos ferromagnéticas ($J_1 > 0$) y antiferromagnéticas ($J_2 < 0$) de segundos vecinos y a lo largo de la dirección y tenemos sólo acoplamiento ferromagnético entre primeros vecinos con constante J_0 positiva (ver Fig. 5.2). El Hamiltoniano fue introducido por Hornreich et al (Hornreich 1979) y se escribe ($k = J_2/J_1$):

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{i,j}^{N \times M} S_{i,j} S_{i,j+1} - k \sum_{i,j}^{N \times M} S_{i,j} S_{i,j+2} - J_0 \sum_{i,j}^{N \times M} S_{i,j} S_{i+1,j} \quad (5.2.2)$$

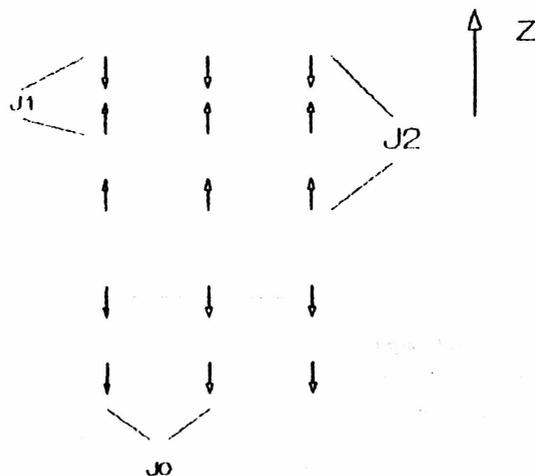


Fig N 5.2 Caso bidimensional.

El diagrama de fases del modelo se muestra en la figura N 5.3. Dos puntos relevantes en el diagrama se obtienen en límites en que el modelo presenta solución exacta: Para $k = 0$ el modelo corresponde a un Ising anisotrópico y el punto crítico correspondiente está señalado con la letra I en la figura. En $J_0 = 0$ se obtiene el ANNNI unidimensional (5.2.1) . El punto multicrítico correspondiente está designado con la letra M en la fig. 5.3.

La transición entre la fase ferromagnética y la paramagnética se produce a lo largo de la línea $T_c(k)$ para $k < 0.5$. Para valores de $k > 0.5$ se producen dos transiciones :

T_2 es la línea que separa la fase ordenada ($\langle 2 \rangle$) de la fase flotante incommensurable (floating incommensurate) Esta fase es característica de ANNNI en dos dimensiones y aparece debido a que las fluctuaciones térmicas hacen desaparecer las características de series commensurables de alto orden y procesos de ramificación de la fase modulada del modelo ANNNI en tres dimensiones.

$T_u(k)$ limita la fase incommensurable y la desordenada. La fase desordenada presenta dos tipos de comportamiento. Uno típicamente fluido o paramagnético con función correlación $\Gamma(r) \sim e^{-r/\xi}$ y el otro donde los efectos de la interacción de segundos vecinos comienza a pesar a temperaturas donde aparece un término de modulación en la correlación, $\Gamma(r) \sim e^{-r/\xi} \cos(qr)$. Esta fase es denominada desordenada . La línea que separa ambas fases es denominada línea de desorden (DOL disorder line). Esta línea se caracteriza por que a partir de ella (para k menores) el vector modulación q comienza a anularse ($\cos(qr)=1$).

ANNNI-2d

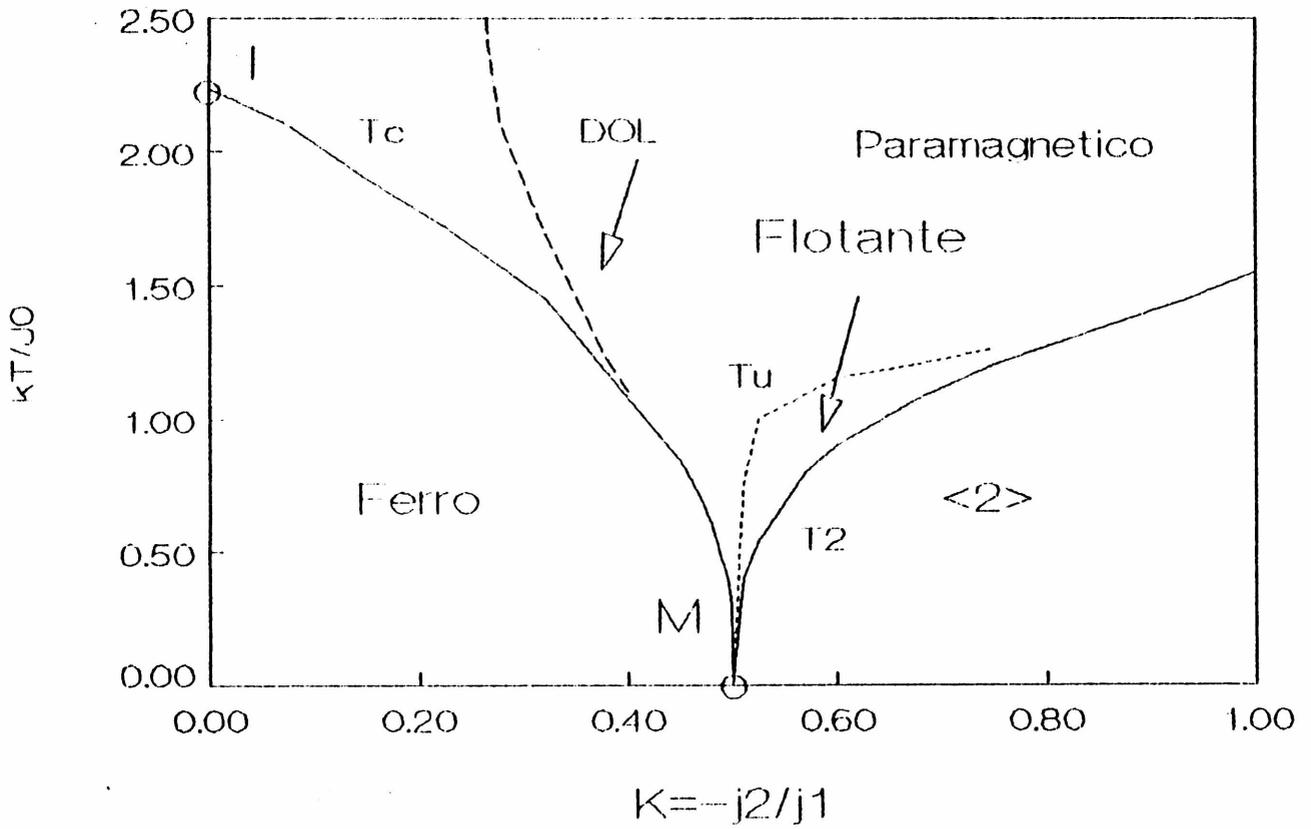


Fig.5.3 Diagrama de fases del modelo ANNNI - 2d.

5.3 - ANNI 2-D - DETERMINACION DE LAS LINEAS DE TRANSICION DEL MAPA DE FASES MEDIANTE DISTINTOS METODOS

5.3.1 METODOS ANALITICOS

Las líneas de transición ferro - para y $\langle 2 \rangle$ - flotante, incommensurable, identificadas por T_c y T_z en la figura 5.3, pueden ser determinadas por el método de Müller-Hartmann y Zittartz (MH-Z) (Müller-Hartmann y Zittartz 1977). Este método consiste en el cálculo de la energía libre de una interfase construida en una aproximación conocida como SOS ("solid on solid") en la que las fluctuaciones de la interfase son "kinks" sin re-entrada. Las líneas $T_c(K)$ y $T_z(K)$ se determinan por la condición que la energía libre de la interfase se anule en la transición. Este método provee buenas estimaciones de temperaturas de transición en modelos de Ising bidimensionales.

De esta forma se llega para $T_c(K)$ a la ecuación

$$\sinh(2(J_1/kT + 2J_z/kT))\sinh(2J_0/kT) = 1. \quad (5.3.1)$$

Para $K > 1/2$ la línea de transición $T_z(K)$ se obtiene de

$$\ln(\coth(J_0/kT)) = (3K - 1)J_0/kT. \quad (5.3.2)$$

El método MH-Z no es apropiado para identificar la transición entre

las fases flotante incommensurable y la desordenada, caracterizada por las dislocaciones. Esta transición puede ser estudiada por medio de la aproximación de fermiones libres (Villain y Bak 1981). En este estudio se trata el sistema como una serie de "tiras" infinitas de spines positivos y negativos separadas por "paredes". Como primera aproximación se permite que estas paredes presenten "kinks" (aproximación válida a temperaturas muy bajas) y se encuentra que el sistema presenta tres fases: la ferromagnética, la $\langle 2 \rangle$ y la flotante. Las líneas resultantes $T_2(K)$ y $T_0(K)$ están de acuerdo con las obtenidas con MH-Z. También se obtiene la función correlación para la fase flotante que es de la forma

$$\langle S(0) S(r) \rangle \simeq r^{-\nu} \cos(qr\pi) . \quad (5.3.3)$$

Este decaimiento algebraico en la función correlación es característico de esta fase.

En una segunda aproximación se toman en cuenta las dislocaciones en las paredes y se encuentra la transición entre la fase flotante y la paramagnética o desordenada. Esta coincide con la representada en la fig. 5.3.

Una variación de este método de fermiones libres en la que se considera interacción entre paredes fue aplicada recientemente al modelo ANNNI bidimensional con interacción de terceros vecinos por Grynberg y Ceva (Grynberg 1990) obteniendo en esa aproximación una variación continua del número de ondas, así como plateaus y fenómenos de reentrada.

En este modelo de ANNNI bidimensional se encontró solución exacta sobre una línea del mapa de fases. A lo largo de esa línea el modelo se puede asociar a un modelo unidimensional de Ising cinético que presenta solución exacta, obteniendo así la expresión de la longitud de correlación $\xi^{-1} = -\ln(2K)$. Esta línea, llamada unidimensional, se acerca mucho a $T_c(K)$ para $0.35 < K < 0.5$ y termina en el punto multifase como se puede observar en la fig. 5.4. Este resultado demuestra que la fase desordenada se extiende hasta el punto multifase. Aun no se ha podido determinar si las líneas de desorden y unidimensional coinciden.

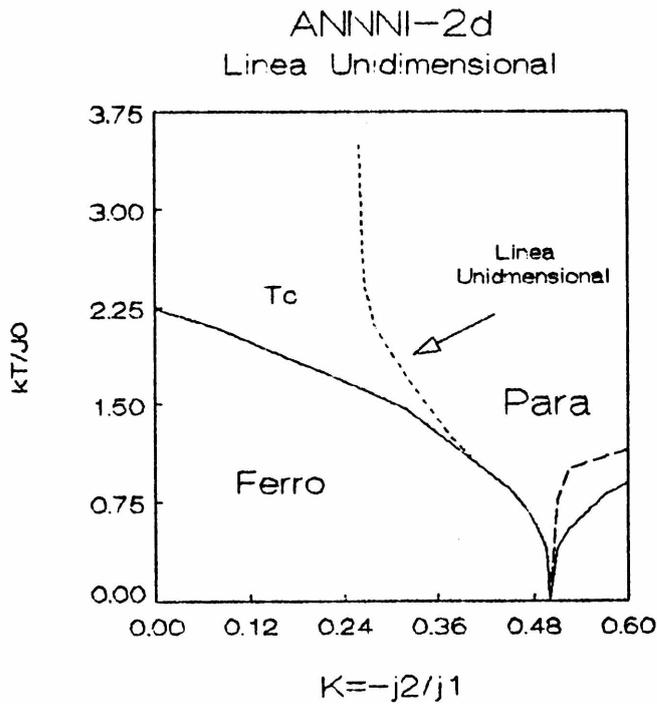


Fig N 5.4

5.3.2 METODOS NUMERICOS

Se ha discutido mucho sobre la eficacia de la aplicación de métodos numéricos como Monte Carlo o matriz de transferencia al modelo de ANNNI 2d. Entre las causas de esta discusión se encuentra el hecho de que los cálculos de Monte Carlo (Hornreich 1979, Selke 1980) predican erróneamente la existencia de un punto de Lifshitz sobre la frontera ferro-para que sí existe en el ANNNI 3d, pero no en el ANNNI 2d (ver fig. 5.5). La determinación de las líneas de transición en estos cálculos de Monte Carlo se realizó por medio de la divergencia en el calor específico y la susceptibilidad.

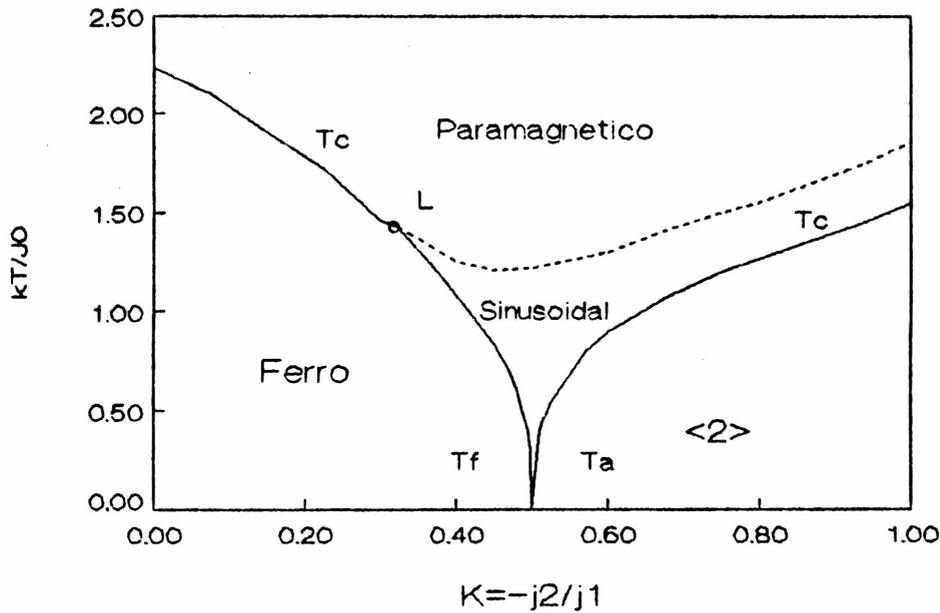


Fig N 5.5 Mapa obtenido por Selke y Fisher por el metodo de Monte Carlo observese sobre la frontera ferromagnetica el conflictivo punto tricritico de Lifshitz.

En otro trabajo de Monte Carlo (Selke 1983) se obtiene un mapa de características similares al de la Fig. 5.3 usando un método cualitativo y poco preciso que consiste en diferenciar las fases por medio de su estructura topológica.

En 1984 aparece un Brief Report del Physical Review B (Morgenstern 1984) en el que se afirma que tanto el método de Monte Carlo como el de matriz de transferencia producen efectos de congelamiento de estados, dando resultados incorrectos para los sistemas que presentan estructuras moduladas. Este hecho influiría principalmente en la distinción entre la fase flotante y la

desordenada. Se llega a esta conclusión por medio de la aplicación de Monte Carlo y la evaluación exacta de matriz de transferencia a sistemas pequeños de $N \times N$ con $N \leq 28$. Además el cálculo de Monte Carlo se hace en puntos situados en la línea crítica de transición entre la fase degenerada y la flotante inconmensurable y es en los puntos críticos donde el método de Monte Carlo es menos preciso.

El método de matriz de transferencia escaleado, o escaleado de tamaño finito (finite size scaling) consiste en resolver exactamente por medio de la matriz de transferencia sistemas de $\infty \times N$, con $N = 1, 2, 3, \dots$. Los dos autovalores más grandes de la matriz determinan la longitud de correlación ξ_N y el número de onda de modulación q_N . La longitud de correlación de una de estas tiras de $\infty \times N$ tendrá una dependencia con N característica de la fase del sistema bidimensional. En el modelo ANNNI la longitud de correlación en la fase ordenada crece exponencialmente con N cuando $N \rightarrow \infty$, en la fase desordenada es asintóticamente independiente de N y en la fase flotante así como en los puntos críticos crece algebraicamente con N cuando $N \rightarrow \infty$. Por medio del escaleo de funciones de ξ_N y q_N se han obtenido estimaciones de $T_c(K)$, $T_u(K)$ y $T_z(K)$ (Beale 1985) con un buen acuerdo con las expresiones analíticas (ver fig. 5.6). Una técnica más rápida y eficiente para encontrar estos autovalores es descrita en el trabajo de Grynberg y Ceva (Grynberg 1987).

ANNNI-2d
Beale,Duxbury,Yeomans 85

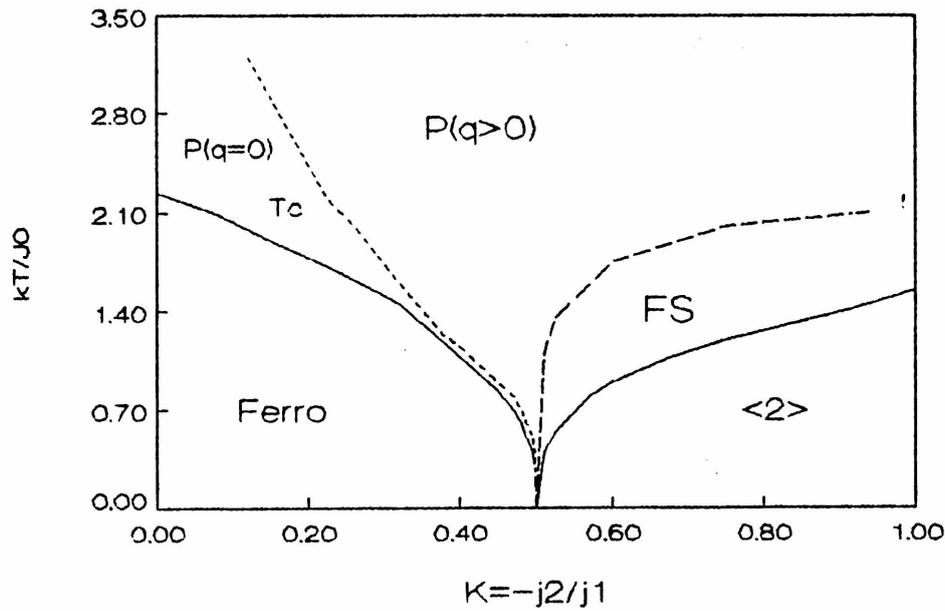


Fig N 5.6

Otra técnica numérica que dio buenos resultados en el modelo ANNNI 2d es el método de variación de cluster (CVM) (Finel 1986). Esta técnica consiste esencialmente en la comparación de las energías libres de las distintas fases, de forma que el estado de equilibrio corresponderá a la fase de energía libre mínima. El mapa de fases obtenido se muestra en la fig. 5.7.

Por último es importante mencionar una técnica dinámica en la que se compara, por medio de un Monte Carlo dinámico, la evolución temporal de dos configuraciones distintas de spin sometidas al mismo ruido térmico (Barber 1988). La aplicación de la misma concuerda con los resultados del método de variación de cluster en el que las transiciones $\langle 2,2 \rangle$ - flotante incommensurable - desordenada se producen para valores mayores de temperaturas que en los otros trabajos (ver fig.N 5.7).

ANNNI-2d
Finel y De Fontaine 86, Barber 88

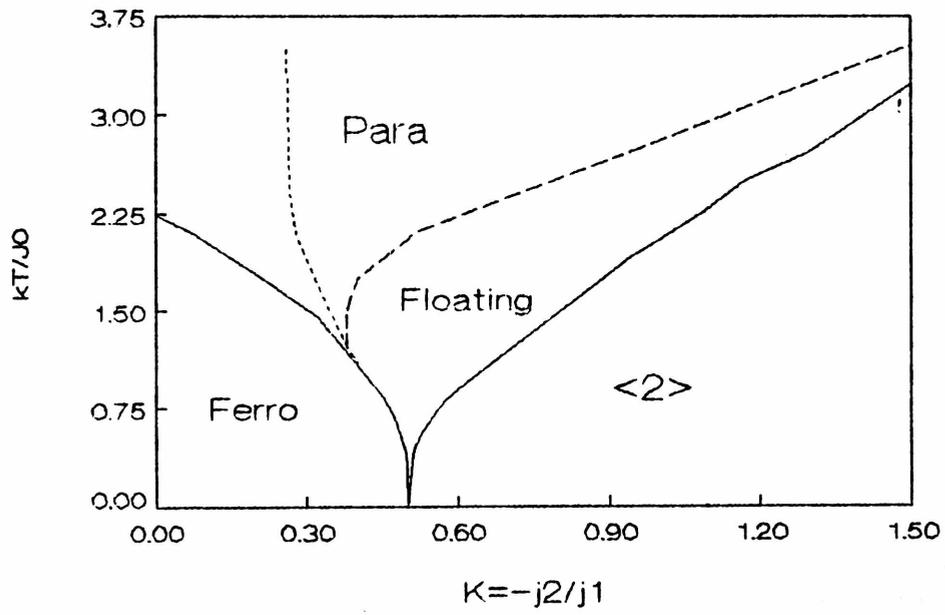


Fig N 5.7

5.4 NO SIRVE EL METODO DE MONTE CARLO PARA ANNNI-2D ?

Esta pregunta surge de los resultados mostrados en el ítem anterior. Evidentemente, de acuerdo a los resultados obtenidos y que también nosotros repetimos, el Monte Carlo en el que se calculan los valores tradicionales (Energía, Calor específico, susceptibilidad, etc.) no sirve. Sin embargo, dos observaciones que realizamos nos llevaron a pensar que el método de Monte Carlo puede ser apropiado para el modelo de ANNNI :

- En nuestras simulaciones observamos que los estados estacionarios alcanzados al aplicar Monte Carlo tenían buen acuerdo con el mapa aceptado en la actualidad.

- Corridas a I_m/J_1 constante y variando el cociente de constantes de interacción $K=J_2/J_1$, que no se habían realizado en otros trabajos, dieron un máximo en el calor específico C_v en puntos que coinciden con la transición para-sinusoidal de los trabajos de Villain y Bak, Beale et al y Finel y De Fontaine y que no fue detectado en anteriores trabajos de Monte Carlo.

Además con el método de Monte Carlo también es posible calcular longitud de correlación, que tan buenos resultados diera con matriz de transferencia.

Esto nos llevó a plantearnos si es posible identificar todos los tipos de estructuras que aparecen en el mapa de fases de ANNNI por medio de las distintas formas que la función correlación toma en cada zona del mapa y los valores correspondientes de la longitud de correlación y además dar una respuesta a las siguientes cuestiones :

* Diferencia notable en los valores de transición $\langle 2 \rangle$ -Flotante inconmensurable entre varios métodos.

* Coinciden la línea de desorden DOL y la unidimensional ODL como se supone en la actualidad ?

5.5 LIMITE HAMILTONIANO DE ANNNI 2-D

La versión hamiltoniana del modelo ANNNI en dos dimensiones se obtiene por medio de la matriz de transferencia (Cap.1). El hamiltoniano resultante es

$$H = -J_1 \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - J_2 \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z - I \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \quad (5.5.1)$$

El diagrama de fases de esta versión cuántica unidimensional se ha obtenido por medio del desarrollo en series de perturbaciones explicado en el Cap. 2 (Barber y Duxbury 1982). El mapa de fases obtenido se muestra en la figura 5.8. Las líneas de transición ferro-para y $\langle 2 \rangle$ -flotante coinciden con las obtenidas con el método MH-Z .

ANNNI-1d-Cuántico

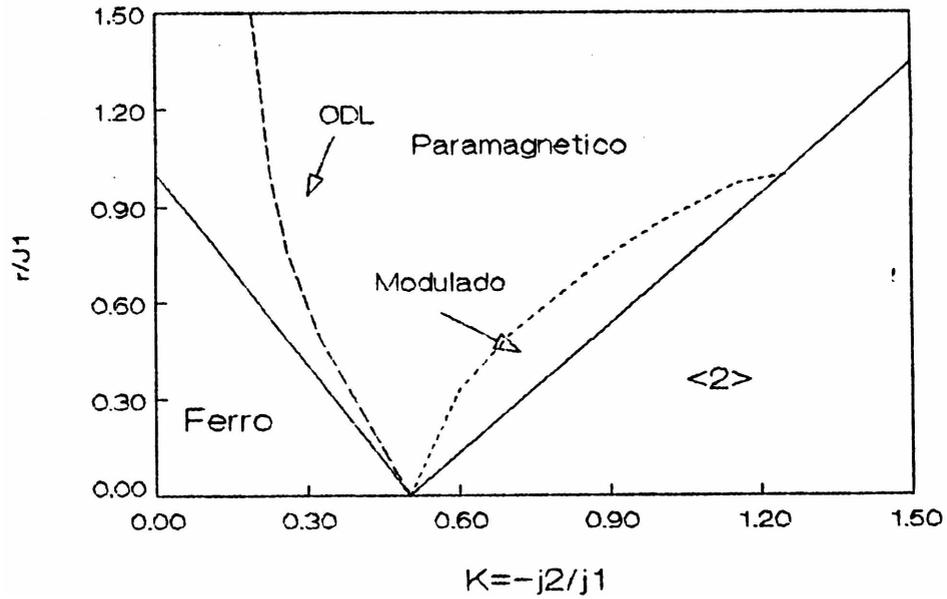


Fig. 5.8 Diagrama de fases de la versión cuántica ANNNI-1d.

El modelo cuántico también ha sido estudiado con técnicas de "finite size scaling" (Penson 1984) obteniéndose resultados acordes con los obtenidos con desarrollo en series. Nosotros nos propusimos el estudio de la versión cuántica de ANNNI por el método de Monte Carlo, estudio que no había sido realizado hasta ese momento.

5.5.1 MODELO CLASICO EQUIVALENTE

Como ya se mencionó en el Cap. 2 el estudio de un sistema cuántico por Monte Carlo requiere la aproximación del mismo por un sistema clásico. En el método de Monte Carlo estadístico cuántico (Suzuki 1976) se construye un modelo clásico equivalente al sistema cuántico en una dimensión superior.

En nuestro caso el Hamiltoniano es

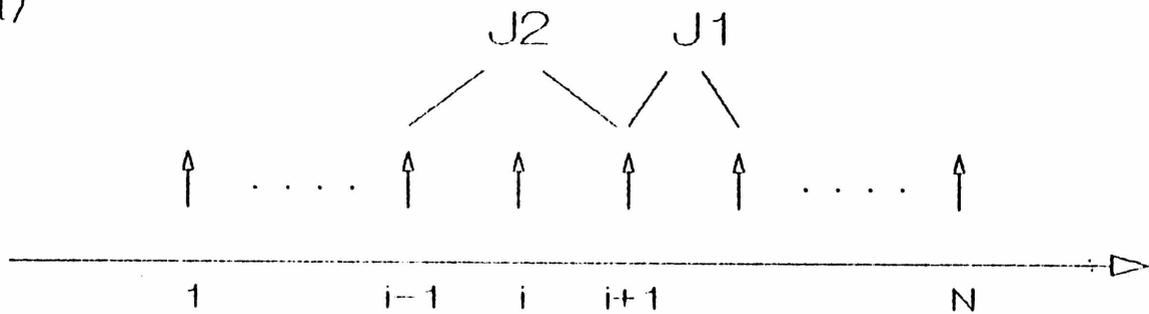
$$H = H_1 + H_2 + H_3 = -J_1 \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - J_2 \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z - \Gamma \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \quad (5.5.1)$$

o sea que es igual a modelo de Ising transversal, para el que se halló el modelo clásico equivalente en el Cap. 2, mas un término que tiene los mismos operadores que el de interacción de Ising pero entre segundos vecinos, es fácil ver que luego de las transformaciones mostradas en el Cap. 2 se obtendrá

$$H = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N \times m} (J_1/m' S_{ij} S_{i+1j} + J_2/m' S_{ij} S_{i+2j} + .5 \ln(\coth(1/m)) S_{ij} S_{i+1j}) \quad (5.5.2)$$

La simulación por el método de Monte Carlo se realizará sobre este modelo clásico bidimensional con N espines horizontales y $N \times m$ espines verticales (dimensión de Trotter) (ver Fig. 5.9) y condiciones de contorno periódicas.

(a)



b)

Dirección de
Trotter

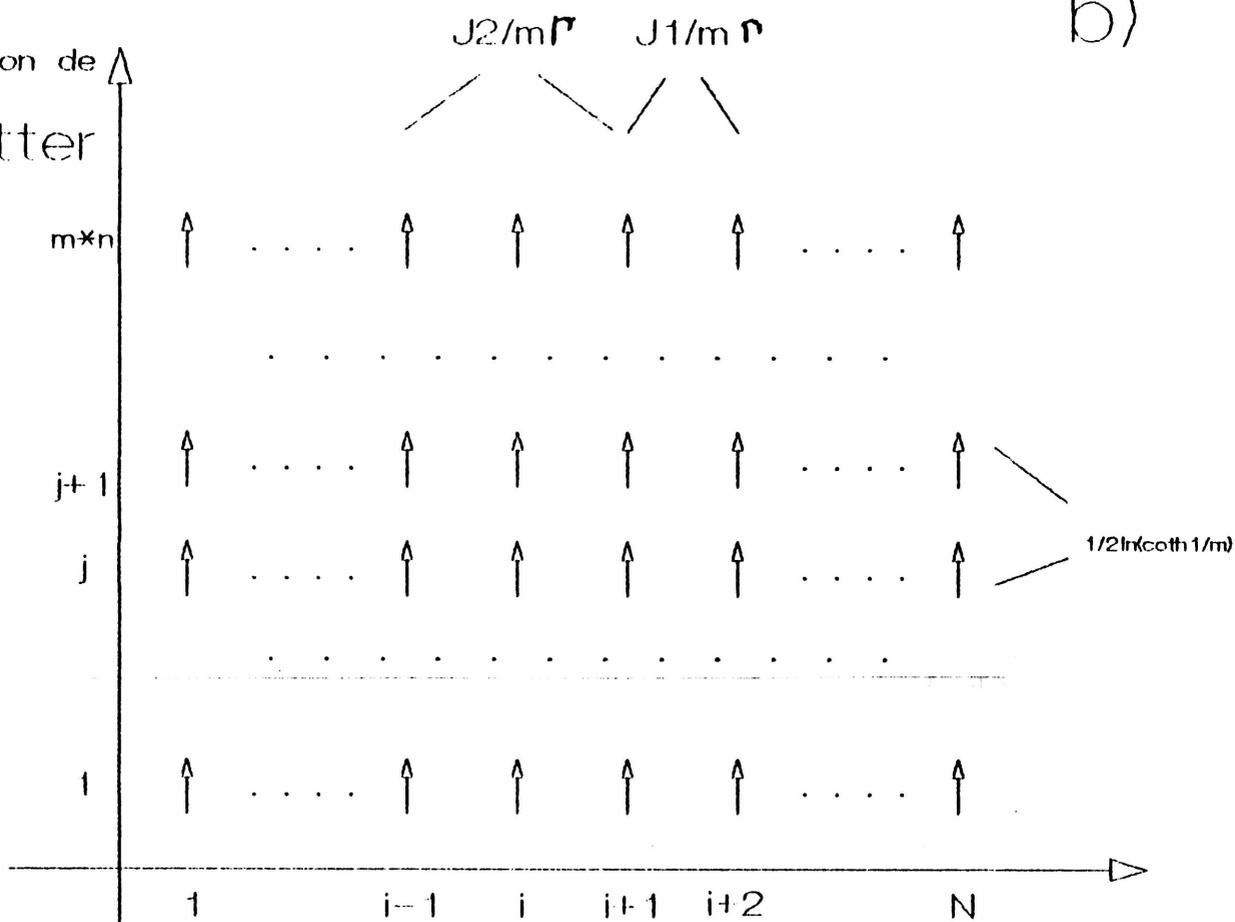


FIGURA N^o 5.9. Equivalencia entre el modelo cuántico 1d (a) y el modelo clásico 2d (b).

Este sistema clásico en dos dimensiones se distingue del que se estudia tradicionalmente por ser anisótropo . En los trabajos publicados sobre el ANNNI bidimensional la constante de interacción de primeros vecinos en dirección horizontal es igual a la de primeros vecinos en dirección vertical mientras que en este sistema (equivalente al cuántico) la constante de interacción en la dirección vertical (en la dimensión de Trotter) sólo depende de m el índice de Trotter y no es necesariamente igual a J_1 . Es decir J_1 y J_2 varían su valor libremente mientras que $J_2 = .5 \ln(\coth(1/m))$.

En la figura N° 5.10 se ven los ejes del mapa de fase que se desea calcular. Los ejes z e y son los que aparecen en casi todos los trabajos sobre el modelo ANNNI . Debemos agregar un tercer eje, el x en este caso, debido a que J_2 no es necesariamente igual a J_1 . Se ve como a medida que cambia el valor de m , cambia el plano en el mapa de fase anisótropo. Por ejemplo el mapa del modelo cuántico unidimensional coincide con el bidimensional clásico con $\Gamma_m/J_1=0$ es decir el plano $z=0$. Este plano es imposible de calcular por que la red del sistema es de tamaño infinito (pues m y n son iguales a infinito). Mientras que los mapas calculados para modelos clásicos bidimensionales isotropos $J_1=J_2$ coinciden con el plano vertical $x=1$. El ANNNI clásico unidimensional es el plano $x=0$. El mapa calculado en el trabajo de W.Selke para poder calcular el punto de Lifshitz en $k=\infty$ es un plano vertical que atraviesa la figura.

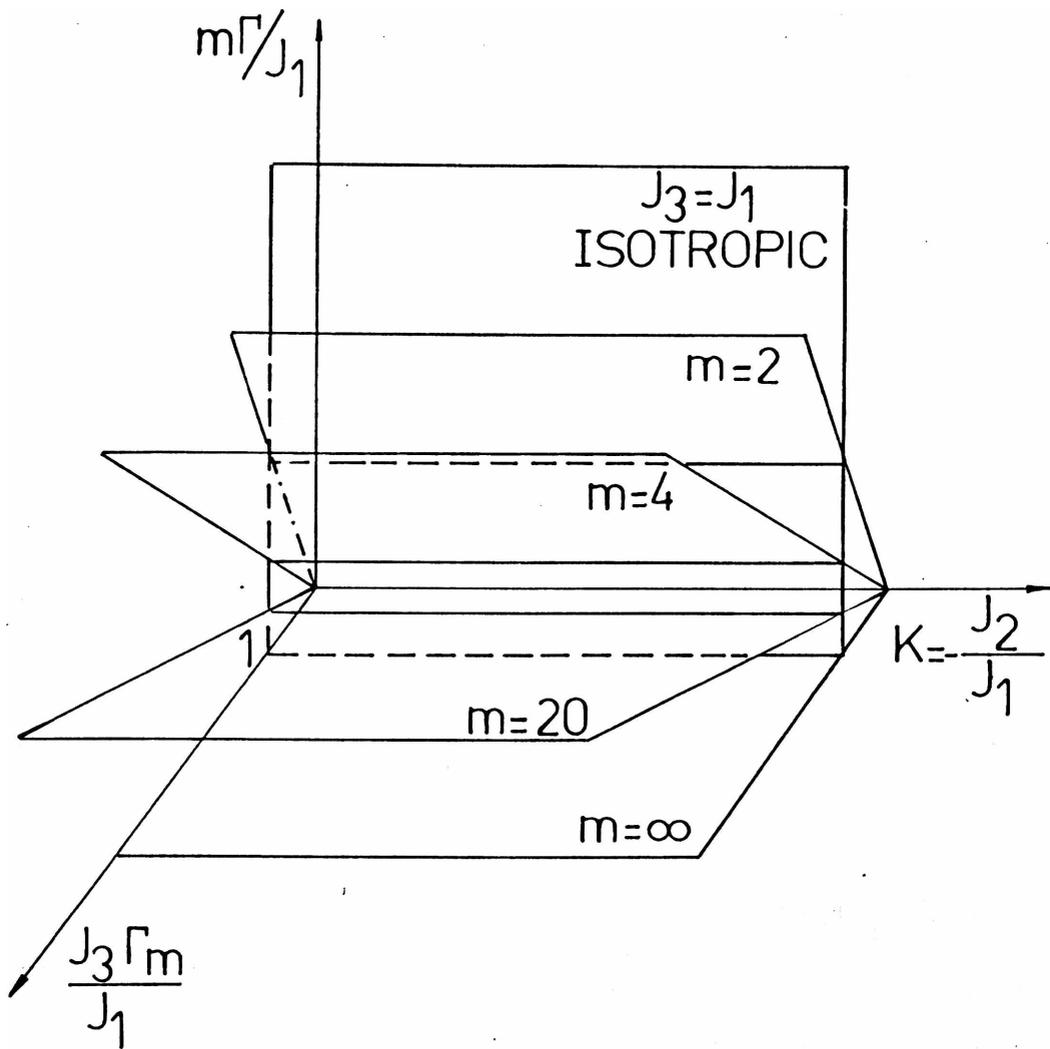


FIGURA N^o 5.10 Ejes para el diagrama de fases. El diagrama clasico corresponde a $J_3=J_1$. El cuantico a $m, n \rightarrow \infty$.

5.6. ES POSIBLE CONSTRUIR EL MAPA DE FASES DE ANNNI A TRAVES DE LA FUNCION Y LONGITUD DE CORRELACION CALCULADAS POR MONTE CARLO ?

Evidentemente la respuesta debe ser afirmativa, ya que en el método de la matriz de transferencia se determina el diagrama de fases utilizando el hecho de que ξ escala de diferente manera de acuerdo a que se esté en la región ordenada, desordenada o flotante del mapa de fases. En el cálculo por Monte Carlo la forma en que se usaron la función y longitud de correlación para determinar las líneas de transición en el mapa de fases es la siguiente:

a) Transición ferromagnética - paramagnética.

Esta es una línea crítica por lo que la longitud de correlación debe diverger en el sistema infinito. En la simulación finita este hecho se debe ver reflejado en un máximo en ξ .

b) Líneas de desorden (DOL) y unidimensional (ODL).

La línea de desorden separa fases desordenadas con funciones de correlación distintas. Para la zona de valores de K menores se tiene la fase fluida en la que la función correlación es $\langle S(0) S(r) \rangle \sim \text{Exp}^{-r/\xi}$. Del lado derecho de esta línea se encuentra la fase desordenada en la que la característica de la función correlación es similar pero comienzan a pesar las interacciones competitivas de segundos vecinos que producen estructuras periódicas, por lo tanto la función correlación se expresa como

$$\langle S(0)S(r) \rangle \sim \text{Exp}^{-r/\xi} \cos(qr).$$

La línea unidimensional se caracteriza por presentar un mínimo en la longitud de correlación horizontal (Rujan 1981).

c) Transiciones desordenada-flotante incommensurable-⟨2⟩

Sabemos que la fase flotante incommensurable posee una función correlación

$$\Gamma(r) = \langle S_{00} S_{0+r} \rangle \sim r^{-\nu} \cos(qr), \quad (5.6.1)$$

por lo que se afirma (Finel 1986) que esta fase es como una "zona crítica" por el comportamiento algebraico típico de las transiciones de segundo orden. Es de esperar que este comportamiento se manifieste en magnitudes como la longitud de correlación que en estas condiciones debería diverger. En efecto en esta fase la longitud de correlación tiende a infinito lo que en nuestra simulación de Monte Carlo se deberá manifestar de forma que la longitud de correlación tome valores mayores que el tamaño de la red utilizada. En las otras dos fases la longitud de correlación presentará valores finitos.

5.7 CALCULO DE MONTE CARLO

El cálculo de Monte Carlo se llevó a cabo usando el algoritmo de Metropolis (Metropolis 1953). El tamaño de las redes se varió entre 60 y 200 sitios en dirección horizontal y entre 30 y 100 en la vertical. El índice de Trotter m se varió entre 2 y 10. Los resultados que se reportan corresponden a $m=6$ porque los casos de $m=4$, $m=8$ y $m=10$ no presentan diferencias significativas. Se usaron entre 5×10^3 y 10^4 pasos de Monte Carlo como termalización del sistema. Los promedios se realizaron con 10^4 a 10^5 pasos de Monte Carlo.

5.7.1. FUNCION DE CORRELACION:

HORIZONTAL:

$$\Gamma^{-1}(r) = \langle S_{0+r,0} S_{0,0} \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^M S_{i,N/2} S_{i,N/2+r} \right\rangle \quad (5.7.1)$$

VERTICAL:

$$\Gamma^{-1}(r) = \langle S_{0,0+r} S_{0,0} \rangle = \left\langle \sum_{j=1}^N S_{M/2,j} S_{M/2+r,j} \right\rangle \quad (5.7.2)$$

Sólo se calcula la función correlación para la mitad de los puntos de la red, es decir que si tomamos el centro de la red ($r=N/2$) como origen ($S_{0,0}$) el r variará hasta $r=N/2+N/2=N$ es decir la frontera de la red original. No tiene sentido calcular correlaciones para puntos más alejados pues las condiciones de contorno periódicas de la red hacen que esta sea simétrica a partir de la frontera de la red.

5.7.2. LONGITUD DE CORRELACION

Hay dos formas de cálculo posibles. En la primera se ajustan las curvas a través de una regresión no lineal y se obtiene la inversa del exponente. La otra forma es tomar $\ln(\Gamma(r))$ y luego hacer una regresión lineal, obteniendo ξ como la inversa de la pendiente. Se toman en ambos casos los valores de la función correlación para valores grandes de r . Alejados de las transiciones ambos métodos coinciden al 0.1% en cambio cerca de las líneas de transición difieren en un 5 % tomando siempre en la presentación de resultados el caso que presenta mayor error. En todos los puntos del mapa se calcularon las longitudes de correlación para la función correlación horizontal y la vertical ξ^{\parallel} , ξ^{\perp} .

5.8. DIAGRAMA DE FASES

La figura N 5.11 muestra el mapa de fases obtenido a través de estos cálculos. El mapa presentado corresponde a los valores $m=6$ y $n=10$, que se puede tomar como una buena aproximación al mapa cuántico (m infinito) del estado fundamental. Algunos de los puntos calculados se presentan con sus errores estadísticos.

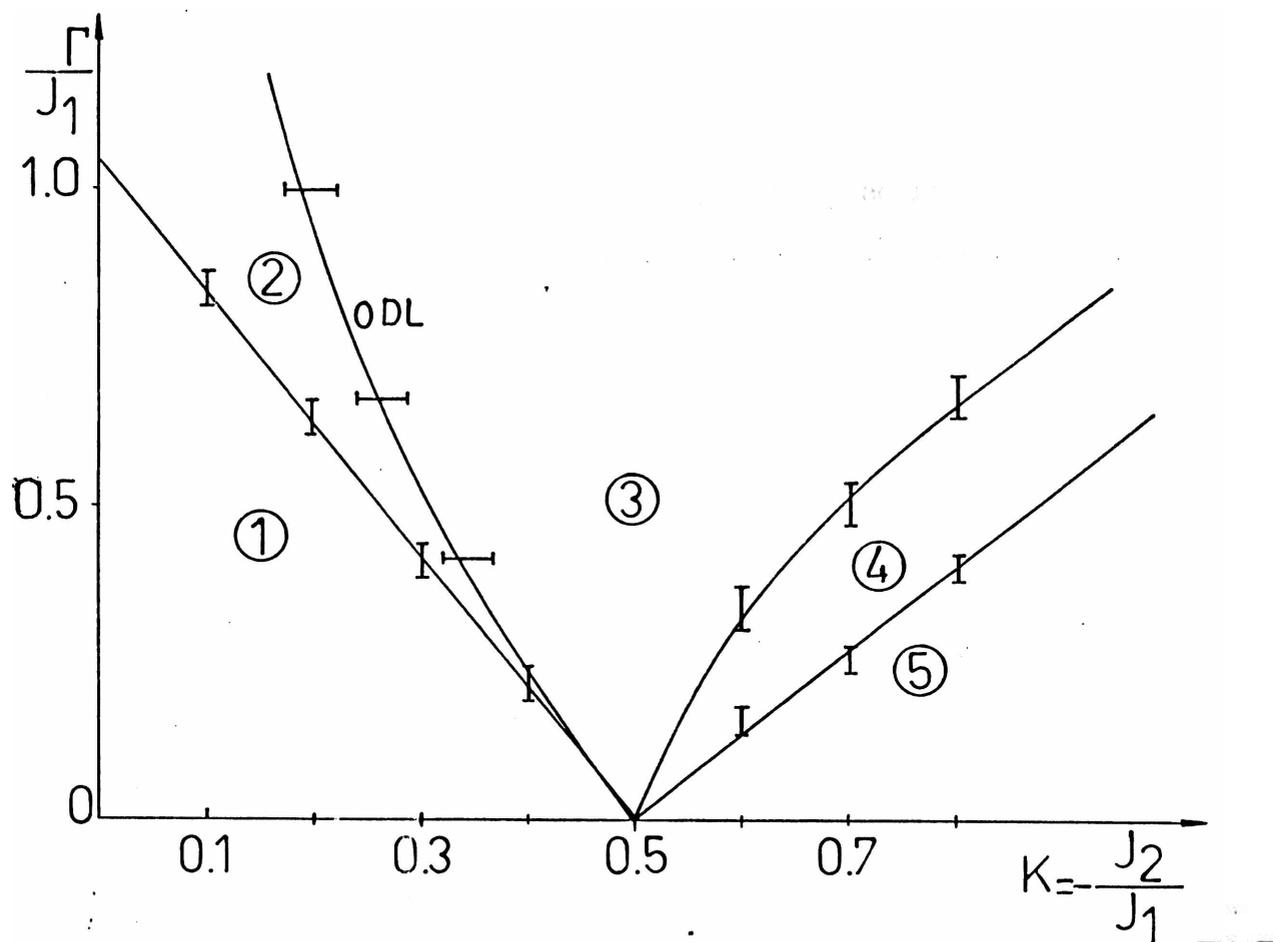


Fig N 5.11. Mapa de fases completo del modelo ANNNI cuantico en (1+1) dimensiones. Fases: 1- Ferromagnetica, 2- Fluida, 3- Desordenada 4- Flotante incommensurable, 5- Degenerada <2>.

5.8.1 LINEA DE TRANSICION FERROMAGNETICA-FLUIDA

Esta línea separa las regiones 1 y 2 del diagrama de fases. Fue obtenida por la ubicación del máximo en las longitudes de correlación horizontal y vertical. La línea resultante presenta muy buen acuerdo con la expresión analítica obtenida por el método MH-Z (5.3.1).

5.8.2 LINEA DE DESORDEN (DOL) Y LINEA UNIDIMENSIONAL (ODL)

La línea de desorden separa la fase fluida de la desordenada (2 y 3 en la fig. 5.11). Dado que en la fase fluida la función correlación horizontal va como $\exp(-r/\xi^{\parallel})$, mientras que en la desordenada aparece un factor de modulación: $\exp(-r/\xi^{\parallel}) \cos(qr)$; la transición entre estas dos fases se puede detectar cuando $q \rightarrow 0$. El cambio de comportamiento de la función correlación al atravesar la línea de desorden se puede observar en la Fig. 5.12. La fig. 5.12 a presenta una función de correlación con decaimiento exponencial puro característico de la fase fluida. En la 5.12 b si bien aparece una modulación, no presenta paso por cero, por lo tanto también corresponde a $q = 0$. Las figuras 5.12 c y d presentan oscilaciones distintas a las de b ya que en estas sí se produce el paso por cero. Se verificó que aumentando el tamaño de la red las oscilaciones de 5.12 b decrecen y tiende al decaimiento de la fig. 5.12 a. Esto implica que estas oscilaciones son efectos de segundo orden debidos a la proximidad de zonas en las que la interacción de segundos vecinos juega un papel importante.

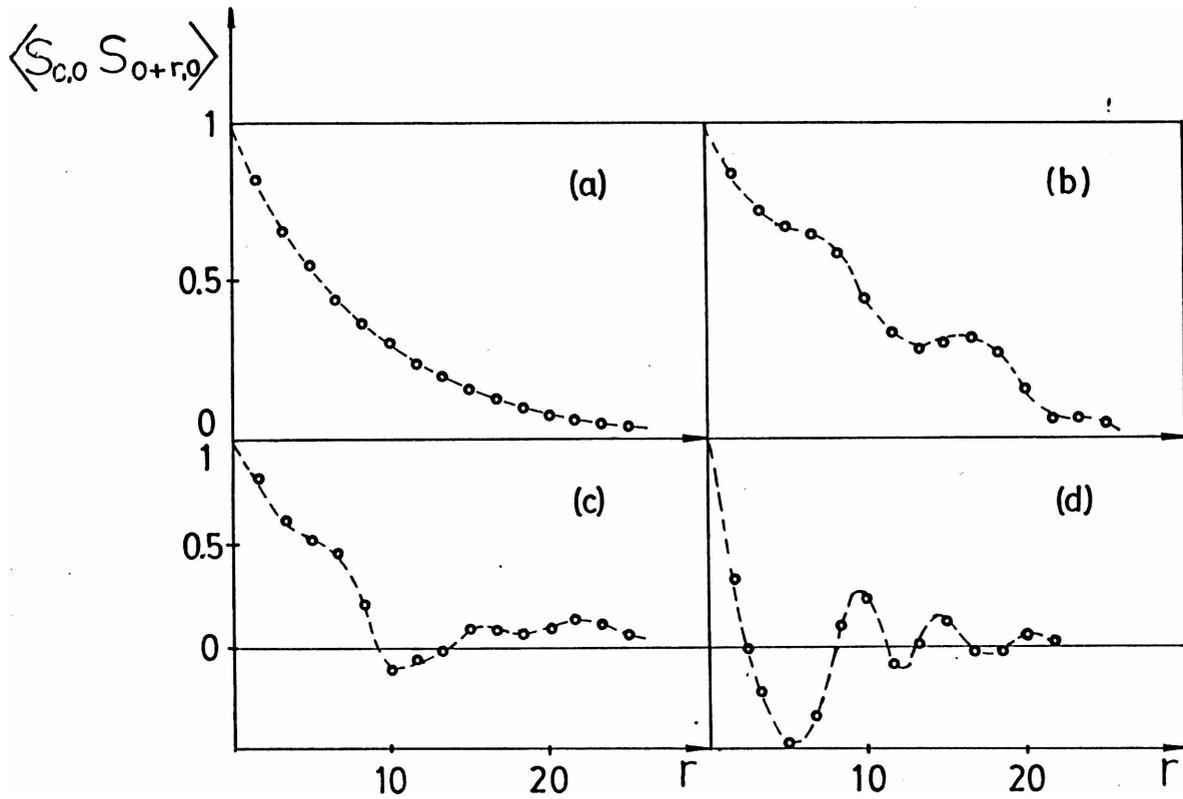


Fig N 5.12 Comportamiento de la función de correlación al atravesar la línea de desorden (DOL) para $\Gamma/\Omega=1.2$. a fase fluida neta, $K=0$; b fase fluida cerca de DOL, $K=0.1$; c fase desordenada cerca de DOL, $K=0.25$ d fase desordenada neta, $K=0.5$

En nuestro trabajo se detectó la línea unidimensional a través del mínimo en la longitud de correlación horizontal.

La figura N 5.13 muestra el comportamiento de la longitud correlación horizontal en función de la relación k entre las constantes de interacción. Claramente se detecta un mínimo en esta magnitud en el rango $0.2 < k < 0.3$ que por ser tan amplio no permite diferenciar si esta línea es la misma que la de desorden. Este cálculo está hecho para un valor $\Gamma/J_1=1.2$.

La línea graficada en la fig. 5.11 corresponde a la expresión analítica de la línea unidimensional (Peschel y Emery 1981). Los resultados obtenidos presentan un buen acuerdo con la expresión analítica.

Si bien se determinaron las líneas unidimensional y de desorden por distintos métodos no pudieron ser claramente discriminadas numéricamente. Por esa razón las barras de error en la fig. 5.11 valen para los resultados de la simulación de ambas líneas.

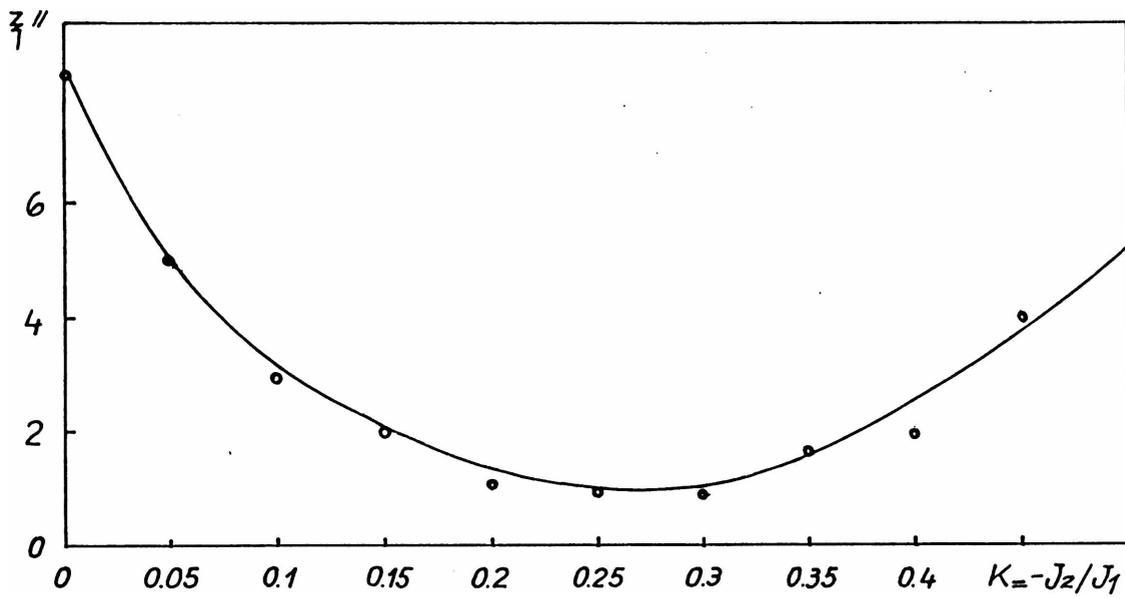


Figura N 5.13 Longitud de correlacion horizontal para $\Gamma/J_1 = 1.2$

5.8.3 TRANSICIONES DESORDENADA-FLOTANTE INCOMMENSURABLE- $\langle 2 \rangle$

La determinación de las líneas críticas entre las regiones 3,4 y 5 del mapa de fase mostrado en la fig. 5.11 es complicada porque implica distinguir numéricamente un decaimiento exponencial de uno de potencia en el comportamiento de la función de correlación. Además este comportamiento es válido en el límite termodinámico y en nuestro caso se ve enmascarado por una exponencial debido a la dimensión finita de la red. Esto nos llevó a considerar el comportamiento de la longitud de correlación que, como dijimos anteriormente debe diverger en la zona flotante incommensurable (Finel 1986) mientras que en la fase desordenada y en la $\langle 2 \rangle$ presenta un valor finito. Esta divergencia se manifiesta en cálculos con redes finitas cuando la longitud de correlación se aproxima al tamaño de la red. Esto se puede ver claramente en la fig. 5.14. El estudio fue realizado con la longitud de correlación vertical debido a que en esta dirección se evitan los problemas de termalización asociados con las interacciones competitivas en la dirección horizontal.

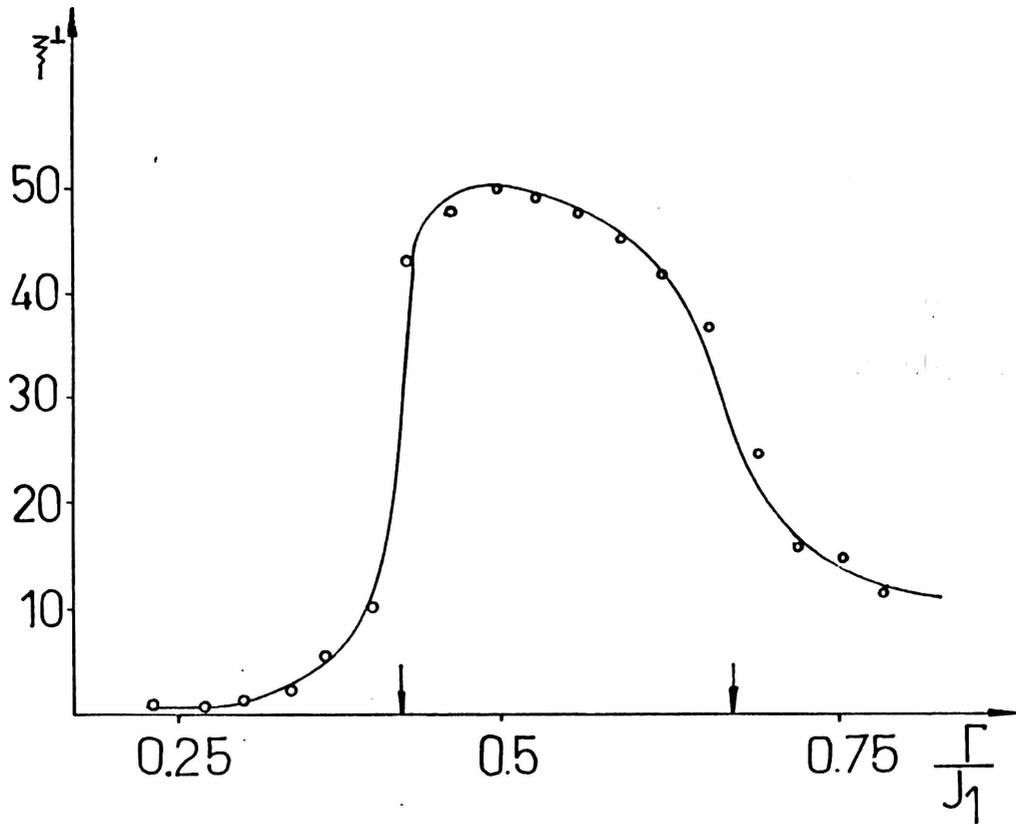


Fig N 5.14 Longitudes de Correlacion vertical en la transicion desordenada-flotante incommensurable - (2) para $K=0.8$. Las transiciones estan indicadas por las flechas y ocurren cuando $\xi_{\perp} \approx m.n \approx 30$ la dimension vertical.

Otra forma de detectar la transición flotante incommensurable - desordenada es hacer el estudio del comportamiento de la longitud de correlación vertical cuando se varía la dimensión de la red en la dirección de Trotter. En la fase desordenada permanece constante mientras que en la flotante incommensurable crece proporcionalmente al tamaño de la red. Un ejemplo de este comportamiento se puede ver en la figura 5.15

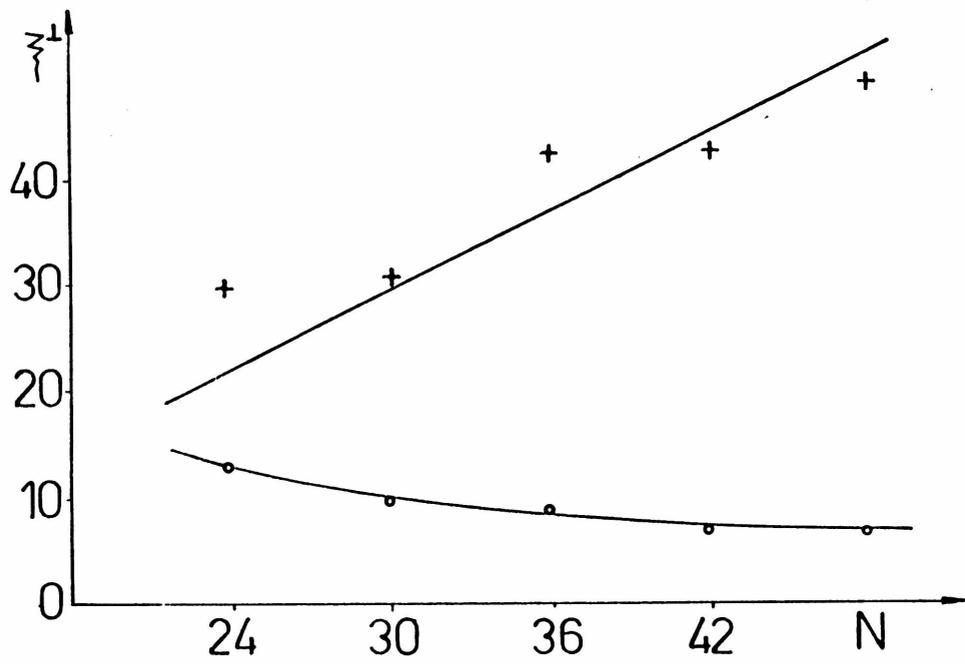


Fig. N 5.15 variacion de la longitud de correlacion vertical en funcion de la dimension de la red en la direccion de Trotter. * * * fase desordenada, + + + fase flotante incommensurable

5.9. CONCLUSIONES

En el momento en que nosotros iniciamos este trabajo ,todos los intentos de analizar el modelo ANNNI-2d con Monte Carlo habían fracasado ,ya que si bien predecían con bastante exactitud la línea de transición ferro-para. obtenían un punto de Lifshitz sobre la misma que no podía existir debido a la línea ODL. Esto condujo a que aparecieran trabajos (Morgenstern 1984) en los que se intenta (y a nuestro entender ,no se logra) demostrar que Monte Carlo no sirve para los modelos con interacciones competitivas.

Si nosotros hubiéramos hallado las transiciones de fase como en los trabajos de Monte Carlo que nos precedieron, es evidente que el mapa obtenido presentaría el " perverso " punto de Lifshitz en la frontera ferro-para. La novedad de nuestro enfoque de Monte Carlo es que usamos la función correlación l' y la longitud de correlación para distinguir entre las fases. Así logramos obtener el diagrama de fases de ANNNI en su límite hamiltoniano en (1+1) dimensiones por medio del método de Monte Carlo estadístico cuántico ,que consiste básicamente en obtener un modelo clásico equivalente en 2 dimensiones por medio de la transformación de Trotter y aplicar Monte Carlo a éste último.

De esta forma se logró:

1- Obtener en forma cualitativa el mapa de fases de un modelo con interacciones competitivas con un método sencillo y de mínimo esfuerzo computacional.

2- Demostrar que el método de Monte Carlo es válido para los modelos

con interacciones competitivas. En este sentido verificamos que uno de los argumentos principales exhibidos en el trabajo de Morgenstern es falso. En este trabajo se afirma que son necesarios $3 \cdot 10^5$ pasos de Monte Carlo para distinguir fases, lo que observamos es que si bien el sistema termaliza en mayor cantidad de pasos que otros sistemas sencillos, se está muy lejos de la cifra anterior. Esa cantidad de pasos estimamos que puede ser usada para distinguir entre distintos tipos de estructuras dentro de la misma fase.

3- Con respecto a la frontera flotante incommensurable - desordenada hay diferencia notable entre la obtenida por el método de matriz de transferencia o la aproximación de fermiones libres (Fig. 5.6) con la de la aproximación variacional de clusters o el Monte Carlo dinámico (Fig. 5.7). Nuestros resultados presentan muy buen acuerdo con la primera.

Los temas que pueden ser encarados con la función y longitud de correlación obtenidas por Monte Carlo son:

1- En la actualidad se cree, pero no está demostrado, que, en el límite termodinámico DOL y ODL son idénticas. Como con este método es posible detectar ambas de manera independiente, sería interesante verificar si es posible, con muchas horas de máquina, detectar cuanto se separan estas dos líneas en simulaciones de redes muy grandes.

2- La existencia de un punto de Lifshitz entre las fases $\langle 2 \rangle$ y desordenada es una cuestión abierta. Barber y Derrida en su trabajo de MC dinámico obtuvieron resultados que sugieren una extensión mas grande de la fase flotante que la obtenida previamente. Creemos que es posible, también con muchas horas de máquina, detectar si existe este punto con

este método.

3- Verificación de los fenómenos de reentrada ,plateaus y variación continua de número de ondas obtenidos por Grynberg y Ceva (Grynberg 1990) en el modelo ANNNI con interacción hasta terceros vecinos

4- Mapas de fase de otros modelos con interacciones competitivas como el BNNNI o el (2+4).

CAPITULO N 6

CONCLUSIONES GENERALES

El propósito de esta tesis fue el análisis y comprensión de ciertas transiciones de fase y fenómenos críticos. Para ello se estudiaron fenómenos físicos de gran interés en la actualidad que presentan transiciones particulares pero que cubren los tipos más característicos de las mismas. El estudio se hizo mediante modelos generales de tipo de Ising, y en el límite hamiltoniano (cuántico).

Se resolvieron los distintos modelos cuánticos de espines en la red encontrando los puntos críticos, exponentes críticos y diagramas de fase de cada uno de ellos. Para ello se utilizaron distintos métodos de resolución, que se eligieron de forma de cubrir el espectro de los métodos más promisorios y que, a la vez, fueran cualitativamente distintos entre sí.

Los modelos estudiados en esta tesis fueron :

El modelo de Potts ($q=3$): presenta un punto crítico y se pueden encontrar realizaciones experimentales del mismo en adsorción de átomos de He^4 en grafito a $1/3$ de cobertura y en adsorción de Kr en grafito; ambos compuestos de grafito intercalado. Los compuestos de grafito intercalado (GICs) han recibido en los últimos años un interés especial por parte de físicos, químicos y especialistas en materiales, fundamentalmente porque permiten

explorar propiedades físicas de estructuras sintéticas cada vez más complejas y además proveen una base de prueba para la física en cuasi-una y dos dimensiones (Zabel y Chow 1986).

El modelo de Blume-Capel (BC) es un modelo del tipo de Ising que presenta un punto tricrítico que separa las transiciones de primer y segundo orden. Experimentalmente se ha podido observar este comportamiento en casos tan importantes y variados como las mezclas superfluidas de He^3 y He^4 (Peliti 1984), los sólidos metamagnéticos (Landau 1971, Giordano 1975, Birgeneau 1974) y halogenuros de amonio (Garland 1971).

El modelo ANNNI (modelo de spin con interacciones competitivas entre primeros y segundos vecinos que permite modelar estructuras espacialmente moduladas que, debido a la mejora en técnicas de alta resolución han sido descubiertas en materiales completamente diferentes como aleaciones, imanes, ferroeléctricos, sistemas adsorbidos y politipos (Selke 1988). El diagrama de fases de este modelo presenta una importante variedad de propiedades además de las estructuras moduladas como transiciones entre fases conmensurables e incommensurables, puntos multicríticos, líneas de desorden y un punto tricrítico llamado de Lifshitz (este último sólo en 3 o más dimensiones).

Los distintos métodos de resolución empleados fueron una realización particular del grupo de renormalización en espacio real apropiada para el estudio de las fases ferro y antiferromagnéticas, el desarrollo en bajas temperaturas, un método variacional de bloques y el método de Monte Carlo

estadístico cuántico.

La realización de grupo de renormalización en espacio real elegida (Epele, 1981a) se caracteriza por considerar bloques de espin con un espin central de forma que intervenga en todas las interacciones de vecinos más próximos presentes en el bloque. Esto permite que el Hamiltoniano del bloque se pueda desacoplar fácilmente en las variables de los sitios periféricos, haciendo posible el estudio analítico de las propiedades ferromagnéticas y antiferromagnéticas del sistema.

La aplicación de este método al modelo de Potts ($q=3$) había provisto muy buenos resultados tanto para el punto crítico (Epele 1981b) como para el exponente crítico β (Tabla 3.2).

En el caso del modelo de Blume-Capel en (1+1) dimensiones (Arizmendi 1986) también permitió obtener valores muy cercanos a los conjeturados para el punto tricrítico y los correspondientes exponentes críticos (Tablas 4.1 y 4.2). En la Fig. 4.1 se muestra el diagrama de fase obtenido por medio del uso de la mencionada transformación de grupo de renormalización. Con este método fue posible también obtener el punto tricrítico y los exponentes críticos para el modelo de Blume-Capel en (2+1) dimensiones para números de coordinación $\xi = 3, 4$ (Tablas 4.3 y 4.4). Esta realización de grupo de renormalización define dos subredes interpenetradas, en conexión a las orientaciones de espin posibles, lo que permite el estudio de las propiedades antiferromagnéticas del modelo sin incluir acoplamientos de mayor orden. El punto tricrítico y los exponentes críticos correspondientes a esta fase se

muestran en la Tabla 4.5. El diagrama de la fase antiferromagnética se puede deducir del ferromagnético usando la simetría de las ecuaciones de grupo de renormalización. Es importante señalar que en este trabajo se obtuvieron por primera vez resultados correspondientes a la fase antiferromagnética del modelo de Blume-Capel.

En el método variacional empleado para el análisis del mismo modelo también se utiliza el concepto de bloques de espin como en la realización de RG utilizada. En este método, llamado método variacional iterativo por sus autores (Abad, 1984) se construye progresivamente el estado cuántico correspondiente a un bloque de tamaño 2^n mediante pasos sucesivos en los que se resuelven bloques de $2, 4, 8, \dots, 2^n$ sitios haciendo evolucionar los estados al pasar de un tamaño al otro y manteniendo fijo el Hamiltoniano efectivo. De esta forma se llega a una función de onda variacional para el estado fundamental del sistema definido en toda la red.

Este método fue empleado para hallar el punto crítico y el exponente crítico β del modelo cuántico de Potts en (1+1) dimensiones. Los resultados (ver Tabla 3.2) muestran una buena aproximación al valor del punto crítico pero menos precisa para el exponente crítico.

Su aplicación al modelo de Blume-Capel en (1+1) dimensiones permitió obtener la ubicación del punto tricrítico (Tabla 4.1) así como el diagrama de fases (Fig. 4.1). Se puede observar que la precisión de los resultados de este método variacional aunque menor, es del orden de la del RG.

Se puede decir, por lo tanto, que este método variacional es una técnica

apropiada, por su sencillez y porque permite obtener resultados razonables en lo que respecta a la ubicación de puntos críticos y tricríticos en el diagrama de fases.

Otro método que hemos empleado en esta tesis ha sido el desarrollo en serie de bajas temperaturas. Este método fue ampliamente utilizado en el estudio de fenómenos críticos y además es cualitativamente distinto a los otros métodos aplicados (Stanley 1971).

Los resultados obtenidos de la aplicación del desarrollo en serie de bajas temperaturas junto con la prueba del cociente (ver sección 2.2) a la magnetización correspondiente al modelo de Potts en $(d+1)$ dimensiones (Tabla 3.1) son satisfactorios, aun calculando sólo hasta cuarto orden. Estos desarrollos ciertamente pierden precisión a medida que uno se acerca al punto crítico.

El método de Monte Carlo también fue elegido para ser aplicado al estudio de modelos de spin debido a su gran difusión y la utilidad y precisión mostrada en el análisis de transiciones de fase. Sin embargo, como se trata en nuestro caso de modelos cuánticos, éstos deben aproximarse previamente por un sistema clásico equivalente. La técnica de aproximación elegida se conoce como método estadístico cuántico de Monte Carlo (Suzuki 1976) y consiste en utilizar la correspondencia entre un sistema cuántico de espines en d - dimensiones y uno clásico de $d+1$ - dimensiones a través de la fórmula de Trotter (ver sección 2.4).

El método de Monte Carlo fue aplicado al modelo ANNNI, lo que consti-

tuye el mayor desafío que se enfrentó en esta tesis. Todos los intentos anteriores de aplicación de este método al modelo bidimensional habían fracasado, ya que el diagrama de fases obtenido (Selke 1980) no concordaba con el aceptado. Se encontraba un punto de Lifshitz sobre la frontera ferro-para (ver Fig. 5.5) y esto está prohibido por la presencia de la línea unidimensional (ODL) (Peschel, 1981) (ver Fig. 5.4). Este hecho señala que el método de Monte Carlo en el que se calculan calor específico, susceptibilidad, etc. no resulta de utilidad. Por otro lado con el método de la matriz de transferencia se había hallado la longitud de correlación con muy buenos resultados (Beale, 1985; Grynberg, 1987), además en las simulaciones se observaba que los estados estacionarios alcanzados con Monte Carlo podían ser representativos del mapa de fase correcto.

Esto nos condujo al uso de la función de correlación y la longitud de correlación calculadas por Monte Carlo para obtener el mapa de fases del modelo.

De esta forma se determinaron (Arizmendi, 1991):

- Transición ferro-para a través del máximo de las longitudes de correlación vertical (dirección de Trotter) y horizontal (ver sección 5.6 y 5.9.1)
- La línea de desorden (DOL) por medio del cambio de comportamiento de la función correlación (ver sección 5.6, 5.9.2 y Fig. 5.12).
- La línea unidimensional a través del mínimo de la longitud de correlación horizontal (ver sección 5.6, 5.9.2 y Fig. 5.13).
- Transiciones entre las fases degenerada $\langle 2 \rangle$ - flotante incommensurable y

desordenada son detectadas por el comportamiento de la longitud de correlación vertical ya que, en la fase central, la flotante incommensurable, ésta diverge para el modelo infinito, lo que en el modelo finito significa que toma valores mayores que la dimensión de la red, mientras que en las otras dos fases no diverge (ver sección 5.6 ,5.9.3 y Fig.5.14). Además se hizo un finite size scaling para las fases flotante incommensurable y desordenada que corroboró estos resultados (ver sección 5.9.3 y Fig.5.15)

El mapa de fases obtenido (ver Fig.5.11) muestra que es posible distinguir claramente entre todas las fases existentes en el modelo.

El mapa de fase actualmente aceptado del modelo ANNNI presenta ambigüedad respecto de la transición floating-paramagnética, ya que por un lado está la ubicación de la misma obtenida por matriz de transferencia o aproximación de fermiones libres (Fig.5.6) y por otro la correspondiente a la aproximación variacional de clusters o el Monte Carlo dinámico (Fig.5.7). Los resultados obtenidos con nuestro método (Fig. 5.11) coincidirían con la primera opción.

La conclusión más importante que se puede sacar de este análisis es que el método de Monte Carlo es aplicable a modelos como ANNNI de interacciones competitivas , ya que se logró obtener una buena aproximación al mapa de fases con un método sencillo y de esfuerzo computacional relativamente pequeño. Esto permite encarar otros temas por medio del análisis de la función de correlación y la longitud de correlación obtenidas por Monte Carlo como por ejemplo verificar si las líneas ODL y ODL se pueden distinguir o la

existencia de punto de Lifshitz entre las fases $\langle 2 \rangle$ y desordenada o la obtención del mapa de fase de otros modelos con interacciones competitivas como el A3NNI (Grynberg 1990), el BNNNI (Selke 1988) o el (2+4) (Penson 1984, Selke 1991).

En resumen en esta tesis se resolvieron modelos cuánticos de espín en la red en una y dos dimensiones que presentan puntos críticos, tricríticos y multicríticos, estructura de fases modulada, líneas de desorden y unidimensionales y transiciones commensurable - incommensurable con métodos de grupo de renormalización, variacional de bloques, desarrollo en serie de bajas temperaturas y Monte Carlo. Se analizaron los resultados obtenidos con cada método comparándolos con los obtenidos por otros métodos aplicados tanto en esta tesis como en otros trabajos.

Además el método de Monte Carlo implementado constituye un "laboratorio de cálculo" que puede ser utilizado para simular otros fenómenos físicos de interés, además de aquellos de interacciones competitivas.

REFERENCIAS

- Abad J, Esteve J G, Fernández Pacheco A 1984 *Variational Method for: Field Theories in the Lattice* DFTUZ preprint
- Alcaraz F C, Drugowich de Felicitó J R, Koberle R, Stilck J F 1985 *Hamiltonian Studies of the BEG model* UFSC preprint
- Arizmendi C M, Epele L N, Fanchiotti H, García Canal C A 1986 *Z. Phys. B - Condensed Matter* **64** 231
- Arizmendi C M, Rizzo A H, Epele L N, García Canal C A 1991 *Z. Phys B - Condensed Matter* **83** 273
- Aubry S 1979 en *Soliton and Condensed Matter Physics* eds Bishop A R , Schneider T (Springer Berlin) p. 264.
- Barber M N, Duxbury P M 1982 *J. Stat. Phys.* **29** 427
- Barber M N, Derrida B 1988 *J. Stat. Phys.* **51** 877
- Beale P D, Duxbury P M, Yeomans J M 1985 *Phys. Rev. B* **31** 7166
- Berker A N, Wortis M 1976 *Phys. Rev. B* **14** 4946
- Berker A N, Oslund S, Putnam F A, 1978 *Phys. Rev. B* **17** 3650
- Birgeneau J R 1974 en *Magnetism and Magnetic Materials-1974, Proceedings of the 20th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials*, eds. Graham C D, Lander G H, Rhyne J J (AIP New York) p.258
- Blöte H W J, Nightingale M P, Derrida B 1981 *J. Phys. A* **14** L45
- Blume M 1966 *Phys. Rev. B* **141** 517
- von Boehm J , Bak P 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 122

- Bonner J C, Blöte H W J, Beck H, Müller G 1981 en *Physics in One Dimension*
eds Bernasconi J, Schneider T (Springer-Verlag, New York)
- Capel H W 1966 *Physica* **32** 966
- 1967 *Physica* **33** 295 , **37** 423
- Chang T S, Tuthill G F, Stanley H 1974 *Phys. Rev. B* **9** 4882
- Dasgupta C 1977 *Phys. Rev. B* **15** 3460
- Domany E, Schick M, Walker J S 1977 *Phys. Rev. Lett.* **38** 1148
- Domb C 1960 *Adv. Phys.* **9** 149
- Drell S, Weinstein M, Yankielowicz S 1976 *Phys. Rev. D* **14** 487
- 1977 *Phys. Rev. D* **16** 1769
- Elliott R J 1961 *Phys. Rev.* **124** 346
- Epele L N, Fanchiotti H, Garcia Canal C A 1981a *Phys. Rev. B* **24** 310
- 1981b *Phys. Rev. B* **24** 2021
- Fernandez Pacheco A 1979 *Phys. Rev. D* **19** 3173
- Feynman R P 1982 *Int. J. Theor. Phys* **21** 467
- Finel A, de Fontaine D 1986 *J. Stat. Phys.* **43** 645
- Fisher M E, Selke W 1980 *Phys. Rev. Lett.* **44** 1502
- Fradkin E, Susskind L 1978 *Phys. Rev. D* **17** 2637
- Garland C W, Weiner D B 1971 *Phys. Rev. B* **3** 1634
- Giordano N, Wolf P 1975 *Phys. Rev. Lett.* **35** 799
- Grynberg M D, Ceva H 1987 *Phys. Rev. B* **36** 7091
- 1990 *Phys. Rev. B* **41** 884
- Hamber H 1980 *Phys. Rev. B* **21** 3999

- Hirsch J E, Scalapino D J, Blankebender B 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 1628 ;
1982 *Phys. Rev. B* **26** 5033
- Hornreich R M, Luban M, Shtrikman S 1975 *Phys. Rev. Lett.* **35** 1678
- Hornreich R M, Liebmann R, Schuster R G, Selke W 1979 *Z. Phys. B -
Condensed Matter* **35** 91
- Hu B 1980 *Phys. Lett.* **75A** 372
- Kadanoff L P 1965 *Physics* **2** 263
- Kalos M H 1979 en *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* ed. Binder K
(Springer, Berlin)
- Kaufman M, Griffiths R B, Yeomans J M, Fisher M 1981 *Phys. Rev. B* **23** 3448
- Kogut J 1979 *Rev. Mod. Phys.* **51** 659
- Landau D P, Keen B, Schneider B, Wolf P 1971 *Phys. Rev. B* **31** 2130
- Metropolis N, Rosenbluth A W, Rosenbluth M N, Teller A H, Teller E 1953
J. Chem. Phys. **21** 1087
- Morgenstern I 1984 *Phys. Rev B* **29** 1458
- Mittag L, Stephen J 1974 *J. Phys A* **7** L109
- Miyashita S, Betts D D, Elliot C J 1979 *J. Phys. A* **12** 1605
- Müller-Hartmann E, Zittartz J 1971 *Z. Phys B - Condensed Matter and
Quanta* **27** 261
- Niemeijer Th, van Leeuwen J M J 1977 en *Phase Transitions and Critical
Phenomena v. 6* eds Domb C & Green M S (Academic Press)
- Nienhuis B, Nauenberg M 1975 *Phys. Rev. Lett.* **35** 477
- Nienhuis B 1982 *J. Phys. A* **15** 199
- Nienhuis B, Riedel K, Schick M 1980 *J. Phys. A* **13** L189

- den Nijs M P M 1979 *J. Phys. A* **12** 1857
- Nightingale M P, Blöte H W J 1980 *Physica A* **104** 352
- Peliti L, Leiblen S 1984 *Phys. Rev. B* **29** 1253
- Penson K A 1984 *Phys Rev B* **29** 2404
- Peschel J, Emery V J 1981 *Z. Phys. B - Condensed Matter* **43** 241
- Pfeuty P 1970 *Ann. Phys.* **57** 79
- Quinn H R, Weinstein M 1982 *Phys. Rev. D* **25** 1661
- Rebbi C, Swendsen R H 1980 *Phys. Rev. B* **21** 4094
- Riedel E K, Wegner F J 1972 *Phys. Rev. Lett* **29** 349
- Rijpkema J J M 1984 *Phys. Rev. A* **29** 859
- Rujan P 1981 *Phys. Rev. B* **24** 11
 1982 *J. Stat. Phys.* **29** 231
- Selke W, Fisher M E 1980 *Z. Phys. B - Condensed Matter* **40** 71
- Selke W 1981 *Z. Phys. B - Condensed Matter* **43** 335
- Selke W, Binder K, Kinzel W 1983 *Surf. Sci.* **125** 74
- Selke W 1988 *Phys. Reports* **170** 213
 1991 en *The Monte-Carlo Method in Condensed-Matter Physics, Applications* ed. Binder K (Springer, Berlin, Heidelberg)
- Stanley H E 1971 *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*
 (Clarendon Press, Oxford)
- Suzuki M 1976 *Prog. Theor. Phys.* **56** 1454
 1986 *J. Stat. Phys.* **46** 883
- Trotter H F 1959 *Proc. Am. Math. Soc.* **10** 545
- Villain J, Bak P 1981 *J. Physique* **42** 657

- Wang Y L, Lee F 1984 *Phys. Rev. B* 29 5156
 - Wegner F J, Riedel E K 1973 *Phys. Rev. B* 7 248
 - Wilson K 1971 *Phys. Rev. B* 4 3174
 - Wu F Y 1982 *Rev. Mod. Phys.* 54 235
 - Yang C N 1952 *Phys. Rev* 85 808
 - Yeomans J 1938 en *Solid State Physics* 41 eds. Ehrenreich H, Turnbull D
(Academic Press, Orlando)
 - Zabel H, Chow P C 1986 *Comments Cond. Mat. Phys.* 12 225
-



FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS
BIBLIOTECA DEL DEPARTAMENTO
DE FISICA

29 OCT 1995