



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

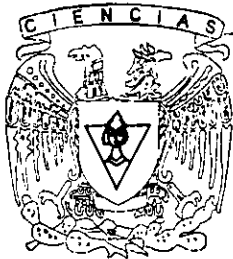
SIMULACIONES MONTE CARLO DE SISTEMAS
MAGNETICOS DE ESPINES
MODELOS DE ISING Y XY

298385

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
F I S I C O

PRESENTA:

CESAR GARCIA MAURICIO



FACULTAD DE CIENCIAS
UNAM

DIRECTOR DE TESIS:
DR. ALBERTO ROBLEDO NIETO

2001

DIVISION DE ESTUDIOS PROFESIONALES



FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

MAT. MARGARITA ELVIRA CHÁVEZ CANO
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: "Simulaciones Monte Carlo de sistemas magnéticos de espines: modelos de Ising y XY"

realizado por César García Mauricio

con número de cuenta 9024023-6 , pasante de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis

Propietario DR. ALBERTO ROBLEDO NIETO *Robledo Nieto*

Propietario DRA. JACQUELINE QUINTANA HINOJOSA *J. Quintana*

Propietario DR. JOSE ALEJANDRE *Alejandro*

Suplente DR. VICTOR MANUEL ROMERO ROCHIN *Rochin*

Suplente DR. AGUSTIN GONZALEZ FLORES *Agustin Gonzalez Flores*

Consejo Departamental de Física

Patricia Goldstein Menache
DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE
Coordinadora de Licenciatura

FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	1
CAPITULO 1.- ELEMENTOS DE LA TEORÍA DE TRANSICIONES DE FASE.	-1
1.1.- Introducción.	-1
1.2.- Los exponentes críticos.	-2
1.3.- Teoría fenomenológica de Landau.	-4
1.4.- Hipótesis de escalamiento para las funciones termodinámicas.	-6
1.5.-El concepto de universalidad.	-8
CAPITULO 2.- TEORÍA DE PERCOLACIÓN.	10
2.1.-Introducción.	-10
2.2.- Exponentes críticos y teoría de escalamiento.	-10
(a).- Teoría de escalamiento para los números de cúmulos.	-10
(b).- Relaciones entre los exponentes críticos.	-12
2.3.- Geometría fractal y escalamiento a tamaño finito.	-13
2.4.-Universalidad en el problema de percolación.	-16
CAPITULO 3.- MECÁNICA ESTADÍSTICA DEL MODELO DE ISING.	-18
3.1.- Introducción.	-18
3.2.- El modelo de Ising en la aproximación de Bragg - Williams.	-19
3.3.- El modelo de Ising en la aproximación de Bethe.	-22
3.4.- Solución exacta para la cadena de Ising.	-26
3.5.- El modelo de Ising en dos dimensiones.	-29
CAPITULO 4. - MECÁNICA ESTADÍSTICA DEL MODELO XY.	-32
4.1. - Introducción.	-32
4.2. - Transiciones de fase en sistemas bidimensionales.	-32
4.3. - Propiedades críticas del modelo XY.	-36
(a).- Ecuaciones de escalamiento.	-36
(b).- La función de correlación de dos puntos.	-38
CAPÍTULO 5. - DILUCIÓN MAGNÉTICA	
5.1. - Características cualitativas de la dilución magnética: recocido ("quenched") y templado ("annealed").	-40
5.2.- Desorden geométrico y percolación.	-41
5.3.- Efectos térmicos, percolativos y cruzamiento en magnetos diluidos templados.	-43

5.4.- Comportamiento crítico de sistemas magnéticos desordenados.	46
5.5.- Resultados exactos para los modelos templados.	48
(a) Generalidades.	48
(b) Modelo de Ising diluido.	48
5.6.- Resultados de Monte Carlo.	49
5.7.- Investigaciones con expansiones en series.	51

CAPITULO 6.- MÉTODO MONTE CARLO EN MECÁNICA ESTADÍSTICA.-52

6.1.- Descripción de la técnica Monte Carlo para sistemas de espines.	52
6.2.- Aspectos prácticos del Método.	54
6.3.- Interpretación dinámica del proceso Monte Carlo.	55
6.4.- Precisión y convergencia en la interpretación dinámica.	56
6.5.- Condiciones de frontera y sus implicaciones en el límite termodinámico.	58
(a).- Condiciones de frontera: libres y periódicas.	58
(b).- El método M. C. autoconsistente.	58
6.6.- Teoría de escalamiento para efectos de tamaño finito.	59
6.7.- Métodos modernos de actualización de espines.	60
(a).- Algoritmos de cúmulos (variables auxiliares).	61
1.- Algoritmo de Swendsen-Wang.	61
2.- Algoritmo de un solo cúmulo de Wolff.	61
3.- Reducción de variancia.	62
4.- Método de Woff para modelos $O(n)$	62
(b).- Algoritmo MultiGrid de Monte Carlo (MGMC).	63
(c).- Algoritmo sobre-relajado.	64
(d).- Algoritmos basados en grupo de renormalización.	65
6.8.- Análisis de resultados mediante la técnica de peso estadístico de histogramas.	65

CAPÍTULO 7.- SIMULACIÓN MONTE CARLO DE LOS MODELOS DE ISING Y XY CON DILUCIÓN MAGNÉTICA DE SITIO. 67

7.1. - Implementación de los algoritmos usados.	67
7.2. - Modelo de Ising con dilución de sitio (interacciones antiferromagnéticas).	67
(a) Resultados para dinámica tradicional.	67
1.- Código en FORTRAN para el algoritmo con dinámica tradicional.	67
2.- Relajación al equilibrio.	70
3.- Cantidades termodinámicas.	74
> Parámetro de orden.	75
> Energía.	78
> Susceptibilidad alternada.	81
> Calor específico.	84
> Cumulante.	87
> Razones de Cumulantes.	90
4.- Escalamiento a tamaño finito.	93
> Parámetro de orden.	93

III

➤ Susceptibilidad alternada.	94
5.- Diagrama de fase T vs. c	96
(b) Resultados para dinámica de cúmulos.	96
1.- Código en FORTRAN para el algoritmo con dinámica de cúmulos.	96
2.- Estimación de los errores estadísticos introducidos por las variables de desorden configuracional.	101
3.- Cantidades termodinámicas.	101
➤ Parámetro de orden.	103
➤ Energía.	106
➤ Susceptibilidad alternada.	109
➤ Calor específico.	112
➤ Cumulante.	115
➤ Razones de cumulantes.	118
4.- Escalamiento a tamaño finito.	121
➤ Parámetro de orden.	121
➤ Susceptibilidad alternada.	122
5.- Diagrama de fase T vs. p	123
7.3. - Modelo XY (interacciones ferromagnéticas).	124
(a) Resultados para dinámica tradicional.	124
1.- Código en FORTRAN para el algoritmo con dinámica tradicional.	124
2.- Relajación al equilibrio.	126
3.- Cantidades termodinámicas.	130
➤ Magnetización (rms).	130
➤ Energía.	132
➤ Susceptibilidad magnética.	133
➤ Calor específico.	134
7.4.- Ajuste de datos a la forma KT	136
Conclusiones.	139
BIBLIOGRAFÍA.	140

Deseo expresar mi agradecimiento al Dr. Alberto Robledo por sus enseñanzas (explícitas e implícitas, a veces involuntarias): a lo largo del tiempo en que he tenido la ocasión de colaborar con usted, he aprendido asuntos del negocio que no fácilmente se aprenden, pues no fácilmente se enseñan.

También quiero expresar mi agradecimiento a los doctores Jaqueline Quintana, Víctor Romero, Agustín González y José Alejandro por la revisión del manuscrito, así como por sus comentarios.

A mis padres

Sin cuyo apoyo constante, la realización
de este trabajo se habría dificultado.

A mis amigos

Por compartir conmigo la experiencia de vivir,
y hacerla bastante interesante.

Recuerdas?

*En la inmensidad del espacio
y en la eternidad del tiempo
mi alegría hoy es compartir contigo
un espacio
y un tiempo*

INTRODUCCIÓN.

El objetivo principal de esta tesis es desarrollar las bases para la realización de simulaciones numéricas mediante el método de Monte Carlo aplicado a Mecánica Estadística y Materia Condensada, objetivo que se ha cubierto a través de la simulación de sistemas magnéticos de espines en malla. Si bien los sistemas simulados han sido extensivamente estudiados mediante distintas técnicas, incluida la simulación Monte Carlo (MC), la realización de simulaciones numéricas en sistemas modelo interesantes e innovadores presupone el conocimiento de la técnica y, puesto que tal conocimiento sólo se adquiere mediante su aplicación en situaciones reales, este trabajo cumple ese prerrequisito. La realización de una simulación MC presenta con frecuencia una serie de posibles errores que sólo se pueden percibir en el trabajo "de campo", tales como la elección de la precisión en las variables, la correlación entre configuraciones sucesivas, y aún la detección de "errores" que no existen.

Los sistemas elegidos forman parte de una serie de simulaciones cuya finalidad es verificar la plausibilidad de un modelo magnético para la superconductividad de alta temperatura de transición, modelo en el cual los conceptos asociados a la teoría de percolación, modelo XY y modelo de Ising tienen un rol preponderante. Esta razón ha trazado en gran medida el contenido de esta tesis, la cual sirvió también como una introducción a estos modelos.

En el capítulo 1 se da una breve exposición de la teoría clásica de Landau asociada a las transiciones de fase y fenómenos críticos, con énfasis en los conceptos de universalidad y exponentes críticos. Los capítulos 2 al 5 constituyen una introducción teórica general a los modelos simulados, en tanto que el capítulo 6 presenta los fundamentos del método Monte Carlo, su justificación y algunos de los resultados relacionados con los modelos en estudio. También se incluyen en el capítulo distintas técnicas relativamente modernas en simulación MC que pueden resultar útiles en un trabajo posterior. Finalmente, en el capítulo 7 se presentan los resultados de una serie de simulaciones MC del modelo de Ising diluido y del modelo XY, con la aplicación de algunas de las técnicas mencionadas en el capítulo 6, tales como el método de actualización de cúmulos y el análisis de datos mediante la técnica de pesos estadísticos con histograma.

El capítulo 2 presenta la teoría de percolación como un ejemplo del sistema más sencillo en el que se presenta una transición de fase no trivial: una transición asociada a la conectividad de una malla, razón por la cual se refiere a ésta como una transición geométrica. En el capítulo 3 se estudia al modelo de Ising en 1 y 2 dimensiones, modelos para los cuales existe una solución analítica y que ilustran las complejidades de un cálculo exacto aún para sistemas modelo relativamente simples, en los que las variables asociadas sólo tienen dos valores posibles. Es esta una de las principales razones que hacen necesarias técnicas aproximadas en el estudio de sistemas modelo que pretendan explicar el comportamiento de los materiales reales: sólo existen soluciones exactas para un número reducido de modelos. El capítulo 4 presenta un ejemplo de un sistema para el cual no existe tal solución: el modelo XY. En este capítulo se presenta la teoría de la transición KT que exhibe este modelo, en el cual la transición está asociada al apareamiento de vórtices de espines por debajo de una temperatura

T_{KT} , por encima de la cual existen aislados. La exposición sigue a la original de Kosterlitz y Thouless. El capítulo 5 es una introducción a sistemas magnéticos diluidos, así como un compendio de distintos resultados relacionados con los sistemas modelados.

La información principal obtenida en las simulaciones consistió en el cálculo de propiedades termodinámicas: parámetro de orden, susceptibilidad magnética, energía y calor específico. Para el caso del modelo de Ising diluido, el cálculo del cumulante de 4º orden fue de particular importancia en la determinación del diagrama T_c vs. p . Los máximos que presentan la susceptibilidad y el calor específico permiten una estimación de T_c para la concentración p en cuestión, estimación que ha sido corroborada con el cálculo del cumulante, el cual permite una determinación más precisa de la temperatura crítica, estando ésta determinada por el cruce de las curvas de razón de cumulantes contra temperatura. El diagrama T_c vs. p constituye uno de los logros principales en este trabajo, y fue calculado tanto para dinámica (estocástica) de Metropolis como para dinámica de cúmulos, resultando consistentes ambos cálculos, y coincidiendo con la teoría de magnetismo diluido presentada en el capítulo 5. El cálculo del diagrama con dinámica de cúmulos, además de demostrar la consistencia entre los dos métodos, también prepara el terreno para su implementación en modelos más complicados tales como el XY, donde no existen resultados exactos y donde la ineficacia estadística debida al "critical slowing down" hace necesario introducir algoritmos de actualización no locales.

CAPITULO 1.- ELEMENTOS DE LA TEORÍA DE TRANSICIONES DE FASE.

1.1.- Introducción.

Cuando se aplica el formalismo de la mecánica estadística a un sistema macroscópico, ocurre en ocasiones que se encuentran discontinuidades analíticas o singularidades en algunas funciones termodinámicas¹ que corresponden a varios tipos de transiciones de fase. Ejemplos de transiciones de fase son la condensación de los gases, la fusión de sólidos, la transición orden - desorden en aleaciones, la transición superfluida del He I líquido al He II líquido, etc. La característica distintiva de las interacciones entre las partículas en estos fenómenos es tal que, bajo circunstancias favorables, una gran cantidad de constituyentes microscópicos del sistema exhibe una tendencia a interactuar entre sí en una forma cooperativa. Este comportamiento cooperativo adquiere un significado macroscópico a una temperatura particular T_c , conocida como *temperatura crítica* del sistema. [1.1]

Las transiciones de fase que requieren un suministro de energía (calor latente) para realizarse, con una discontinuidad de salto en las primeras derivadas de la energía libre de Gibbs con respecto a la temperatura y al desplazamiento se denominan transiciones de primer orden.

Por otro lado, existen transiciones en las que se observa una discontinuidad en las segundas derivadas de la energía libre, cuyo paradigma es el calor específico, y donde las primeras derivadas son continuas en todo el espacio de parámetros. Tales transiciones se denominan continuas ó de segundo orden, en estas, no se requiere proveer energía para llevar a efecto la transición.

La presencia de transiciones de fase al reducir la temperatura de un sistema se explica al considerar la competencia entre el orden y el desorden, (es decir, entre energía y entropía). Para ejemplificar esta competencia, consideremos un dominio en una pieza de hierro, en el cual los espines tenderán a alinearse entre ellos debido a las fuerzas de intercambio entre momentos magnéticos; por otro lado, si la muestra está en equilibrio con sus alrededores a una temperatura T , estará intercambiando energía continua y aleatoriamente, cuya cantidad es proporcional a kT , lo cual tenderá a desalinear a los espines. En términos más precisos, el sistema tenderá a minimizar a la energía libre:

$$F = E - TS.$$

A temperaturas suficientemente altas el segundo término es el dominante, de modo que el sistema elegirá un estado de modo que su entropía sea un máximo. Tal estado corresponde a una situación en la que los espines están desordenados, Fig. 1.1. Si, por otro lado, la temperatura se reduce la importancia del 2º término irá decreciendo hasta que, a temperaturas bajas, el sistema elegirá un estado en el que su energía sea un mínimo; para el ejemplo del magneto, tal estado corresponde a los espines orientados paralelos unos con respecto a otros. Existe una temperatura bien definida (denominada temperatura de Curie) que distingue a las regiones de baja y alta temperatura, correspondiente a la temperatura a la que se lleva a efecto esta transición entre fases, y que define al *punto crítico* del sistema. Fig. 1.2.

¹ La presencia de tales singularidades sólo se observa en el límite termodinámico: $V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$, $n = N/V = \text{finito}$.

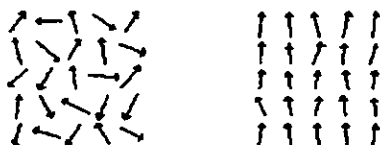


Fig. 1.1. Se muestran las fases de desorden y orden magnético en un dominio, correspondientes a temperaturas altas y bajas, respectivamente.

El punto crítico del sistema corresponde a aquel punto del diagrama de fases en el que finaliza la curva de coexistencia, y en el que cesa de existir una diferenciación entre fases, de modo tal que a temperaturas mayores a la crítica existe una única fase que "se separa" en dos al disminuir la temperatura.

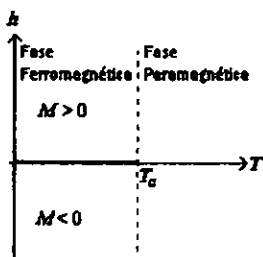


Fig. 1.2. Por debajo de T_c , y a lo largo de la línea de campo cero (curva de coexistencia), coexisten dos fases magnéticas que se distinguen por la dirección del momento magnético. Conforme se varía al campo magnético h a temperatura constante y menor que T_c , se lleva a efecto la transición entre fases ferromagnéticas. Más allá del punto crítico ($h_c = 0$, $T = T_c$), cesa de existir una diferencia entre las fases y se tiene una sola fase paramagnética.

1.2.- Los exponentes críticos.

A un nivel configuracional, la aproximación al punto crítico está caracterizada por un crecimiento en la extensión espacial de regiones que tienen el carácter de una de las fases ordenadas. Una medida cuantitativa de la extensión de esta estructura espacial la proporciona la *longitud de correlación* ξ , que es la distancia sobre la cual se extienden las correlaciones entre variables microscópicas (espines, cúmulos, etc.).

La descripción del fenómeno crítico se realiza en términos de una serie de parámetros, denominados *exponentes críticos*, que caracterizan al comportamiento de algunas cantidades termodinámicas del sistema en la vecindad del punto crítico (la denominada región crítica), dichas propiedades son aquellas asociadas a segundas derivadas de la energía libre y el parámetro de orden, así como algunas propiedades estructurales (la función de correlación entre pares, principalmente). La definición de los exponentes críticos surge al realizar una expansión en serie alrededor del punto crítico para dichas propiedades, con parámetro de expansión la desviación con respecto a la temperatura crítica: [1.2]

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad |t| \ll 1$$

El exponente δ describe la variación de la magnetización con el campo magnético a lo largo de la isoterma crítica:

$$M \approx h^{1/\delta} \quad (h \ll 1, \quad t = 0).$$

El exponente β describe cómo se aproxima el parámetro de orden a su valor en el punto crítico cuando no hay un campo magnético externo:

$$M_0 \approx |t|^\beta.$$

El comportamiento del calor específico está descrito, en la región crítica, por los exponentes α y α' , cuya definición es:

$$C_h(h=0) \approx \begin{cases} (-t)^{-\alpha'}, & T < T_c, \\ (+t)^{-\alpha}, & T > T_c. \end{cases}$$

En cuanto a la susceptibilidad magnética en la vecindad del punto crítico, tenemos:

$$\chi \approx \begin{cases} (-t)^{-\gamma} & T < T_c, \quad h = 0, \\ (+t)^{-\gamma} & T > T_c, \quad h = 0. \end{cases}$$

La motivación para la introducción de estos exponentes críticos es la de explicar los resultados encontrados experimentalmente, según los cuales se observa una divergencia tanto del calor específico como de la susceptibilidad, así como la anulación del parámetro de orden conforme el sistema se aproxima al punto crítico.

La longitud de correlación es la distancia que caracteriza al decaimiento de la función de correlación entre pares $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$:

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \langle \{m(\mathbf{r}) - m(\mathbf{r}')\}^2 \rangle = \langle m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}') \rangle - \langle m(\mathbf{r}) \rangle \langle m(\mathbf{r}') \rangle,$$

$$g(\mathbf{r}) \equiv g(\mathbf{r}, 0),$$

donde $m(\mathbf{r})$ es la densidad volumétrica del parámetro de orden:

$$M = \int m(\mathbf{r}) d^3r.$$

La función de correlación tiene un comportamiento exponencial cuando la distancia entre espines es grande comparada con la distancia a primeros vecinos:

$$g(\mathbf{r}) \approx \frac{e^{-r/\xi(t)}}{r^\eta}, \quad (r \gg a, \quad t \neq 0),$$

donde a es el espaciamiento en la malla y $\xi(t)$ es la longitud de correlación (la distancia sobre la cual prevalece el orden de corto alcance; si ésta es finita, significa que a distancias mayores a ξ de un espín dado otro espín no siente la influencia del primero).

En $T = T_c$, se observa una dependencia de ley de potencia para $g(\mathbf{r})$, lo cual define al exponente η .

$$g(r) \approx r^{-(d-2-\nu)}, \quad (r \gg a, t=0),$$

donde d es la dimensión de la malla. Este comportamiento es el que se espera de la función de correlación cuando $t \neq 0$ en el límite $\xi \rightarrow \infty$, de ahí que la longitud de correlación diverge en el punto crítico. Para describir esta divergencia se introduce el exponente ν :

$$\xi \approx |t|^{-\nu}.$$

En un sistema ferromagnético tenemos que, justo por encima de T_c , todos los espines que se hallan a distancias menores que ξ estarán en cierto grado alineados unos con otros, pese a lo cual ocurrirán fluctuaciones espontáneas entre regiones cuya distancia es mayor que ξ y en las cuales la magnetización apunta en direcciones independientes, dando como promedio sobre toda la muestra la anulación del parámetro de orden.

1.3.- Teoría fenomenológica de Landau.

En 1937 Landau desarrolló una teoría general para describir a las transiciones de fase de segundo orden. Probablemente, la contribución más importante de ese desarrollo fue la introducción del concepto de parámetro de orden M_0 , que permite diferenciar cuantitativamente a las fases de baja y alta temperatura, anulándose cuando el sistema está en la fase de temperatura alta. El parámetro de orden también permite distinguir entre las fases que coexisten por debajo de la temperatura crítica, siendo el comportamiento del sistema a lo largo de la curva de coexistencia, cualitativamente, el mostrado en la Fig. 1.3. Landau sugirió que las características básicas del comportamiento crítico de un sistema dado pueden determinarse mediante el desarrollo de la energía libre en serie de potencias de M_0 cuando t es pequeño. También argumentó que la simetría arriba-abajo² cuando el campo ordenante es cero implicaría que sólo los términos con potencias pares aparecerían en la serie. Así, la energía libre a campo cero $F_0 (= A_0 / NKT)$ puede escribirse como:

$$F_0(t, M_0) = q(t) + r(t)M_0^2 + s(t)M_0^4 + \dots, \quad \left(t = \frac{T-T_c}{T_c}, \quad |t| \ll 1 \right)$$

al tiempo que los coeficientes $q(t)$, $r(t)$, $s(t)$, ..., pueden escribirse como

$$q(t) = \sum_{k \geq 0} q_k t^k, \quad r(t) = \sum_{k \geq 0} r_k t^k, \quad s(t) = \sum_{k \geq 0} s_k t^k, \quad \dots$$

El valor en equilibrio de M_0 está determinado por la condición de que F_0 alcanza un mínimo. Si se retienen sólo los términos mostrados en la expresión anterior para F_0 , se obtiene:

$$r(t)M_0 + 2s(t)M_0^3 = 0,$$

de donde el valor en equilibrio de M_0 es 0 ó $\pm \sqrt{-r(t)/2s(t)}$. Esta última posibilidad es la que conduce a la presencia de una magnetización espontánea en el sistema.

² Esta simetría consiste en que, al intercambiar las direcciones de todos los espines en un estado, se obtiene otro en el que el valor de la energía es el mismo que el del estado original, de donde se sigue que F_0 debe ser una función de la magnitud de M_0 , condición que se satisface si requerimos que F_0 sea una función par de M_0 .

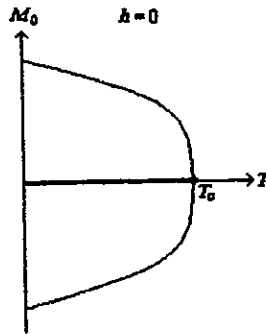


Fig. 1.3.-El parámetro de orden se anula cuando $T \rightarrow T_c$ a lo largo de la curva de coexistencia, para el modelo de Ising, la curva de coexistencia corresponde a $h_c = 0$. Los valores (positivos o negativos) del parámetro de orden distinguen a las fases ferromagnéticas que coexisten a temperaturas bajas.

La dependencia de $r(t)$ con la temperatura se elige de modo tal que para temperaturas por encima y a la temperatura crítica la energía libre alcance su mínimo para $M_0 = 0$, mientras que por debajo de la temperatura crítica alcance un mínimo para $M_0 \neq 0$. La condición de estabilidad

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial M^2} \right)_T > 0$$

implica que $s(t) > 0$, esto asegura que conforme incrementamos M_0 hacia valores muy grandes, la energía libre continuará aumentando. El punto crítico ocurre cuando $r(t) = 0$. Si elegimos $r(t) > 0$ para $T > T_c$ y $r(t) < 0$ para $T < T_c$, entonces la energía libre tendrá su valor mínimo en $M_0 = 0$ cuando $T > T_c$ y cuando $T < T_c$ lo tendrá en un valor $M_0 \neq 0$. Debido a que F_0 es continua a través del punto de la transición, se tiene que $r(0) = 0$, y una expresión sencilla para $r(t)$ que satisface todos estos requisitos es

$$r(t) = r_1(t)s_0,$$

donde $r_1(t)$ es una función que varía lentamente con t , resultando entonces que el mínimo de F_0 cuando $T < T_c$ se alcanza en

$$M_0 = \pm \sqrt{-\frac{r_1 t}{s_0}},$$

donde se han hecho las aproximaciones $r_1(t) = r_1$ y $s(t) = s_0$.

1.4.- Hipótesis de escalamiento para las funciones termodinámicas.

Según la teoría de Landau, la forma asintótica de la ecuación de estado para un magneto simple es:

$$h(t, M) = \left(\frac{\partial F}{\partial M} \right)_T \approx 2r_1 t M + 4s_0 M^3,$$

donde h es el campo magnético en el material. Si consideramos que los valores de la magnetización espontánea son

$$|M| \approx \left\{ \frac{r_1}{2s_0} |t| \right\}^{1/2},$$

la expresión para la ecuación de estado es:

$$h(t, M) \approx \frac{r_1^{3/2}}{s_0^{1/2}} |t|^{3/2} \left\{ 2 \operatorname{sgn}(t) \left(\frac{s_0^{1/2}}{r_1^{1/2}} \frac{M}{|t|^{1/2}} \right) + 4 \left(\frac{s_0^{1/2}}{r_1^{1/2}} \frac{M}{|t|^{1/2}} \right)^3 \right\},$$

de donde se sigue que:

$$M(t, h) \approx \frac{r_1^{1/2}}{s_0^{1/2}} |t|^{1/2} f \left(\frac{s_0^{1/2}}{r_1^{3/2}} \frac{h}{|t|^{3/2}} \right) \quad (1.1)$$

y, dentro del contexto de la teoría de Landau, la función f que aparece aquí es común a todos los sistemas a los cuales se pueda aplicar la teoría. La parte singular de la energía libre puede escribirse como:

$$\begin{aligned} F_{\text{sing}}(t, M; h) &\approx -hM + r_1 t M^2 + s_0 M^4 \\ &= \frac{r_1^2}{s_0} t^2 \left\{ - \left(\frac{s_0^{1/2}}{r_1^{3/2}} \frac{h}{|t|^{3/2}} \right) \left(\frac{s_0^{1/2}}{r_1^{1/2}} \frac{M}{|t|^{1/2}} \right) + \operatorname{sgn}(t) \left(\frac{s_0^{1/2}}{r_1^{1/2}} \frac{M}{|t|^{1/2}} \right)^2 + \left(\frac{s_0^{1/2}}{r_1^{1/2}} \frac{M}{|t|^{1/2}} \right)^4 \right\}. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Si se sustituye (1.1) en (1.2) se obtiene:

$$F_{\text{sing}}(t, h) \approx \frac{r_1^2}{s_0} t^2 f \left(\frac{s_0^{1/2}}{r_1^{3/2}} \frac{h}{|t|^{3/2}} \right)$$

La característica más notable de la ecuación de estado, como se expresa en (1.1), es que, en vez de ser la relación usual entre tres variables M , h y t , es ahora una relación entre sólo dos variables, $M/|t|^{1/2}$ y $h/|t|^{3/2}$. Así, mediante el escalamiento de M con $|t|^{1/2}$ y de h con $|t|^{3/2}$, hemos reducido el número total de variables en uno. De manera similar, la ecuación (1.2) expresa a la parte singular de la energía libre, escalada con t^2 , como una función de la variable h escalada por $|t|^{3/2}$. Esta reducción del número total de variables efectivas es uno de los primeros logros de la *teoría de escalamiento*.

Una generalización de la ec. (1.2) permite escribir:

$$F_{\text{mag}}(t, h) \approx F_0 t^{2-\alpha} f\left(\frac{Gh}{|t|^\Delta}\right) \quad (1.3)$$

donde α y Δ son números universales comunes a todos los sistemas en la clase de universalidad dada, $f(x)$ es una función universal de la cual se espera tenga dos ramas, f_+ para $t > 0$ y f_- para $t < 0$, en tanto que F_0 y G (como r_1 y s_0) son parámetros no universales característicos del sistema particular en consideración. Esperamos que α y Δ determinen a todos los exponentes críticos del problema, en tanto que las amplitudes que aparecen en las distintas leyes de potencias estarán determinadas por F_0 , G y los valores límite de la función $f(x)$ y de sus derivadas, conforme x tiende a cero. La ec. (1.3) constituye la denominada *hipótesis de escalamiento*.

A partir de la ec. (1.3) se tiene que:

$$M(t, h) = -\left(\frac{\partial F_{\text{mag}}}{\partial h}\right)_t \approx F_0 G |t|^{2-\alpha-\Delta} f'\left(\frac{Gh}{|t|^\Delta}\right) \quad (1.4)$$

y

$$\chi(t, h) = -\left(\frac{\partial^2 F_{\text{mag}}}{\partial h^2}\right)_t \approx -F_0 G^2 |t|^{2-\alpha-2\Delta} f''\left(\frac{Gh}{|t|^\Delta}\right) \quad (1.5)$$

Si $h \rightarrow 0$, obtenemos la magnetización espontánea:

$$M(t, h=0) \approx B |t|^\beta$$

donde

$$B = -F_0 G f'_-(0), \quad \beta = 2 - \alpha - \Delta \quad (1.6)$$

y la susceptibilidad a campo pequeño dada por

$$\chi(t, 0) \approx |t|^{-\gamma} \begin{cases} C_+ & \text{para } t > 0, \\ C_- & \text{para } t < 0 \end{cases}$$

donde

$$C_\pm = -F_0 G^2 f''_\pm(0), \quad \gamma = \alpha + 2\Delta - 2. \quad (1.7)$$

Combinando (1.6) y (1.7), se obtiene

$$\Delta = \beta + \gamma = 2 - \alpha - \beta$$

de modo que

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2.$$

Para recuperar al exponente δ escribimos a la función $f(x)$ de la ecuación (1.4) como $x^{\beta\Delta} g(x)$, de modo que

$$M(t, h) \approx -F_0 G^{1+\beta/\Delta} h^{\beta/\Delta} g\left(\frac{Gh}{|t|^\Delta}\right) \quad (1.8)$$

Invirtiendo (1.8), podemos escribir

$$|t| \approx -G^{1/\Delta} h^{1/\Delta} \Gamma\left(\frac{F_0 G^{1+\beta/\Delta} h^{\beta/\Delta}}{M}\right) \quad (1.9)$$

Se sigue que, a lo largo de la isoterma crítica ($t = 0$), el argumento de la función que aparece en (1.9) tendrá un valor universal (que hace que la función se anule), con el resultado:

$$M_0 \approx F_0 G^{1+\beta/\Delta} h^{\beta/\Delta}, \quad (t = 0)$$

de donde

$$\delta = \frac{\Delta}{\beta}. \quad (1.10)$$

Combinando (1.10) con las relaciones anteriores, se tiene

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2,$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1)$$

y de estas dos se sigue que

$$\gamma = \frac{(2 - \alpha)(\delta - 1)}{\delta + 1}.$$

El calor específico a $h = 0$ está dado por:

$$C_A^{sing}(t, 0) = -\frac{\partial^2 F_{sing}}{\partial t^2} \approx -(2 - \alpha)(1 - \alpha)F_0 |t|^{-\alpha} \begin{cases} f_+(0), & \text{para } t > 0, \\ f_-(0), & \text{para } t < 0. \end{cases}$$

Vemos entonces que la hipótesis de escalamiento conduce a varias relaciones entre los exponentes críticos del sistema, relaciones en las que sólo dos de ellos son realmente independientes.

1.5.-El concepto de universalidad.

Resta por discutir el porqué existen clases de universalidad. En otras palabras, ¿cuál es la razón por la que una gran variedad de sistemas que difieren ampliamente en su naturaleza pertenecen a una sola clase de universalidad y tienen, por tanto, exponentes y funciones críticas comunes?. La respuesta está en que las correlaciones entre los componentes microscópicos del sistema crecen lo suficiente, conforme $T \rightarrow T_c$, que prevalecen sobre distancias *macroscópicas* en el sistema y hacen por ello irrelevantes a los detalles del sistema a un nivel local.

La idea original para explicar el comportamiento "universal" de ciertos sistemas fue desarrollada por Kadanoff al inicio de la década de los 70 [1.4]. La idea de Kadanoff consiste en que, en la vecindad del punto crítico, en donde la longitud de correlación es mucho mayor que cualquier otra escala impuesta en el sistema, los detalles de lo que ocurre en estas escalas de longitud menor son irrelevantes. Los sistemas físicos cuyos exponentes críticos son iguales definen a una *clase de universalidad*. La clase de

universalidad a la que pertenece un sistema físico dado depende de un conjunto reducido de parámetros, entre los cuales destacan la naturaleza del parámetro de orden y la dimensión espacial del sistema. Ejemplos de clases de universalidad son las definidas por la clase del modelo de Ising en dos dimensiones, en la cual el parámetro de orden está descrito por un escalar M . Elementos de esta clase son todos los sistemas en los que las interacciones de los espines no sólo son con los primeros vecinos, sino con un número finito de vecinos, y en los que el parámetro de orden está descrito por un escalar, si la interacción entre espines decae con una potencia que sea suficientemente alta; para una potencia pequeña, tal que las interacciones decaen más bien lentamente, el comportamiento se altera y el sistema no permanece en la clase de universalidad, de forma tal que tenemos aquí otra variable que determina a distintas clases de universalidad y que podemos cuantificar con un exponente x que mide precisamente el decaimiento de las interacciones según la ley de potencias $J \sim r^{-x}$.

De esta forma, la clase particular del modelo de Ising bidimensional la podemos caracterizar por la dimensión D del parámetro de orden, la dimensión espacial d de los sistemas pertenecientes a la clase, y el decaimiento de las interacciones entre los espines: $D = 1$, $d = 2$. De manera análoga, el modelo de Heisenberg tridimensional define a otra clase de universalidad tal que $D = 3$, $d = 3$, en tanto que la clase de universalidad del modelo XY queda definida en términos de los valores $D = d = 2$.

El comportamiento universal se revela en que los valores de los exponentes críticos son notablemente insensibles a los detalles específicos del sistema. Así, los experimentos han establecido que una gran variedad de fluidos y magnetos, así como algunas aleaciones metálicas y otros sistemas, presentan un comportamiento que puede ser descrito por un par de valores de exponentes, $\beta = 0.33$, $\nu = 0.63$ ¹. En un desarrollo posterior se tendrá ocasión de profundizar más acerca del importante concepto de universalidad, en especial en el contexto de la teoría de percolación y la de sistemas magnéticos diluidos.

¹ Los demás exponentes críticos se obtienen de las relaciones entre los exponentes descritas en la sección 1.4. Estos valores son relevantes para la clase de universalidad del modelo de Ising en $d = 3$.

CAPITULO 2. - TEORIA DE PERCOLACION.

2.1. - Introducción.

De entre los distintos problemas estadísticos que se revisarán en esta tesis, el problema de percolación presenta una característica que lo hace, en cierto sentido, el más sencillo: es un problema puramente geométrico. El estudio de este sistema en lo que respecta a la transición de fase que presenta, así como sus propiedades de escalamiento, puede ser usado como una introducción a transiciones de fase y fenómenos críticos más complicados.

El problema de percolación está definido en términos de una malla en d dimensiones, que puede presentar distintas simetrías (cuadrada, triangular, cúbica, hexagonal, etc.), y que para efectos de ilustración se considerará cuadrada y bidimensional, los sitios de la cual pueden estar en cualquiera de dos estados, que llamaremos "ocupado" y "vacío", de manera aleatoria. Todo el problema queda definido por un solo parámetro p , la probabilidad de que un sitio esté ocupado.

La estructura de una configuración dada puede describirse en términos de agrupaciones de sitios ocupados unidos a distancias a primeros vecinos denominados cúmulos, siendo usual denominar s -cúmulos a aquellos cúmulos que consisten de s sitios ocupados conexos. En una malla grande habrá más cúmulos que en una pequeña, de modo que resulta conveniente dividir el número de cúmulos entre el número total de sitios en la malla. Esta razón se denomina *número de s -cúmulos* y lo denotaremos por n_s , una vez que se ha realizado un promedio sobre distintas configuraciones de sitios ocupados entre los sitios de la malla.

Si el valor de p es muy pequeño, ocurre que la mayoría de los sitios ocupados se encontrarán aislados, con pocos pares o tripletes. Por otro lado, cuando la concentración p es cercana a la unidad entonces casi todos los sitios estarán ocupados y conectados unos a otros de modo que forman un cúmulo grande que se extiende de un lado a otro del enrejado. De acuerdo a los resultados de Shante y Kirkpatrick [2.2], en una malla suficientemente grande, o existe uno de estos cúmulos, o no existe, pero nunca se presentan dos o más de tales cúmulos "infinitos". Esta característica permite definir la transición de fase del modelo de percolación, siendo tal que para una red infinita, existe un *umbral de percolación* p_c claramente definido, en donde se presenta por vez primera un cúmulo que percola a través de toda la malla. Cerca de p_c , la única escala de longitud relevante para describir las propiedades del sistema es la longitud de correlación, la cual diverge en el punto crítico, de modo tal que justo en p_c no hay una unidad de longitud con la cual escalar la dependencia de distintas propiedades con la longitud. Como resultado, el sistema se ve cualitativamente idéntico cuando se mira con distintas magnificaciones. Este fenómeno, denominado auto-semejanza, es el causante de varias propiedades anómalas de los sistemas diluidos cerca de su umbral de percolación.

2.2.- Exponentes críticos y teoría de escalamiento.

(a).- Teoría de escalamiento para los números de cúmulos.

Para hacer la discusión más cuantitativa, definamos a la probabilidad de percolación P_∞ como la fracción de sitios ocupados pertenecientes al cúmulo infinito que percola. Entonces P_∞ se anula para $p < p_c$, siendo distinto de cero para valores mayores a p_c ; cerca de p_c podemos definir un exponente crítico postulando que:

$$P_{\infty} \approx (p - p_c)^{\beta},$$

relación que se satisface para p ligeramente superior a p_c . Este exponente crítico es el que tradicionalmente se asocia al comportamiento crítico del parámetro de orden en otros sistemas, usualmente magnéticos o fluidos.

El comportamiento de un sistema cerca del punto crítico en una transición de fase se describe mediante exponentes críticos. Para el problema de percolación, es conveniente hacer las siguientes definiciones [2.1]:

$$\begin{aligned} \left[\sum_s n_s(p) \right]_{sing} &\propto |p - p_c|^{2-\alpha}, \\ \left[\sum_s s \cdot n_s(p) \right]_{sing} &\propto (p - p_c)^{\beta}, \quad \text{para } p > p_c, \\ \left[\sum_s s^{\gamma} \cdot n_s(p) \right]_{sing} &\propto |p - p_c|^{-\gamma}, \\ \left[\sum_s s \cdot n_s(p) e^{-hs} \right]_{sing} &\propto h^{1/\delta}, \\ \xi(p) &\propto |p - p_c|^{-\nu}. \end{aligned}$$

Se espera que las relaciones se satisfagan para p cerca de p_c y el subíndice *sing* denota a la parte no analítica principal de la cantidad correspondiente. El número real h es una variable muda adecuada para calcular una suma y se aproxima a cero, en cuyo caso, la suma vale p_c . La última cantidad corresponde a la longitud de coherencia (correlación o conectividad), y corresponde al radio promedio de un cúmulo típico.

La analogía con el caso magnético, con la variable $p - p_c$ reemplazada por $T - T_c$ es la siguiente: La primera suma se asocia con la energía libre, y la ley de potencia asociada es tal que la segunda derivada diverge con el exponente α , asociado al calor específico. La susceptibilidad se encuentra asociada a la tercera suma y diverge con el exponente γ . Finalmente, las correlaciones del sistema magnético se miden a través de una longitud de correlación definida en términos de la influencia en el valor de una variable microscópica sobre el valor de otra cuando se encuentran alejadas por una cierta distancia.

De entre los estudios existentes para tratar a este problema, se discutirán dos, a saber: el tratamiento basado en una teoría de escalamiento de los números de cúmulos, que se utilizará para calcular el valor de algunos de los exponentes críticos y para deducir algunas relaciones generales entre los mismos, y por otro lado, se discutirán los resultados de simulaciones de Monte Carlo (MC) que permiten localizar al umbral de percolación y estimar los exponentes críticos.

Para las propiedades de los cúmulos, se encuentra que los resultados MC reportados por Hoshen et al. [2.3] para los número de cúmulos en la malla triangular y en $p = p_c$ permiten deducir la relación

$$n_s(p_c) \propto s^{-\tau}$$

La teoría de escalamiento permite relacionar este parámetro libre τ con los distintos exponentes críticos [2.1].

El comportamiento crítico está caracterizado por el hecho de que el tamaño típico de los cúmulos se vuelve muy grande cerca de la transición de fase y diverge en p_c ; pues de otra forma el radio típico de los cúmulos ξ no divergiría. Uno puede definir el "tamaño típico de cúmulo" s_ξ como aquel tamaño que da la contribución principal a cualquiera de los momentos de la distribución n_s , que definen a los exponentes críticos, en la expectativa de que tal tamaño es el mismo para todos los momentos. La divergencia de este tamaño típico está caracterizada por un exponente (denominado 'exponente de brecha', denotado por $1/\sigma$) tal que, en la región crítica, el comportamiento del sistema está dominado por cúmulos de tamaño

$$s_\xi \propto |p - p_c|^{-1/\sigma}$$

Debido a esta suposición, resulta que todas las propiedades individuales de los cúmulos deben depender de la razón s/s_ξ . La suposición de que el número de cúmulos es una función de esta razón sería tan restrictiva, que no permitiría explicar el comportamiento observado en p_c . Una elección un poco más elaborada es suponer la relación:

$$\frac{n_s}{n_{s_\xi}} = F\left(\frac{s}{s_\xi}\right)$$

Como procedimiento final, se hace la sustitución de la razón n_s/n_{s_ξ} por $n_s/n_s(p_c)$, de modo que se supone que la razón $v_s(p) = n_s(p)/n_s(p_c)$ es función únicamente de la razón s/s_ξ . Empleando la relación funcional de ley de potencias calculada para cuando $p \rightarrow p_c$ ($n_s(p_c) \propto s^{-\tau}$), así como la expresión que define al exponente de brecha en términos del tamaño típico de cúmulo, tenemos la expresión final para el escalamiento de los números de cúmulos:

$$n_s(p) \propto s^{-\tau} f(z),$$

con

$$z = (p - p_c)s^\sigma \quad \text{y} \quad f(0) = 1.$$

Las características de la función de escalamiento $f(z)$ se siguen del comportamiento de los números de cúmulos. Para s finito, estos son polinomios en p , sin singularidad en p_c , de modo que esperamos que la función $f(z)$ permanezca regular en $p = p_c$, i. e. en $z = 0$, además de que, para z grande, la función de escalamiento debe decaer lo suficientemente rápido para hacer converger las series que definen a los exponentes críticos.

(b).- Relaciones entre los exponentes críticos.

En esta sección se presenta el procedimiento mediante el cual se pueden relacionar los exponentes τ y σ con los demás exponentes críticos. Para realizar la evaluación de la parte crítica de un momento de la distribución de cúmulos de una manera cualitativa, podemos reemplazar en la suma a cada factor s por el tamaño típico de cúmulo s_ξ y a los números de cúmulos n_s por el número típicos de cúmulos $n_{s_\xi} \propto s^{-\tau}$. La suma sobre todos los tamaños da un factor adicional s_ξ de modo que:

$$\left[\sum_s s^k n_s \right]_{\text{avg}} \propto s_c^{1+k-\tau} \propto |p-p_c|^{(\tau-1-k)\sigma}$$

Tomando $k = 0$, se obtiene el exponente asociado a los números de cúmulos, si $k = 1$, se obtiene el asociado al parámetro de orden y para $k = 2$, el de la susceptibilidad:

$$2 - \alpha = \frac{\tau - 1}{\sigma}, \quad \beta = \frac{\tau - 2}{\sigma}, \quad -\gamma = \frac{\tau - 3}{\sigma}$$

Justo en el umbral de percolación, la suma que define al exponente δ tiene una contribución principal debida a cúmulos de tamaños cercanos a $1/h$, de modo tal que la parte no analítica de la suma $\sum_s n_s(p_c) e^{-hs}$ varía como $h^{-1} h^{-1} h^\tau = h^{\tau-2}$, de donde se tiene la relación:

$$\frac{1}{\sigma} = \tau - 2$$

Resolviendo estas ecuaciones para expresar a los exponentes críticos como función de los "exponentes libres" y eliminando a estos últimos, se obtienen las relaciones:

$$\tau = 2 + \frac{1}{\sigma}, \quad \sigma = \frac{1}{\beta\delta} = \frac{1}{\gamma + \beta},$$

$$2 - \alpha = \gamma + 2\beta = \beta(\delta + 1)$$

Estas son las famosas leyes de escalamiento, conocidas desde hace varios años para otras transiciones de fase [2.4-6].

2.3.- Geometría fractal y escalamiento a tamaño finito.

La estructura auto-semejante del sistema en p_c se puede revelar cuantitativamente de distintas maneras. Primero, podemos elegir un punto perteneciente al cúmulo "infinito", y contar los sitios, dentro de una caja de lado L y centro en el punto, que pertenecen también al cúmulo que percola. Para L grande, el promedio de este número se aproxima asintóticamente a una ley de potencia [2.7]:

$$M(L) \approx AL^D \quad (2.1)$$

Este comportamiento debe compararse con el de un sistema homogéneo, en el cual $M(L) = \rho L^d$, donde d es la dimensión euclídea y ρ es la densidad uniforme. El exponente D , el cual es cercano a 1.9 en $d = 2$, 2.5 en $d = 3$ e igual a 4 para $d \geq 6$, es llamado la *dimensión fractal* del cúmulo [2.8]. Leyes de potencias como la anterior se esperan cuando no existe otra longitud mediante la cual L se pueda escalar.

Una medición alternativa de D se obtiene mediante una comparación del número de sitios dentro de los cúmulos más grandes de la figura 2.1. En la figura 2.1a, se muestra una simulación por computadora en la malla triangular a $p = p_c$ y con dilución de sitio, enfatizando la disposición del cúmulo más grande. La figura 2.1b muestra un proceso de escalamiento ('coarse-graining') de la disposición mostrada en 2.1a: los sitios de la malla fueron agrupados en celdas de 3 sitios. Luego, cada una de estas celdas se reemplazó

⁴ $p_c - \sum_s s n_s(p_c) e^{-hs} = \sum_s s n_s(p_c) (1 - e^{-hs}) \approx q_0 \int_0^{1-\tau} (1 - e^{-hs}) ds = q_0 h^{\tau-2} \int_0^{1-\tau} (1 - e^{-y}) dy = q_0 h^{1/\delta} \int_0^{1-1/\delta} (1 - e^{-y}) dy.$

por un solo sitio ocupado nuevo si la mayoría de sus sitios estaban ocupados. Cualitativamente, la Fig. 2.1b no puede distinguirse de una pieza de la Fig. 2.1a. Es imposible decir, a partir de la imagen, a qué nivel de escalamiento, o magnificación, fueron tomadas las dos imágenes. Esta es una manifestación cualitativa de la auto semejanza. Dado que la unidad de longitud fue cambiada por un factor $b = \sqrt{3}$, la longitud L en la Fig. 2.1a se vuelve L/b en la Fig. 2.1b. Si no existe otro parámetro de cual dependa $M(L)$, entonces $M(L)$ debe ser una función homogénea, de la forma

$$M(L) \approx b^D M(L/b),$$

siendo la ley de potencia $M(L) \sim L^D$ la única función independiente de b que satisface a esta última ecuación.

Puesto que la relación 2.1 se aplica sólo para el promedio del número de puntos vecinos a un punto central arbitrario en el cúmulo infinito, mediciones alrededor de distintos puntos centrales pueden resultar en fluctuaciones alrededor del promedio, así como en variaciones en la amplitud. La desviación cuadrática media se comporta como [2.9]:

$$\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = CL^{2D},$$

donde C es una medida de la distribución del tamaño de los "lagos" de sitios vacíos dentro del cúmulo más grande [2.8].

Es interesante establecer el vínculo que existe entre los exponentes r y D , para lo cual se considerará el radio de giro de un cúmulo de tamaño s , el cual se define como la raíz de la distancia cuadrada media entre pares de sitios dentro del cúmulo:

$$R_g^2 = \frac{\sum_{i,j} (r_i - r_j)^2}{2s^2}$$

Sobre escalas L que son pequeñas comparadas con R_g , la "masa" promedio del cúmulo se escala como L^D . Pero esta masa se debe aproximar a la masa total del cúmulo, s , para $L > R_g$. Dimensionalmente, esto debe implicar que $s \sim R_g^D$. Dado que R_g es la única longitud relevante, esperamos que $M(L)$ dependa de L sólo vía la razón L/R_g , de ahí que:

$$M_s(L) = R_g^D m(L/R_g),$$

donde la función de escala $m(x)$ debe aproximarse a un valor constante para $x \gg 1$ y $m(x) \sim x^D$ para $x \ll 1$.

En cuanto a la distribución con respecto al tamaño de los cúmulos finitos, la probabilidad de pertenecer a un cúmulo de tamaño s es s^{-n_s} . La auto semejanza implica que s^{-n_s} debe tener la misma dependencia en s en la dos partes de la figura 1. Puesto que los cúmulos se han escalado por un factor b^D , y puesto que el número total de sitios decreció por un factor b^d , tenemos que:

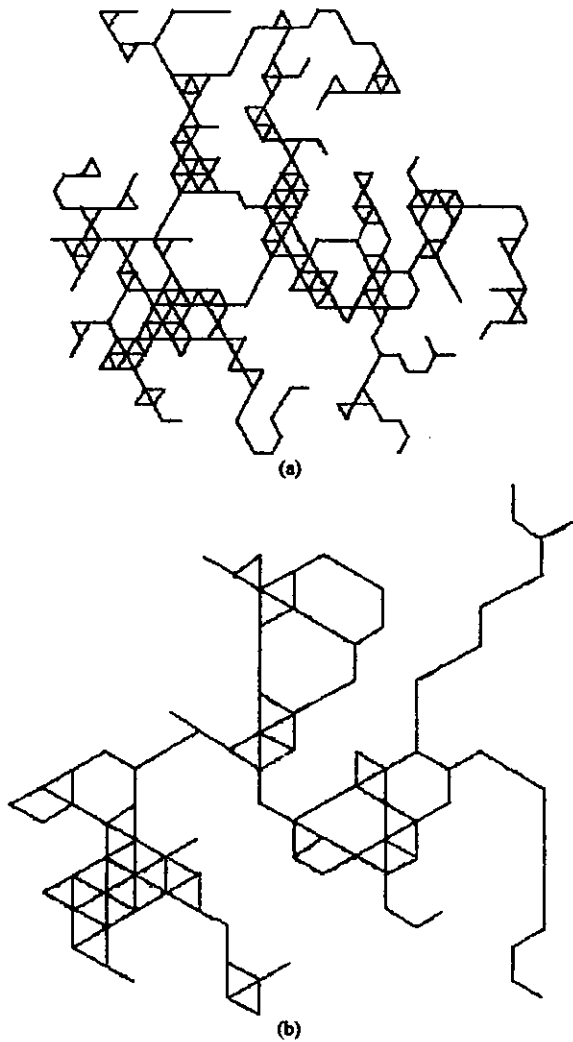


Fig. 2.1.-Percolación de sitio en la malla triangular y en el punto crítico $p_c = \frac{1}{3}$. (a) Simulación original. (b) Configuración renormalizada ("coarse-graining"), con agrupación de tres sitios y ocupación mediante una regla de mayoría. [2.7]

$$s \cdot n_s = b^{-d} \left(\frac{s}{b^D} \right) n_{s/b^D}$$

lo cual implica que:

$$n_s \approx s^{-\tau}$$

donde

$$\tau = \frac{d+D}{D}$$

de ahí que la dimensión fractal determine al exponente libre τ y, a través de este, a todos los demás exponentes.

2.4.-Universalidad en el problema de percolación.

Para la percolación, el postulado de universalidad asegura que los exponentes y la forma de la función de escalamiento $f(z)$ no cambia si modificamos detalles "menores", como la estructura de la retícula. La forma generalizada de la hipótesis de escalamiento, donde se incluyen a todas las mallas de la misma dimensión, se realiza introduciendo factores de escala dependientes de la malla q y r , además de los exponentes σ y τ , independientes de la malla, así como una función de escala universal:

$$n_s = qs^{-\tau} f_s(r(p-p_c)s^\sigma), \quad f_s(0) = 1.$$

La hipótesis de universalidad se ha sometido a distintas pruebas, los resultados de las cuales han permitido confirmarla, dentro de los errores estadísticos incurridos. En la Tabla 2.1 se resumen las estimaciones de los exponentes críticos como función de la dimensión.

TABLA 2.1.- Exponentes críticos para el problema de percolación [2.1].

d	α	β	γ	δ	ν	σ	τ
1	1	0	1	∞	1	1	2
2	-0.6	0.14	2.43	18	1.3	0.39	2.0
3		0.4	1.7	5	0.88	0.4	2.2
4		0.5	1.5	3	0.7		2.25
5		0.7	1.2	2	0.6		2.43
6		1.0	1.0	2	$\frac{1}{2}$		$\frac{5}{2}$
7		1.0	1.0	2	$\frac{1}{2}$		$\frac{5}{2}$
∞	-1	1.0	1.0	2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{2}$

En la tabla 2.2 se muestran los valores de la concentración crítica para distintas mallas en dos y tres dimensiones [6.11].

La conclusión que se sigue de la información presentada aquí es que las leyes de escalamiento para los exponentes críticos están confirmadas a través de las distintas determinaciones de los exponentes y que estas leyes de escalamiento pueden ser explicadas mediante una suposición simple acerca de los números de cúmulos.

TABLA 2.2.- Concentraciones de percolación para distintas mallas. [6.11]

MALLA	DILUCIÓN DE SITIO	DILUCIÓN DE ENLACE
HC	0.6962	0.65271
SQ	0.592746	0.50000
TRIANGULAR	0.500000	0.34729
DIAMANTE	0.43	0.388
SC	0.3116	0.2488
BCC	0.246	0.1803
FCC	0.198	0.119
D = 4 (SC)	0.197	0.1601
D = 5 (SC)	0.141	0.1182
D = 6 (SC)	0.107	0.0942
D = 7 (SC)	0.089	0.0787

CAPITULO 3.- MECÁNICA ESTADÍSTICA DEL MODELO DE ISING.

3.1.- Introducción.

En este capítulo se desarrollan las distintas aproximaciones al problema planteado por el modelo de Ising, iniciando con dos ejemplos de la aplicación de la teoría de campo medio: la teoría molecular de Weiss, propuesta en 1907 y que resulta equivalente a la de Bragg-Williams (1934-35), para posteriormente dar una descripción del tratamiento realizado por Bethe, así como las soluciones exactas para el modelo de Ising en una y dos dimensiones.

El sistema de Ising queda definido en términos del Hamiltoniano:

$$H = J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i^z S_j^z - \mu h \sum_i S_i^z.$$

Este Hamiltoniano constituye un modelo para ciertos materiales magnéticos, y describe la interacción de N átomos magnéticos localizados en una red regular que interactúan unos con otros a través de la fuerza de intercambio, la cual introduce términos en el Hamiltoniano de la forma ⁵

$$JS_i \cdot S_j = JS_i^z S_j^z,$$

en donde los vectores de momento angular de espín S_i apuntan en la dirección z del campo h , el segundo término representa, precisamente la interacción (Zeeman) del campo con los momentos magnéticos, la cual es del tipo $\mathbf{h} \cdot \mathbf{m}_i = -g\mu h S_i^z$, donde μ es el magnetón de Bohr y g es el factor de Landé. Se considera, además, que las interacciones son exclusivamente entre sitios en la red. El caso más sencillo es aquel en el que únicamente existe interacción entre espines primeros vecinos, de ahí la notación $\langle i, j \rangle$ para la suma. Finalmente, el modelo de Ising queda completamente definido al indicar que éste se refiere a la situación donde $S = \hbar/2$, de modo que sólo son posibles dos orientaciones de los espines. Fig. 3.1.

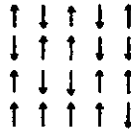


Fig. 3.1.- Modelo de Ising bidimensional. Las variables (acoplamientos de intercambio) se hallan en los enlaces, mientras que los espines están en los vértices.

En términos de un conjunto de variables binarias $\sigma_i \in \{-1, +1\}$, el Hamiltoniano toma la forma:

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i.$$

⁵ La interacción de intercambio es una consecuencia del Principio de Exclusión: dos electrones con espines paralelos no pueden ocupar la misma región del espacio, y tenderán a apartarse. Como resultado, la energía de repulsión de Coulomb entre pares de electrones con espines paralelos (estados de triplete) es menor que la de pares de electrones con espines antiparalelos (estados de singulete), resultando favorecido un ordenamiento ferromagnético de los espines. [3.2]

donde se han redefinido las constantes que aparecen en el Hamiltoniano para tomar en consideración los factores que involucran al magnetón de Bohr. Si, a una temperatura dada, el valor de expectación de la magnetización es M , esto es

$$M = N\langle\sigma_i\rangle,$$

para toda i , entonces las interacciones que involucran a un espín particular σ_0 son:

$$H(\sigma_0) = \left(-J \sum_j \sigma_j + h\right) \sigma_0 = -\sigma_0(qJm - h) - J\sigma_0 \sum_j (\sigma_j - m)$$

donde la suma en j es sobre los q primeros vecinos de σ_0 y $m = M/N$. El segundo término puede estimarse como una medida de las desviaciones locales de la magnetización en la posición de σ_0 .

3.2.- El modelo de Ising en la aproximación de Bragg - Williams.

Entre 1934 y 1935, Bragg y Williams desarrollaron una teoría de campo medio que, haciendo uso del concepto de orden de largo alcance, permitió explicar las características relevantes en la transición de orden-desorden en el modelo de Ising [3.1]. La suposición básica de estos investigadores fue que la energía de un átomo individual está determinada por el orden promedio que prevalece en el sistema, más que por los átomos vecinos fluctuantes.

La definición del *parámetro de orden de largo alcance* es:

$$L = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i$$

y a través de la relación

$$M = N\mu L$$

se tiene que el parámetro de orden es una medida de la magnetización del sistema. El término de interacción en el Hamiltoniano se aproxima por la expresión $-(Jq\sigma^2)\sum_i \sigma_i$, es decir, para cada espín, se sustituye el valor del espín de cada uno de sus z vecinos por el valor promedio. Haciendo uso de $\langle\sigma\rangle = \langle L\rangle$, tenemos que la energía configuracional del sistema es:

$$E = -\frac{1}{2}(qJ\langle L\rangle)NL - \mu hNL.$$

El valor promedio de la energía es entonces:

$$U = -\frac{1}{2}qJN\langle L\rangle^2 - \mu hN\langle L\rangle.$$

La energía requerida para un cambio de espín está, en promedio, dada por:

$$\Delta\varepsilon = -qJ\langle\sigma\rangle\Delta\sigma - \mu h\Delta\sigma = 2\mu \left(\frac{qJ}{\mu} \langle\sigma\rangle + h \right),$$

de donde se sigue que el campo molecular interno es:

$$h' = \frac{qJ}{\mu} \langle \sigma \rangle = \frac{qJ}{N\mu^2} \langle M \rangle.$$

El número fraccionario de espines con dirección hacia arriba ó hacia abajo se relacionan con L de modo que

$$N_+ = \frac{N}{2}(1+L) \quad \text{y} \quad N_- = \frac{N}{2}(1-L),$$

respectivamente. En equilibrio, las poblaciones relativas están dadas por

$$\frac{\langle N_- \rangle}{\langle N_+ \rangle} = \exp \left\{ \frac{\Delta \varepsilon}{kT} \right\} = \exp \left\{ -2\mu(h' + h) \right\},$$

de estas dos últimas expresiones, se encuentra que:

$$\frac{1 - \langle L \rangle}{1 + \langle L \rangle} = \exp \left\{ -2(qJ \langle L \rangle + \mu h) / kT \right\},$$

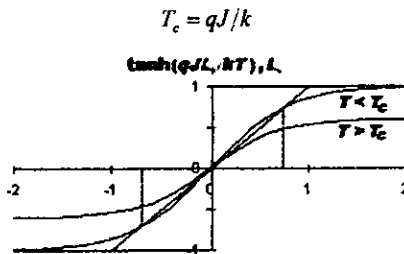
ecuación que puede reescribirse como

$$\langle L \rangle = \tanh \left[(qJ \langle L \rangle + \mu h) / kT \right] \quad (3.1)$$

La posibilidad de que el modelo muestre una magnetización espontánea está restringida a que la ecuación resultante en el límite $h \rightarrow 0$ tenga una solución:

$$\langle L_0 \rangle = \tanh(qJ \langle L_0 \rangle / kT) \quad (3.2).$$

Para intersecciones de la curva $y = \tanh(qJ \langle L \rangle / kT)$ con $y = \langle L \rangle$ distintas de $y = 0$, la pendiente de la primera varía a partir del valor inicial qJ/kT hasta el final de 0, en tanto que la pendiente de la segunda es la unidad, (Fig. 3.2) de modo que existe una intersección distinta de la trivial sólo si $qJ/kT > 1$, valor que corresponde a la temperatura crítica del sistema en esta aproximación:



Para obtener una dependencia aproximada de $\langle L_0 \rangle$ con T cerca del punto crítico, escribimos $\langle L_0 \rangle = \tanh(\langle L_0 \rangle T_c / T)$ y usando la aproximación $\tanh(x) \cong x - x^3 / 3$, obtenemos

$$\langle L_0(T) \rangle \approx \left\{ 3 \left(\frac{T_c - T}{T} \right) \right\}^{1/2}.$$

La energía a campo cero es

$$U_0(T) = -\frac{1}{2} qJN \langle L_0 \rangle^2$$

y el calor específico

$$C_0(T) = -qJN \langle L_0 \rangle \frac{d\langle L_0(T) \rangle}{dT} = \frac{Nk \langle L_0 \rangle^2}{\frac{(T/T_c)^2}{1 - \langle L_0 \rangle^2} - T_c}$$

donde la última expresión se obtiene con la ayuda de la ec. (3.2). Así, para $T > T_c$, tanto U_0 como C_0 son idénticamente cero. El calor específico muestra una discontinuidad en $T = T_c$, cuyo valor se obtiene del límite:

$$C_0(T_c^-) = \lim_{x \rightarrow 0} \left(\frac{3Nkx}{\frac{(1-x)^2}{1+3x} - (1-x)} \right) = \frac{3}{2} Nk,$$

donde $x = (1 - T_c/T)$. El comportamiento del calor específico se muestra en la Fig. 3.3.

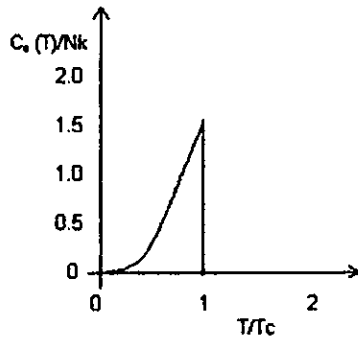


Fig. 3.3.- Calor específico a campo cero para un ferromagneto de Weiss.

La susceptibilidad magnética se encuentra a partir de [1.2]

$$\chi(T, h) = \left(\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} \right)_T = N\mu \left(\frac{\partial \langle L \rangle}{\partial h} \right)_T = \frac{N\mu^2}{kT} \frac{1}{\cosh^2 \left[\frac{(qJ \langle L \rangle + \mu h)/kT}{1 - \langle L \rangle^2} \right] - qJ/kT},$$

donde se ha usado la ecuación (3.1) para la evaluación de la derivada. Sin campo magnético aplicado, tenemos

$$\chi_0(T) = \frac{N\mu^2}{kT} \frac{1}{\cosh^2 [qJ \langle L_0 \rangle / kT] - qJ/kT} = \frac{N\mu^2}{qJ} \frac{T_c/T}{\cosh^2 [(L_0)T_c/T] - T_c/T},$$

y para $\langle L_0 \rangle \ll 1$, obtenemos la ley de Curie-Weiss

$$\chi_o(T) \approx \frac{N\mu^2}{k} \frac{1}{T - T_c} \quad (T > T_c, h \rightarrow 0)$$

El comportamiento que se obtiene para valores de T menor que, pero cercanos a T_c , es tal que:

$$\chi_o(T) \approx \frac{N\mu^2}{2k} \frac{1}{T_c - T} \quad (T < T_c, h \rightarrow 0)$$

Experimentalmente se encuentra que la ley de Curie-Weiss se satisface con considerable precisión, excepto que el valor empírico de T_c obtenido del ajuste es un poco mayor que la verdadera temperatura de transición del material.

Finalmente, la relación entre $\langle L \rangle$ y h en $T = T_c$, se encuentra al emplear la aproximación $\tanh^{-1}x \cong x + x^3/3$ en la ec. (3.1), para obtener

$$\langle L \rangle \approx \left(\frac{3\mu h}{kT_c} \right)^{1/3} \quad (T = T_c, h \rightarrow 0).$$

3.3.- El modelo de Ising en la aproximación de Bethe.

En esta aproximación, se tratan de una manera más precisa a las interacciones entre un espín y sus espines primeros vecinos.

Un espín σ_0 se estima como el espín central en un grupo, el cual consiste de ese espín y sus q primeros vecinos, y al escribir el Hamiltoniano de este grupo, se consideran explícitamente a las interacciones entre el espín central y los q vecinos, mientras que las interacciones de los vecinos con los demás espines es tomada en cuenta a través de un campo medio h' . Así

$$H_{q+1} = -\mu h \sigma_0 - \mu(h+h') \sum_{j=1}^q \sigma_j - J \sum_{j=1}^q \sigma_0 \sigma_j,$$

donde h es un campo externo aplicado al sistema. El campo interno se determina a través del requisito de auto-consistencia: el valor medio del espín central, $\langle \sigma_0 \rangle$, debe ser igual al de cualquiera de sus q vecinos.

La función de partición para el grupo es:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_0, \sigma_{j=1}} \exp \left[\frac{1}{kT} \left\{ \mu h \sigma_0 + \mu(h+h') \sum_{j=1}^q \sigma_j + J \sum_{j=1}^q \sigma_0 \sigma_j \right\} \right] \\ &= \sum_{\sigma_0, \sigma_{j=1}} \exp \left[\alpha \sigma_0 + (\alpha + \alpha') \sum_{j=1}^q \sigma_j + \gamma \sum_{j=1}^q \sigma_0 \sigma_j \right] \end{aligned}$$

donde

$$\alpha = \frac{\mu h}{kT}, \quad \alpha' = \frac{\mu h'}{kT} \quad \text{y} \quad \gamma = \frac{J}{kT}.$$

Si se escribe el lado derecho como una suma de dos términos, uno para $\sigma_0 = 1$ y el otro para $\sigma_0 = -1$, tenemos que

$$Z = Z_+ + Z_-$$

donde

$$Z_{\pm} = \sum_{\sigma_j = \pm 1} \exp \left\{ \pm \alpha + (\alpha + \alpha' \pm \gamma) \sum_{j=1}^q \sigma_j \right\} = e^{2\alpha} \{ 2 \cosh(\alpha + \alpha' \pm \gamma) \}^q.$$

El valor promedio del espín central está dado por:

$$\langle \sigma_0 \rangle = \frac{Z_+ - Z_-}{Z},$$

en tanto que el de uno de sus primeros vecinos es:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_j \rangle &= \frac{1}{q} \langle \sum_{j=1}^q \sigma_j \rangle = \frac{1}{q} \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \alpha'} \right) \\ &= \frac{1}{Z} \{ Z_+ \tanh(\alpha + \alpha' + \gamma) + Z_- \tanh(\alpha + \alpha' - \gamma) \} \end{aligned}$$

Igualando estas dos últimas expresiones, tenemos que

$$Z_+ \{ 1 - \tanh(\alpha + \alpha' + \gamma) \} = Z_- \{ 1 + \tanh(\alpha + \alpha' - \gamma) \}$$

y, al sustituir las expresiones para Z_+ y Z_- , tenemos:

$$e^{2\alpha'} = \left(\frac{\cosh(\alpha + \alpha' + \gamma)}{\cosh(\alpha + \alpha' - \gamma)} \right)^{q-1}$$

Esta ecuación determina al valor de α' , lo cual determina al comportamiento magnético de la malla.

La magnetización espontánea se encuentra al hacer $\alpha = 0$, de lo cual se obtiene

$$\alpha' = \frac{q-1}{2} \ln \left\{ \frac{\cosh(\alpha' + \gamma)}{\cosh(\alpha' - \gamma)} \right\}$$

Desarrollando en serie de MacLauren el lado derecho de la ecuación, tenemos:

$$\alpha' = (q-1) \tanh \gamma \left\{ \alpha' - \operatorname{sech}^2 \gamma \frac{\alpha'^3}{3} + \dots \right\}.$$

Una solución distinta de cero requiere que:

$$(q-1) \tanh \gamma > 1,$$

ecuación que permite determinar el valor de la temperatura crítica:

$$T_c = \frac{2J}{k \ln \left(\frac{q}{q-2} \right)}$$

Para temperaturas menores que T_c , el comportamiento en la región crítica del campo molecular es:

$$\alpha' \cong \left\{ 3 \cosh^2 \gamma_c \left[(q-1) \tanh \gamma - 1 \right] \right\}^{1/2} \cong \left\{ 3(q-1)(\gamma - \gamma_c) \right\}^{1/2}$$

$$\cong \left\{ 3(q-1) \frac{J}{kT_c} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \right\}^{1/2}$$

El parámetro de orden se obtiene de:

$$\langle L \rangle = \frac{(Z_+/Z_-) - 1}{(Z_+/Z_-) + 1} = \frac{\sinh(2\alpha + 2\alpha')}{\cosh(2\alpha + 2\alpha') + \exp(-2\gamma)},$$

que, en la región crítica, se reduce a:

$$\langle L_0 \rangle = \frac{\sinh(2\alpha')}{\cosh(2\alpha') + \exp(-2\gamma)} \cong \frac{2\alpha'}{1 + (q-2)/q} = \frac{q}{q-1} \alpha'$$

Con el auxilio de expresiones anteriores, se puede escribir como

$$\langle L_0 \rangle = \left\{ 3 \left(\frac{q}{q-1} \right) \frac{q}{2} \ln \left(\frac{q}{q-2} \right) \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \right\}^{1/2}$$

El estudio de las correlaciones entre espines en la malla se facilita al calcular los valores medios $\langle N_{++} \rangle$, $\langle N_{--} \rangle$, $\langle N_{+-} \rangle$ en términos de los parámetros α , α' y γ . Si llevamos a cabo todas las sumas del grupo en la función de partición, excepto que dejamos sin sumar a los espines σ_0 y σ_1 , obtendremos:

$$Z = \sum_{\sigma_0, \sigma_1 = \pm 1} \exp\{\alpha\sigma_0 + (\alpha + \alpha')\sigma_1 + \gamma\sigma_0\sigma_1\} \{2 \cosh(\alpha + \alpha' + \gamma\sigma_0)\}^{q-1}$$

la cual se puede escribir como

$$Z = Z_{++} + Z_{--} + Z_{+-}$$

correspondiendo cada término a los casos en que $\sigma_0 = \sigma_1 = +1$, $\sigma_0 = \sigma_1 = -1$, y $\sigma_0 = -\sigma_1 = \pm 1$, respectivamente. Usando el hecho de que

$$N_{++} : N_{--} : N_{+-} = Z_{++} : Z_{--} : Z_{+-}$$

obtenemos:

$$\langle N_{++} \rangle \propto e^{(2\alpha + \alpha' + \gamma)} \{2 \cosh(\alpha + \alpha' + \gamma)\}^{q-1},$$

$$\langle N_{--} \rangle \propto e^{(-2\alpha - \alpha' + \gamma)} \{2 \cosh(\alpha + \alpha' - \gamma)\}^{q-1}$$

$$= e^{(-2\alpha - 3\alpha' + \gamma)} \{2 \cosh(\alpha + \alpha' + \gamma)\}^{q-1},$$

$$\langle N_{+-} \rangle \propto e^{(-\alpha' - \gamma)} \{2 \cosh(\alpha + \alpha' + \gamma)\}^{q-1} + e^{(\alpha' - \gamma)} \{2 \cosh(\alpha + \alpha' - \gamma)\}^{q-1}$$

$$= 2e^{(-\alpha' - \gamma)} \{2 \cosh(\alpha + \alpha' + \gamma)\}^{q-1}.$$

Normalizando con la ayuda de la relación

$$\langle N_{++} \rangle + \langle N_{--} \rangle + \langle N_{+-} \rangle = \frac{qN}{2},$$

obtenemos los resultados:

$$\langle N_{++}, N_{--}, N_{+-} \rangle = \frac{qN}{2} \frac{\{e^{2\alpha+2\alpha'+\gamma}, e^{-2\alpha-2\alpha'+\gamma}, 2e^{-\gamma}\}}{2 \{e^{\gamma} \cosh(2\alpha+2\alpha') + e^{-\gamma}\}}.$$

Esta ecuación nos dice que, si $J > 0$, existe una correlación positiva entre espines iguales, y negativa en el caso contrario, además de que estas correlaciones son consecuencia directa de las interacciones a primeros vecinos.

Para la evaluación de la energía interna U_0 y el calor específico C_0 en ausencia de campo hacemos uso de la expresión

$$U_0 = -J \left(\frac{qN}{2} - 2q \langle N_{+-} \rangle + 4 \langle N_{++} \rangle \right)_{\alpha=0},$$

donde la expresión para $\langle N_{+-} \rangle$ se obtiene de la correspondiente a $\langle L \rangle$:

$$\langle N_{+-} \rangle_{\alpha=0} = \frac{N}{2} (1 + \langle L_0 \rangle) = \frac{N}{2} \frac{e^{2\alpha'} + e^{-2\gamma}}{\cosh(2\alpha') + e^{-2\gamma}}.$$

Haciendo estas sustituciones, se obtiene que la energía interna es:

$$U_0 = \frac{qJN}{2} \frac{\cosh(2\alpha') - e^{-2\gamma}}{\cosh(2\alpha') + e^{-2\gamma}}.$$

Para $T > T_c$, $\alpha' = 0$, de modo que

$$U_0 = -\frac{qJN}{2} \frac{1 - e^{-2\gamma}}{1 + e^{-2\gamma}} = -\frac{qJN}{2} \tanh \gamma.$$

En esta forma, se observa que aún para temperaturas mayores a la crítica, el sistema presenta un cierto orden de corto alcance. El calor específico es, en este régimen

$$C_0/Nk = \frac{q\gamma^2}{2} \operatorname{sech} \gamma.$$

Aquí se observa que, a diferencia de la teoría de Bragg-Williams, el calor específico no se anula para $T > T_c$, característica que asemeja más el modelo a los sistemas físicos reales. En la figura 3.4 se comparan los resultados de la aproximación de Bethe y la de Bragg-Williams para el calor específico. El valor límite de C_0 , conforme $T \rightarrow T_c$ por arriba, se obtiene de la expresión anterior para C_0 en el límite $\gamma \rightarrow \gamma_c$:

$$C_0^+/Nk = \frac{q\gamma_c^2}{2} \sinh^2 \gamma_c = \frac{1}{8} \frac{q^2(q-2)}{(q-2)^2} \left\{ \ln \left(\frac{q}{q-2} \right) \right\}^2.$$

El resultado para el límite inferior se obtiene de la expresión general para la energía y es:

$$C_v^- / Nk = \frac{1}{8} \frac{q^2(q-2)(3q-2)}{(q-1)^2} \left\{ \ln \left(\frac{q}{(q-2)} \right) \right\}^2,$$

de modo que la discontinuidad en el calor específico es:

$$\Delta C_v^- / Nk = \frac{3}{8} \frac{q^2(q-2)}{(q-1)^2} \left\{ \ln \left(\frac{q}{(q-2)} \right) \right\}^2.$$

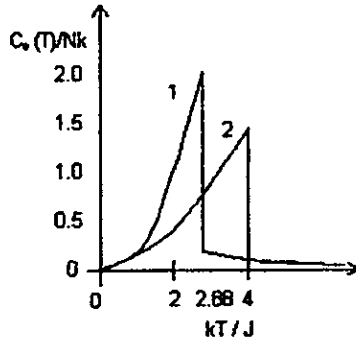


Fig. 3.4.- Calor específico a campo cero para el modelo de Ising con $q = 4$. La curva 1 se obtiene de la aproximación de Bethe, en tanto que la 2, de Bragg-Williams.

3.4.- Solución exacta para la cadena de Ising.

El problema de la cadena de espines tratada originalmente por Ising en 1925, encuentra una de sus varias justificaciones en que sirve para introducir y desarrollar el formalismo de la matriz de transferencia [3.5], que permitió a Onsager en 1944 el tratamiento exitoso del modelo en dos dimensiones sin campo magnético externo. [3.1-3] Para explicar el método, apliquemos condiciones de frontera periódicas, de modo tal que la topología es la de un anillo y el N -ésimo espín se convierte en vecino del primero, Fig. 3.5. Con la ayuda de este artilugio, el Hamiltoniano

$$H\{\sigma_i\} = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \mu h' \sum_i \sigma_i,$$

exhibe una propiedad notable: es invariante ante traslaciones, lo que puede escribirse como:

$$H\{\sigma_i\} = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{1}{2} \mu h' \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}),$$

donde h' es un campo magnético aplicado y μ es el magnetón de Bohr⁶.

⁶ $\mu = e\hbar/2mc$, y resulta de la relación existente entre el momento dipolar magnético m , de una partícula y su momento angular de espín S : $m_s = -g_s \mu S / \hbar$, donde g_s es el factor de Landé y \hbar es la constante de Planck.

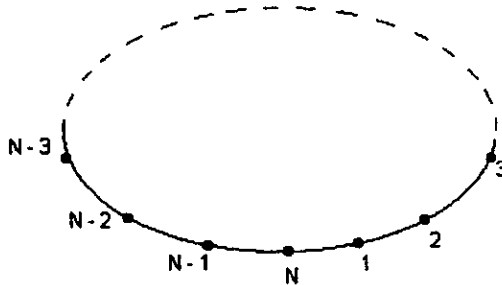


Fig. 3.5.- Cadena de Ising con condiciones a la frontera periódicas.

La función de partición para este Hamiltoniano se expresa como

$$\begin{aligned}
 Z(h, K) &\equiv \sum_{\{config\}} \exp\{\beta H(config)\} = \sum_{\substack{\sigma_i = \pm 1 \\ i=1, \dots, N}} \exp\left\{\sum_i \left(K\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{1}{2}h(\sigma_i + \sigma_{i+1})\right)\right\} \\
 &= \sum_{\substack{\sigma_i = \pm 1 \\ i=1, \dots, N}} \prod_i \exp\left\{\sum_i \left(K\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{1}{2}h(\sigma_i + \sigma_{i+1})\right)\right\} \\
 &= \sum_{\substack{\sigma_i = \pm 1 \\ i=1, \dots, N}} \prod_i \langle \sigma_i | \mathbf{P} | \sigma_{i+1} \rangle = \sum_{\substack{\sigma_i = \pm 1 \\ i=1, \dots, N}} \prod_i \mathbf{P}_{\sigma_i\sigma_{i+1}}
 \end{aligned}$$

donde

$$h = \frac{\mu h'}{kT}, \quad K = \frac{J}{kT} \quad \text{y}$$

$$\mathbf{P}_{\sigma_i\sigma_{i+1}} = \langle \sigma_i | \mathbf{P} | \sigma_{i+1} \rangle \equiv \exp\left\{K\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{1}{2}h(\sigma_i + \sigma_{i+1})\right\}.$$

La anterior es la definición de los elementos de la matriz \mathbf{P} , denominada matriz de transferencia, cuya forma explícita es:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}(+,+) & \mathbf{P}(+,-) \\ \mathbf{P}(-,+) & \mathbf{P}(-,-) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix}.$$

En vista de que $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ constituye una base del espacio vectorial de espinores, tenemos que

$$\sum_{\sigma_i = \pm} |\sigma_i\rangle \langle \sigma_i| = \mathbf{1}$$

Con este resultado, la función de partición se puede evaluar:

$$\begin{aligned}
Z(K, h) &= \sum_{\sigma_1 = \pm} \langle \sigma_1 | \left(\prod_{i=2}^N \mathbf{P} \sum_{\sigma_i = \pm} | \sigma_i \rangle \langle \sigma_i | \right) \mathbf{P} | \sigma_1 \rangle \\
&= \sum_{\sigma_1 = \pm} \langle \sigma_1 | \mathbf{P} \left(\sum_{\sigma_2 = \pm} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \right) \mathbf{P} \left(\sum_{\sigma_3 = \pm} | \sigma_3 \rangle \langle \sigma_3 | \right) \cdots \mathbf{P} \left(\sum_{\sigma_N = \pm} | \sigma_N \rangle \langle \sigma_N | \right) \mathbf{P} | \sigma_1 \rangle \\
&= \sum_{\sigma_1 = \pm} \langle \sigma_1 | \left(\prod_{i=2}^N \mathbf{P} \right) \mathbf{P} | \sigma_1 \rangle \\
&= \sum_{\sigma_1 = \pm} \langle \sigma_1 | \mathbf{P}^N | \sigma_1 \rangle = \text{tr}(\mathbf{P}^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N
\end{aligned}$$

donde λ_1 y λ_2 son los eigenvalores de la matriz \mathbf{P} , que se hallan de las raíces del polinomio característico

$$P(\lambda) = |\mathbf{P} - \lambda \mathbf{1}|$$

esto es

$$P(\lambda) = \lambda^2 - \text{tr}(\mathbf{P})\lambda + \det(\mathbf{P})$$

con

$$\det(\mathbf{P}) = e^{2K} - e^{-2K} = 2 \sinh(2K)$$

y

$$\text{tr}(\mathbf{P}) = e^K (e^h + e^{-h}) = 2e^K \cosh(h),$$

cuyas raíces son:

$$\begin{aligned}
\lambda_{\pm} &= e^K \cosh(h) \pm \left\{ e^{2K} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2K) \right\}^{1/2} \\
&= e^K \cosh(h) \pm \left\{ e^{-2K} + e^{2K} \sinh^2(h) \right\}^{1/2}
\end{aligned}$$

Puesto que $\lambda_1 > \lambda_2$, tenemos que $(\lambda_2 / \lambda_1)^N \rightarrow 0$ cuando $N \rightarrow \infty$, de donde se sigue que sólo el eigenvalor más grande, λ_1 , es el que determina a las propiedades físicas principales del sistema en el límite termodinámico:

$$\ln Z(K, h) = \ln \left\{ \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \right\} \approx N \ln \lambda_1$$

La energía libre de Helmholtz es [3.6]

$$F(K, h) = -kT \ln Z(K, h) = -NJ - NkT \ln \left\{ \cosh(h) + \left[e^{-4K} + \sinh^2(h) \right]^{1/2} \right\}$$

A partir de esta expresión, se encuentran las demás propiedades termodinámicas del sistema, como la energía interna:

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right) = -NJ - \frac{NkT \sinh(h)}{\sqrt{e^{-4K} + \sinh^2(h)}} + \frac{2NJ e^{-4K}}{\left(\cosh(h) + \sqrt{e^{-4K} + \sinh^2(h)} \right) \sqrt{e^{-4K} + \sinh^2(h)}}$$

y la magnetización

$$M = -\left(\frac{\partial F}{\partial h'}\right)_T = \frac{N\mu \sinh(h)}{\sqrt{e^{-4K} + \sinh^2(h)}}$$

así como el calor específico a campo cero C_0 y la susceptibilidad χ_0 :

$$C_0(T) = NkK^2 \operatorname{sech}^2(K),$$

$$\chi_0(T) = \frac{N\mu^2}{kT} e^{2K}$$

De la expresión para la magnetización se sigue que el modelo de Ising en una dimensión no exhibe una transición de fase a temperaturas finitas puesto que cuando $h' \rightarrow 0$ el parámetro de orden también va a cero. En el caso de que $T \rightarrow 0$ y $h' \rightarrow 0$, se tiene que M puede tomar un valor finito, resultando entonces que sólo en $T = 0$ tenemos una transición de fase. La divergencia de la susceptibilidad cuando $T \rightarrow 0$ es de tipo exponencial, y no una ley de potencias como es típico en otras transiciones de fase. El calor específico a campo cero C_0 alcanza un máximo como función de la temperatura, y se anula cuando $T \rightarrow 0$.

3.5.- El modelo de Ising en dos dimensiones.

En esta sección se mencionan los resultados principales del cálculo originalmente debido a Onsager, [3.4] siguiendo la exposición de la misma presentada por Plischke y Bergersen [3.3], así como la de Pathria [3.1].

La expresión que Onsager obtuvo para la energía libre del modelo de Ising en dimensión $d = 2$ y campo magnético cero es

$$\begin{aligned} \frac{\beta G(T, h=0)}{N} &\equiv \beta g(T, 0) = -\frac{1}{2} \ln(2 \sinh 2K) - \frac{1}{2L} \sum_q \varepsilon(q) \\ &\approx -\frac{1}{2} \ln(2 \sinh 2K) - \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq \varepsilon(q) \end{aligned}$$

donde

$$\cosh \varepsilon(q) = \cosh 2K \cos 2K^* + \cos q \sinh 2K \sinh 2K^*, \quad K = J/kT \quad \text{y} \quad \tanh K^* = \exp(-2K),$$

la expresión anterior se puede reducir a

$$\beta g(T, 0) = -\ln(2 \cosh 2K) - \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\theta \ln \frac{1 + \sqrt{1 - q^2 \sin^2 \theta}}{2}$$

donde, ahora

$$q(K) = \frac{2 \operatorname{senh} 2K}{\cosh^2 2K}$$

A partir de estas expresiones, se halla que la energía interna por espín es

$$u(T) = \frac{\partial \beta g(T)}{\partial \beta} = -J \coth 2K \left[1 + \frac{2}{\pi} (2 \tanh^2 2K - 1) K_1(q) \right],$$

donde

$$K_1(q) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - q^2 \sin^2 \theta}}$$

es la integral elíptica completa del primer tipo.

La energía libre se vuelve no analítica únicamente en el valor tal que $q(K) = 1$, es decir, la temperatura crítica está determinada por la ecuación

$$\frac{2 \sinh 2K_c}{\cosh^2 2K_c} = 1,$$

esto es, $K_c = 2/(\ln(1+\sqrt{2})) \cong 1/2.26918 \propto 1/T_c$.

El resultado para el calor específico es el siguiente:

$$C(T) = \frac{4k}{\pi} (K \coth 2K)^2 \left\{ K_1(q) - E_1(q) - (1 - \tanh^2 2K) \left[\frac{\pi}{2} + (2 \tanh^2 2K - 1) K_1(q) \right] \right\}$$

con

$$E_1(q) = \int_0^{\pi/2} d\theta \sqrt{1 - q^2 \sinh^2 \theta}$$

y su comportamiento crítico es, entonces:

$$\frac{C(T)}{k} \approx -\frac{2}{\pi} (2K) \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| + \text{const.}$$

A diferencia de la discontinuidad de salto predicha por la teoría de campo medio, el comportamiento del calor específico es tal que se presenta una divergencia del mismo en el punto crítico. El exponente crítico asociado al calor específico resulta ser entonces $\alpha = 0$, correspondiente a una divergencia logarítmica.

La magnetización es [3.4]:

$$M_0(T) = -\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial g(T, h)}{\partial h} = \begin{cases} \left[1 - \frac{(1 - \tanh^2 K)^4}{16 \tanh^4 K} \right]^{1/8} & T < T_c, \\ 0 & T > T_c, \end{cases}$$

con comportamiento crítico:

$$M_0(T) \approx (T - T_c)^{1/8}$$

resultando que el exponente $\beta = 1/8$, en contraste a la predicción de campo medio $\beta = 1/2$. La susceptibilidad a campo cero es [3.5]:

$$\chi(T,0) = -\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial M(T,h)}{\partial h} \approx |T - T_c|^{-\gamma}.$$

La predicción que hace Landau para el exponente de la susceptibilidad es $\gamma = 1$.

CAPITULO 4. - MECANICA ESTADISTICA DEL MODELO XY.

4.1. - Introducción.

En el modelo XY, el número de grados de libertad de las variables de espín es $D = 2$, de forma tal que estos pueden orientarse hacia cualquier dirección sobre un plano. El Hamiltoniano para este modelo, en ausencia de un campo magnético externo y tomando en cuenta únicamente interacciones a primeros vecinos toma la forma

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y.$$

Existe un teorema debido a Mermin y Wagner [4.1] que, bajo condiciones bastante generales, restringe los casos en los que se puede presentar un orden de largo alcance en sistemas de espines. Haciendo uso de la desigualdad de Bogolyubov, estos autores demostraron que se satisface la relación

$$\langle M \rangle^2 \leq C \frac{\omega}{kT} \frac{1}{\ln \left(1 + \frac{\omega}{|hM|} \right)},$$

donde M denota a la magnetización

$$M = \mu \sum_i S_i^z,$$

h al campo magnético aplicado, $\omega = \sum_{\mathbf{R}} S(\mathbf{R}) k_0^2 R^2 |J(\mathbf{R})|$ y C es una constante. De este resultado se sigue que la magnetización debe anularse en el límite $h \rightarrow 0$.

En tres dimensiones, el modelo XY da lugar a una transición de fase que separa a una fase de temperatura baja y ordenada, de otra fase desordenada a temperatura alta, de manera semejante a como ocurre en los modelos tridimensionales de Ising y Heisenberg. En este caso, y debido a la forma del Hamiltoniano, el parámetro de orden es la componente de la magnetización perpendicular al plano XY. El modelo XY en su versión cuántica difiere de otros modelos en que el parámetro de orden no conmuta con el Hamiltoniano de sistema, lo cual ocasiona que el estado de equilibrio no consiste de todos los espines alineados en el plano XY. [4.2]

En el estudio de sistemas magnéticos pertenecientes a la clase de universalidad del modelo XY, Stanley y Kaplan [4.3] encontraron que expansiones en series de potencias para temperaturas altas indicaban la presencia de una transición de fase, en la cual la susceptibilidad se vuelve infinita conforme se disminuye T . Expansiones a temperaturas bajas obtenidas por Wegner [4.4] y Berezinskií [4.5] dan una magnetización proporcional a una potencia del campo entre cero y uno, e indicaban la posibilidad una transición abrupta entre tal comportamiento y el régimen de temperaturas altas, donde la magnetización es proporcional al campo aplicado. [4.2]

4.2. - Transiciones de fase en sistemas bidimensionales.

M. Kosterlitz y D. J. Thouless propusieron en 1973 una definición muy diferente de orden en sistemas magnéticos del tipo XY, basado en las propiedades globales del sistema más que en el comportamiento de una función de correlación de dos espines. La aparición de tal orden es bastante

general, por ejemplo en un sólido la transición de orden-desorden topológico está asociada con una transición de una respuesta elástica a una fluida cuando se aplica un esfuerzo de corte, en tanto que para un superfluido se asocia a la inestabilidad de las corrientes persistentes.

El modelo plano bidimensional, con frecuencia citado como el modelo XY clásico, está descrito por el Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j)$$

en donde se hace la suposición de que los espines son vectores unitarios clásicos que forman un cierto ángulo ϕ con una dirección fija en el plano. Las configuraciones tales que los espines adyacentes son casi paralelos dan una contribución significativa a la función de partición, permitiendo de esta forma que se desarrollen excitaciones de temperatura baja denominadas *ondas de espín*. La ausencia de un orden de largo alcance en este sistema se debe a la inestabilidad del estado base a las ondas de espín, particularmente a aquellas que presentan una longitud de onda grande, pues para éstas las configuraciones con los espines vecinos casi paralelos tienen una gran probabilidad de ocurrir, dando como resultado una disminución de la energía que favorece tales estados.

La naturaleza de la fase ordenada es tal que se presenta un *orden de corto alcance* que se revela en la presencia de estados meta-estables correspondientes a vórtices que se hallan estrechamente ligados en pares por debajo de alguna temperatura crítica, en tanto que por encima de ésta permanecen libres, caracterizándose la transición por un cambio repentino en la respuesta a un campo magnético aplicado.

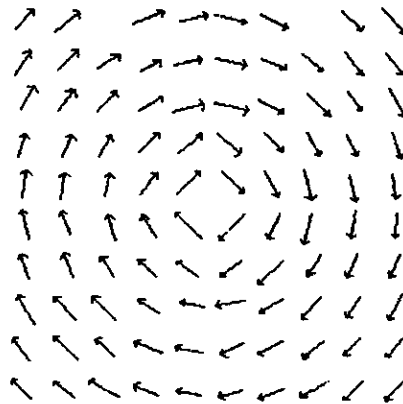


Fig. 4.1. - Configuración de espines en el modelo XY donde se muestra un vórtice de vorticidad positiva.

Puesto que sólo las configuraciones con los espines a primeros vecinos orientados en la misma dirección dan una contribución significativa a la función de partición, es posible realizar un desarrollo perturbativo del Hamiltoniano a segundo orden en los ángulos alrededor de un mínimo local

$$H - E_0 \approx \frac{J}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2 = J \sum_{\mathbf{r}} (\Delta \phi(\mathbf{r}))^2,$$

donde Δ es el operador primera diferencia, $\phi(\mathbf{r})$ es una función definida sobre los sitios del enrejado y la segunda suma es sobre todos los sitios en el enrejado. En la Fig. 4.1 se muestra una configuración que presenta un vórtice para el cual la energía es, según la ecuación anterior

$$H - E_0 \approx \pi J \ln \frac{R}{a},$$

donde R es el radio del sistema.

Una descripción aproximada del sistema consiste en escribir al Hamiltoniano hasta términos cuadráticos en $\Delta \phi(\mathbf{r})$ y dividirlo en términos correspondientes a vórtices y a ondas de espín. Si consideramos la configuración con un vórtice, conforme vamos alrededor de una trayectoria cerrada que contiene al centro de éste, $\phi(\mathbf{r})$ cambiará en 2π cada revolución, de modo tal que

$$\oint \Delta \phi(\mathbf{r}) = 2\pi q, \quad q \in \mathbb{Z}, \quad (4.1)$$

donde q define a la intensidad total de la distribución de vórtices contenidos en el contorno. Como ejemplo, en la Fig. 4.1 se muestra un vórtice con $q = 1$. Sea $\phi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + \varphi(\mathbf{r})$, donde $\varphi(\mathbf{r})$ define a la distribución angular de los espines en la configuración del mínimo local, y $\psi(\mathbf{r})$ es la desviación con respecto a esta. La energía del sistema es

$$H - E_0 \approx J \sum_{\mathbf{r}} (\Delta \psi(\mathbf{r}))^2 + J \sum_{\mathbf{r}} (\Delta \varphi(\mathbf{r}))^2,$$

donde

$$\oint \Delta \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{y} \quad \oint \Delta \varphi(\mathbf{r}) = 2\pi q. \quad (4.2)$$

La configuración de mínima energía absoluta corresponde a $q = 0$, para cualquier contorno posible, pues entonces $\varphi(\mathbf{r})$ es el mismo para todos los sitios del enrejado. De la ecuación (4.1), se observa que, si se elige al contorno de modo que pase sólo a través de 4 sitios, como en la Fig. 4.1, obtendremos la intensidad de un vórtice, el cual podemos pensar localizado en la malla dual, cuyos sitios \mathbf{r}' están en los centro de los cuadrados de la malla original. Este procedimiento permite escribir una función de distribución de vórtices dada por

$$\rho(\mathbf{r}') = \sum_k q_k \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}, \quad (4.3)$$

donde q_k es la intensidad del k -ésimo vórtice centrado en \mathbf{r}'_k y la suma es sobre todos los vórtices del sistema.

Al pasar al límite continuo, la ecuación (4.2) se rescribe (usando (4.3)), como

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) = 2\pi \rho(\mathbf{r}),$$

y la energía está dada en este caso por

$$H - E_0 \approx J \sum_r (\Delta\psi)^2 + 4\pi^2 J \iint d^2r d^2r' \rho(r) g(r-r') \rho(r') + 2\pi J \iint d^2r d^2r' \rho(r) \rho(r') \ln \frac{R}{r_0},$$

donde R es el radio del sistema, r_0 es una longitud de corte (del orden de a) y $g(r)$ es la función de Green de la malla cuadrada, definida de modo que $g(0) = 0$. El último término toma en cuenta el requisito de que la

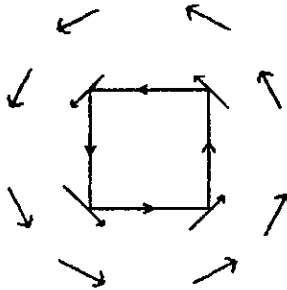


Fig. 4.2. - Localización de los vórtices en la malla dual. La línea continua representa un contorno alrededor del centro de un vórtice.

vorticidad total se anula, y corresponde a la condición de neutralidad eléctrica en el gas de Coulomb equivalente a este modelo de espines XY. El primer término produce las excitaciones de ondas de espín y es el responsable de la destrucción del orden de largo alcance, y el segundo término es la energía de interacción de los vórtices, el cual ocasiona la transición de fase.

La contribución de los vórtices a la energía de la configuración E_v es:

$$E_v \approx -2\pi J \sum_{i \neq j} q_i q_j \ln \left| \frac{r_i - r_j}{r_0} \right|, \quad \text{para } |r_i - r_j| \gg a,$$

donde q_i es la intensidad del i -ésimo vórtice cuyo centro se localiza en r_i . Spitzer demostró [4.6] que esta expresión asintótica es una estimación muy buena aún si $|r| \sim a$, de modo que se usará para todo $|r| > a$. La expresión final para la energía E_v debida a los vórtices es

$$E_v = -2\pi J \sum_{i \neq j} q_i q_j \ln \left| \frac{r_i - r_j}{r_0} \right| - 2\pi J \sum_{\mu} q_{\mu}^2 \ln \frac{r_0}{a}, \quad |r_i - r_j| > a.$$

El potencial químico μ de un solo vórtice de intensidad unitaria es [4.6]

$$\mu = -2\pi J \ln \frac{r_0}{a} = 2\pi J \left(\gamma + \frac{3}{2} \ln 2 \right)$$

donde γ es la constante de Euler. La suma es sobre $2n$ vórtices (n pares) a campo cero.

4.3. - Propiedades críticas del modelo XY.

El estudio en la región crítica del modelo lo desarrolló Kosterlitz en 1974 usando la técnica del grupo de renormalización. A continuación se exponen las líneas generales de su desarrollo.

(a).- Ecuaciones de escalamiento.

Mediante un escalamiento del tamaño de la malla $a \rightarrow a + da$, Kosterlitz mostró que la función de partición se recupera en cuanto a forma funcional, con los parámetros de interacción βq^2 , Ka^2 escalados. Aquí $\beta = 1/kT$, q es la vorticidad, $Ka^2 = e^{-\beta\mu}$ y μ es el potencial químico de los vórtices. Las ecuaciones deducidas para el escalamiento son [4.7]

$$\beta q^2 \rightarrow (\beta q^2)' = \beta q^2 \left\{ 1 - 4\pi^2 \beta q^2 (Ka^2)' \frac{da}{a} \right\}$$

y

mientras que la energía libre por unidad de área es

$$dF = 2\pi K^2 a da.$$

Existe una solución correspondiente a un punto fijo en $Ka^2 = 0$ y $\beta q^2 - 2 = 0$ que señala la existencia de una transición de fase. Las ecuaciones que resultan de linealizar al sistema alrededor del punto fijo son

$$\frac{dx}{da} = -\frac{y^2}{a},$$

$$\frac{dy^2}{da} = -\frac{2xy^2}{a},$$

y

$$\frac{dF}{da} = \frac{y^2}{8\pi a^3}$$

donde

$$x = \beta q^2 - 2 = 2(\pi\beta l - 1), \quad y = 4\pi K^2 a.$$

Las soluciones de este sistema fueron estudiadas por Anderson et. al. [4.8] y son:

$$x^2 - y^2 = x_0^2. \quad (4.4)$$

Las trayectorias asociadas a la ecuación anterior se muestran en la figura 4.3, donde se tomo en cuenta que $x_0^2 = -Ct$, con $C \cong 2.1$ para el modelo XY y $t = (T - T_c)/T_c$. [4.7]

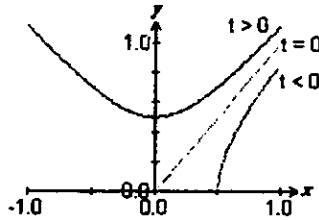


Fig. 4.3.- Trayectorias de la ecuación (4.4) para distintos valores de t . [4.7]

La temperatura crítica se encuentra al hacer $x_0^2 = 0$, de modo que

$$\pi\beta J - 1 = 2\pi K a^2 = 2\pi e^{-x^2/\beta}.$$

Las soluciones para x , y [4.9] son tales que, por debajo de T_c , tanto x como y son positivos para todo a , de modo que, usando las ecuaciones (4.4) y (4.5) tenemos, para a grande

$$x(a) \approx x_0 \frac{1 + \{a/a_1\}^{2x_0}}{1 - \{a/a_1\}^{2x_0}},$$

en tanto que, cuando $x_0 = 0$ tenemos

$$x(a) \approx \frac{1}{\ln(a/a_1)}.$$

Se obtiene un comportamiento similar para $y(a)$. En la figura 4.4 se muestra la dependencia de x , y con a .

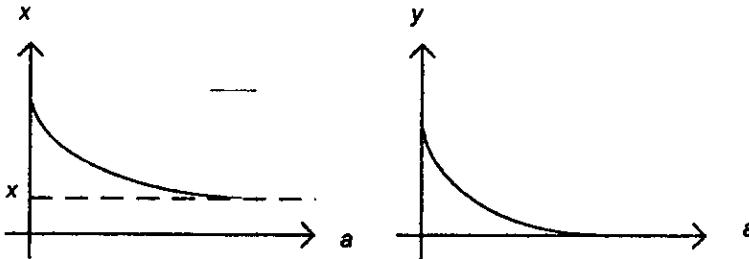


Fig. 4.4.- Factores renormalizados como función del tamaño de la malla a .

La interpretación de estas ecuaciones, dada originalmente por Kosterlitz y Thouless, es la siguiente: cuando $a \rightarrow \infty$ los vórtices del sistema se eliminan de la descripción, pues la energía requerida para su formación (el potencial químico) tiende a infinito, de modo que no existen vórtices presentes. Dado que esto ocurre únicamente en el límite en que $a \rightarrow \infty$, resulta que si la longitud de correlación ξ se identifica con el valor máximo de a para el cual se hacen significativas las desviaciones con respecto al punto fijo, tendremos que:

$$\xi = \infty, \quad \text{para } t < 0.$$

La correlación entre espines está determinada por las ondas de espín y los vórtices. Por debajo de T_c , los vórtices se encuentran preferentemente apareados y con vorticidades que se cancelan. El efecto de

un par en un espín distante es muy pequeño, puesto que se cancelan uno al otro. Aún si $T \rightarrow T_c^-$, los componentes del par permanecen cercanos uno al otro, de modo que su efecto sobre la correlación entre espines distantes es el mismo que el de pares de vórtices, el cual es muy pequeño, de modo que la correlación queda determinada por las ondas de espín, de lo cual se sigue una longitud de correlación infinita.

Para $t > 0$, haciendo $x_0 = iy_0$, y_0 real y $y_0^2 = Ct$, se tiene que la solución de las ecuaciones de escalamiento es:

$$\frac{a}{a_t} = \exp\left\{\frac{1}{y_0} \left(\tan^{-1} \frac{y_0}{x} - \tan^{-1} \frac{y_0}{x_t} \right)\right\}.$$

Si $a \gg 1$, la solución toma la forma

$$\frac{a}{a_t} \approx \exp\left(\frac{\pi}{y_0}\right) \exp\left\{-\left(\frac{1}{|x_{max}|} + \frac{1}{x_t}\right)\right\},$$

donde $|x_{max}| \gg y_0$ es el valor de x a partir del cual se hacen importantes las desviaciones con respecto al comportamiento en el punto fijo. La estimación para la longitud de correlación en este tratamiento es [4.7]:

$$\xi \approx y_0 \exp\left(\frac{\pi}{y_0}\right) \approx \exp(bt^{-1/2}),$$

con el resultado de que el exponente ν definido por $\xi \approx t^{-\nu}$ no existe.

(b).- La función de correlación de dos puntos.

La evaluación de la función de correlación se ve facilitada por el hecho de que el Hamiltoniano se puede escribir como la suma de dos términos, uno de los cuales contiene a las variables de espín y el otro las de los vórtices.

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}-\mathbf{r}') &= \langle \cos(\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r}')) \rangle = \langle \cos(\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r}')) \rangle \langle \cos(\psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}')) \rangle \\ &= g_v(\mathbf{r}-\mathbf{r}') g_s(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \end{aligned}$$

Dado que H es cuadrático en ψ , el promedio sobre ψ da [4.5]

$$g_s(\mathbf{r}) \approx \left| \frac{r}{a} \right|^{-\frac{kr}{4\pi}},$$

en tanto que la evaluación de la parte asociada a los vórtices da como resultado [4.7]

$$g_v(\mathbf{r}) = \exp\left\{-\frac{1}{8} \int_a^r \frac{da}{a} y^2 \log \frac{r}{a}\right\},$$

de modo que, a primer orden en x_t , la función de correlación total a $t = 0$ es

$$g(r) \sim r^{-\frac{1}{4}}.$$

La contribución de los ondas de espín al exponente de la función de correlación es $\eta = kT_c / 4\pi J$. En el caso en que no interactúan los vórtices, se tiene el resultado $\eta = kT_c / 4\pi J$, en tanto que cuando se toman en cuenta las interacciones entre los vórtices, por un lado se tiene que se reduce la temperatura crítica y por otro, el valor de η se ve modificado de forma tal que se reproduce el resultado $\eta = 1/4$. El resultado para la susceptibilidad magnética que se concluye de lo anterior es, a partir del teorema de la disipación-fluctuación:

$$\chi \sim \int d^2r g(r) = \infty, \quad t < 0.$$

CAPÍTULO 5. - DILUCIÓN MAGNÉTICA

5.1. - Características cualitativas de la dilución magnética: recocido ("annealed") y templado ("quenched").

Un magneto diluido consiste en un sistema magnético diluido con constituyentes no magnéticos. El caso más sencillo de imaginar consiste en la dilución sustitucional con fórmula $A_p B_{1-p} C$ donde átomos no magnéticos del tipo B reemplazan parcialmente a átomos magnéticos del tipo A hasta una concentración p . Otro ejemplo lo constituye el magneto mezclado, donde tanto A como B son átomos magnéticos. [5.1]

El Hamiltoniano para un sistema de espines localizados con dilución de sitio se escribe en la forma

$$H_s = -\sum S_i \cdot J \cdot S_j \eta_i,$$

donde S_i es el vector de espín en el sitio i , y η_i son variables de desorden de sitio no correlacionadas que toman los valores 0, 1 y tales que

$$\langle \eta_i \rangle = p,$$

donde p es la concentración magnética. La constante de intercambio J especifica el tipo de sistema, siendo común trabajar con los denominados "modelos de espín de n -componentes" ($n = 1$ corresponde al modelo de Ising, $n = 2$ al XY y $n = 3$ al de Heisenberg).

Se dice que el desorden geométrico es de templado (en inglés "quenched") cuando los promedios configuracionales son independientes de los promedios térmicos (y determinados por una distribución distinta $P(\eta_i)$). En el caso canónico

$$P(\eta_i) = (1-p)\delta(\eta_i) + p\delta(\eta_i - 1)$$

El desorden de sitio de tipo recocido (en inglés "annealed") se presenta cuando los promedios de en las variables de desorden $\{\eta_i\}$, así como en las de espín $\{S_i\}$ se efectúan con el factor de Gibbs

$$\rho \propto \exp\left[-\beta(H_s - \mu \sum \eta_i)\right]$$

donde $\beta=1/kT$, y el potencial químico μ es tal que el promedio de cada η_i es igual a la concentración p . En este caso, las variables de desorden en sitios diferentes no son independientes.

Una distinción más consiste en la dilución de sitio ó de enlace. En los sistemas con dilución de enlace la forma típica del Hamiltoniano es

$$H_s = -\sum S_i \cdot J \cdot S_j \eta_{ij},$$

donde las variables de desorden η_{ij} se asocian con los enlaces (acoplamientos de intercambio). En la figura 5.1 se muestra esquemáticamente la configuración de sistemas diluidos con una variable de desorden η igual a cero para los casos de dilución de enlace y de sitio.

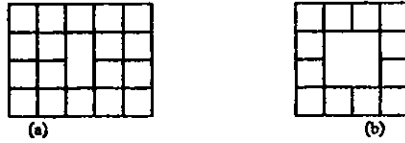


Fig. 5.1.- Sistemas diluidos (a) enlace. (b) sitio con un defecto estructural.

5.2.- Desorden geométrico y percolación.

Los magnetos diluidos templados y los diluidos con remoción de enlace recocido exhiben fenómenos percolativos lo que los distingue de los magnéticos diluidos recocidos con remoción de sitio, caracterizados por efectos de agregación.

La transición de percolación es una transición puramente geométrica que se origina de los aspectos configuracionales causados por la dilución, y ocurre en cualquier sistema diluido templado con interacciones de corto alcance. El caso de un magneto con dilución de enlace de tipo templado puede ilustrarse en la Fig. 5.2 si estimamos cada enlace mostrado como una interacción de intercambio que acopla a los espines. Así, en la situación (b) donde $p < p_c$, sólo existen cúmulos finitos de espines; mientras que un cúmulo infinito puede proporcionar orden magnético de largo alcance a temperaturas suficientemente bajas. Una idea intuitiva para entender a estos sistemas diluidos

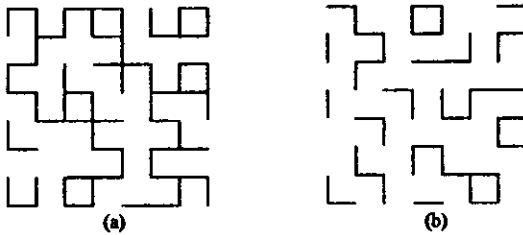


Fig.5.2.- Malla cuadrada con dilución de enlace: (a) cúmulos finitos e infinito ($p > p_c$) (b) solo cúmulos finitos ($p < p_c$).

consiste en pensar que la temperatura de transición $T_c(p)$ caerá con la disminución de la concentración magnética a partir del valor puro $T_c(1)$ hasta cero en la concentración crítica $p = p_c$, como se muestra esquemáticamente en el diagrama de fase de la Fig. 5.3. Los experimentos confirman tal imagen. En ferromagnetos de Ising con dilución de sitio la magnetización y susceptibilidad a temperatura cero son directamente proporcionales a las cantidades percolativas P_∞ y S , respectivamente.

La temperatura de transición para sistemas diluidos de Heisenberg y XY tridimensionales templados es cero por debajo de la concentración de percolación, mientras que por arriba de ésta el cúmulo percolativo tiene la característica importante de que se vuelve cada vez más ramificado conforme $p \rightarrow p_c$ [5.2] y esto afecta la forma en la cual $T_c(p) \rightarrow 0$ conforme $p \rightarrow p_c$. No obstante, la principal diferencia entre los comportamientos de los modelos de Heisenberg, XY e Ising se debe a la naturaleza distinta de las excitaciones subyacentes en estos modelos. En los sistemas bidimensionales de Heisenberg y XY no existe un orden de largo alcance a ninguna temperatura finita, aún cuando ocurre la transición KT

para el modelo XY hacia un estado con longitud de correlación infinita en el estado puro (sin dilución), mientras que en el

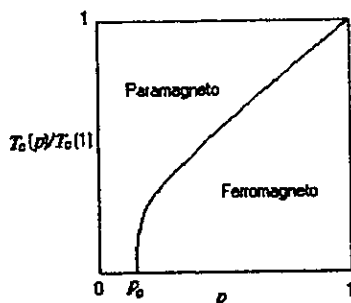


Fig. 5.3.- Diagrama esquemático para un ferromagneto de Ising con dilución de sitio "templados". $T_c(p)/T_c(1)$ es la temperatura de transición reducida, p es la concentración magnética y p_c es la concentración de percolación.

caso diluido la temperatura de esta transición cae a cero a la misma concentración p_c que causa la anulación de la temperatura de transición en el sistema de Ising en la misma malla.

La concentración de percolación p_c juega un rol importante en los magnetos diluidos. El valor de p_c depende de cómo se diluya la malla, del rango de las interacciones de intercambio (nn, nnn, etc.) y de si la dilución es de sitio o de enlace. Las mallas más coordinadas tienen valores menores de p_c puesto que se requiere remover un número mayor de enlaces para que desaparezca el cúmulo infinito. La tabla 5.1 da referencia de las concentraciones de percolación de sitio y de enlace para varias mallas [5.3-4].

Los magnetos con dilución de sitio recocido no muestran efectos percolativos, debido a que el desorden configuracional, dado por una distribución de Gibbs, favorece energéticamente que los η_i distintos de cero se agrupen: en el ejemplo del ferromagneto con interacciones a primeros vecinos el estado de mínima energía para una concentración específica p se obtiene al tener tantos enlaces distintos de cero como sea posible, y todos los espines que aquellos ligan paralelos. El número de enlaces distintos de cero se maximiza si cada lugar ocupado tiene como vecinos primeros a tantos otros lugares ocupados como sea posible. Esto se ilustra en la figura 5.4, donde se muestra una configuración óptima (a), y dos configuraciones menos favorables, (b) y (c) las cuales son menos compactas y una de ellas (c) disconexa. La agregación de sitios ocupados produce un cúmulo infinito en el límite de sistemas grandes (infinito) para cualquier p distinta de cero, mostrando esencialmente todas las propiedades del sistema puro a temperaturas muy bajas. A temperaturas altas la probabilidad de configuraciones energéticamente desfavorables se incrementa y permite que éstas jueguen un rol, originando así efectos de cúmulo finito. Para el caso recocido

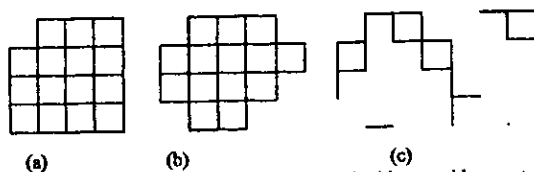


Fig. 5.4.- Agregación de enlaces en el magneto con dilución de sitio recocido para temperaturas bajas.

TABLA 5.1.- concentraciones críticas para percolación de enlace p_c^b y de sitio p_c^s . z es el número de coordinación.

Malla	Interacciones a vecinos	z	p_c^b	p_c^s
Lineal	1	2	1	1
Hexagonal	1	3	0.6527	0.70
Cuadrada	1	4	0.5000	0.59
Triangular	1	6	0.3473	0.5
Cuadrada	1,2	8		0.41
Triangular	1,2	12		0.295
Hexagonal	1,2,3	12		0.300
Cuadrada	1,2,3	12		0.292
Triangular	1,2,3	18		0.225
Diamante	1	4	0.388	0.43
s. c.	1	6	0.247	0.31
b. c. c.	1	8	0.178	0.243
f. c. c.	1	12	0.119	0.195
s. c.	1,2	18		0.137
b. c. c.	1,2	14		0.175
f. c. c.	1,2	18		0.136
s. c.	1,2,3	26		0.097
b. c. c.	1,2,3	26		0.095
f. c. c.	1,2,3	42		0.061

5.3.- Efectos térmicos, percolativos y cruzamiento en magnetos diluidos templados.

El diagrama de fase correspondiente al caso del modelo de Heisenberg tridimensional con dilución de sitio se muestra esquemáticamente en la Fig. 5.5. Se espera una frontera de fases para el correspondiente modelo XY diluido. En todos los casos, se espera que ocurra la misma concentración límite y que las curvas sean lineales para p cerca de 1. La diferencia más significativa es la aproximación de $T_c(p)$ a cero:

$$\begin{aligned}
 T_c(p) &\propto (p - p_c)^{1/\phi_h}, & \text{Heisenberg, } d = 3, \\
 T_c(p) &\propto (p - p_c)^{1/\phi_{XY}}, & \text{XY, } d = 3, \\
 \exp[-2J/kT_c(p)] &\propto (p - p_c)^{1/\phi_I}, & \text{Ising, } d = 2, 3.
 \end{aligned}$$

Estas ecuaciones definen a los exponentes de cruzamiento ϕ_h , ϕ_{XY} , ϕ_I .

La dependencia de la temperatura de transición con la concentración está relacionada con la dependencia de la longitud de correlación con la temperatura y concentración. Esta longitud de correlación

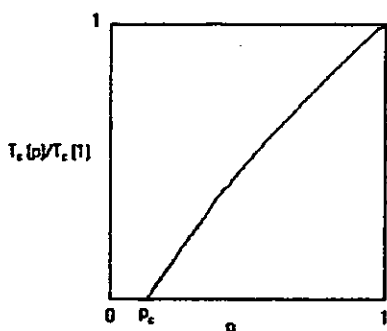


Fig. 5.5.- Diagrama de fases esquemático para el magneto diluido de Heisenberg.

es muy importantes para entender a los magnetos diluidos (particularmente sus propiedades críticas) y sus características principales son las siguientes.

Debido a que la transición de fase en sistemas magnéticos diluidos es de segundo orden, la longitud de correlación diverge en cada punto de la frontera de fases mostrada en las figuras 5.3 y 5.5. En $p = 1$, esta divergencia está asociada al comportamiento crítico del magneto puro. A $T = 0$, la divergencia se realiza al pasar p por el valor p_c , de modo que la cantidad que diverge es la longitud de correlación del problema percolativo, asociada a la aparición de un cúmulo infinito de espines conexos: a $T = 0$ todos los espines conexos, i. e. pertenecientes al mismo cúmulo, son paralelos (caso ferro) y la función de correlación se reduce a la que describe solo a las variables configuracionales del problema de percolación.

Una serie de experimentos [5.5-6] encabezados por Birgeneau y Cowley muestran que el comportamiento de la longitud de correlación se incrementa al disminuir la temperatura si $p < p_c$ (i). En $p = p_c$ (línea (ii) en la figura 5.6) la longitud de correlación se incrementa y diverge justo a $T = 0$. Si $p > p_c$ (iii) la longitud de correlación diverge a $T_c(p)$. Estas observaciones se muestran esquemáticamente en la gráfica de longitud de correlación inversa vs. temperatura de la figura 5.7.

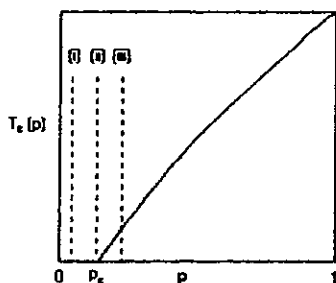


Fig. 5.6.- Diagrama esquemático para el modelo de Heisenberg diluido, donde se muestran trayectorias típicas a lo largo de las cuales se pueden realizar mediciones experimentales.

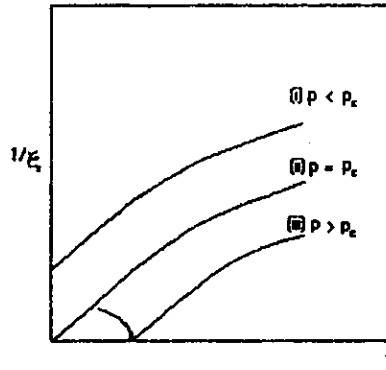


Fig. 5.7.- Dependencia de la longitud de correlación inversa con la temperatura para un magneto diluido de Heisenberg (i) por debajo (ii) en y (iii) por encima del umbral de percolación.

Las intersecciones al eje en $T = 0$ corresponden a la contribución a $1/\xi_p$ debida a la percolación, la cual para $p \cong p_c$ es

$$1/\xi = 1/\xi_p \propto |p - p_c|^\nu, \quad T = 0. \quad (5.1)$$

El comportamiento esquemático mostrado en la Fig. 5.7 se aplica también el caso de sistemas diluidos XY, con un comportamiento en $p = p_c$ que, caracterizado por distintos exponentes, sigue una ley

$$1/\xi \propto T^\nu, \quad p = p_c,$$

resultado que no se aplica para el caso de sistemas de Ising ó eje fácil, donde ocurre la tradicional dependencia

$$1/\xi \propto (\exp[-2J/kT])^\nu, \quad p = p_c$$

Así, para un sistema de Ising, la dependencia de la longitud de correlación con la temperatura se muestra esquemáticamente en la Fig. 5.8, donde la diferencia esencial con respecto a otros sistemas es el comportamiento cerca del origen: la aproximación de la longitud de correlación inversa a su valor en $T = 0$ es mucho más rápida y se relaciona con una pendiente infinita de la curva $T_c(p)$ vs. p en $p = p_c$, para el caso de Ising.

Un argumento de cruzamiento permite establecer una relación entre ϕ y ν para los distintos sistemas considerados aquí: las modificaciones al Hamiltoniano introducidas por el campo aleatorio g asociado a las variables de desorden geométrico son tales que se modifica el comportamiento de la longitud de correlación inicial (sistema puro)

$$\xi \propto t^{-\nu}$$

de modo que

$$\xi \propto t^{-\nu} f(g t^{-\phi}) \quad (5.2)$$

donde ϕ es el exponente de cruzamiento para el campo g . Así, el campo g influye sobre ξ sólo cuando es del orden de t^ϕ , definiendo un rango característico de temperatura.

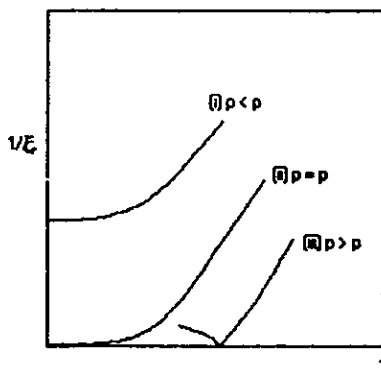


Fig. 5.8.- Longitud de correlación inversa para el modelo de Ising diluido para varias concentraciones cercanas al umbral de percolación.

$$\xi \sim g^{1/\nu_c}. \quad (5.3)$$

En el caso de sistemas diluidos, el campo g está asociado a la aleatoriedad geométrica,

$$g \propto (p - p_c).$$

Así, partiendo del comportamiento de la longitud de correlación, se deduce el de la temperatura crítica como función de p , obteniéndose el resultado de que la relación entre los exponentes de cruzamiento y los de la longitud de correlación es:

$$\phi_H = \nu_i^H / \nu_p,$$

$$\phi_{XY} = \nu_i^{XY} / \nu_p,$$

$$\phi_I = \nu_i^I / \nu_p,$$

(lo que se requiere si (5.2) se reduce a (5.1) cuando $g \rightarrow \infty$).

5.4.- Comportamiento crítico de sistemas magnéticos desordenados.

En principio, los exponentes ν_i^H , ν_i^{XY} , ν_i^I , que caracterizan al comportamiento térmico de los magnetos diluidos en el umbral de percolación no son iguales a los exponentes asociados a la longitud de correlación ν^H , ν^{XY} , ν^I en los magnetos puros correspondientes.

Harris [5.7] presentó un argumento heurístico que indica que, para concentraciones pequeñas de defectos, si el exponente del calor específico α es negativo entonces la transición en el sistema diluido es tal que el exponente $\nu(p)$ es igual al del sistema puro ν . Harris consideró la modificación al comportamiento crítico "puro" causado por la adición de un campo aleatorio pequeño g . Si el sistema puro se divide en partes cuya dimensión lineal es la longitud de correlación ξ , cada parte tendrá una temperatura de transición y el conjunto presentará una varianza Δt_g en temperatura de transición dada por

$$\Delta t_g \equiv (\delta g)^{1/\alpha}.$$

5.5.- Resultados exactos para los modelos templados.

(a) Generalidades.

Griffiths y Lebowitz [5.9] establecieron teoremas de existencia y analiticidad para el caso de dilución de sitio; mostraron en particular que para interacciones de rango finito existe una energía libre por sitio y que esta es una función continua de la concentración p con las propiedades usuales de convexidad; siendo analítica en p y H (H es el campo magnético externo) para el caso de Ising con interacciones ferromagnéticas para $H \neq 0$ y $0 \leq p \leq 1$. También indicaron, sin demostrar, que (a) existen las funciones de correlación y son analíticas para $H \neq 0$ y $0 \leq p \leq 1$; (b) la magnetización espontánea es una función monótona de $1/T$, p y H , de donde $T_c(p)$ es una función monótona creciente de p ; (c) para interacciones nn, la concentración a la que ocurre la magnetización espontánea a $T = 0$ es mayor que o igual a la concentración crítica p_c para percolación de sitio; (d) $T_c(p) \leq pT_0$, donde T_0 es la temperatura crítica que resulta de la teoría de campo medio para el sistema puro.

Otro resultado desarrollado por Griffiths [5.10] es que, para interacciones nn y $0 \leq p \leq 1$, la magnetización espontánea no es una función analítica de H en $H = 0$ para ninguna temperatura por debajo de la temperatura crítica del sistema puro. Estas singularidades en el caso de la malla de Bethe, fueron estudiadas por Harris [5.11] y Young [5.12]. Schwartz mostró que, para p menor que algún valor finito p' , la energía libre es diferenciable a todos los órdenes en H , de modo que la magnetización es no analítica pero diferenciable a todos los órdenes en H para $p < p'$ y la singularidad es esencial (serie de Taylor con radio de convergencia cero).

(b) Modelo de Ising diluido.

El tratamiento perturbativo del sistema desarrollado por Osawa y Sawada [5.13], Harris [5.7] y otros muestra que se puede estimar, a primer orden en $1 - p$, el cambio fraccional en la temperatura de transición

$$S = \frac{1}{T_c(p)} \frac{dT_c(p)}{dp} \Big|_{p=1}$$

La suposición básica consiste en que el calor específico puede escribirse como

$$C(p) = A(p) [T - T_c(p)]^{-\alpha(p)}$$

donde $A(p)$, $T_c(p)$ y $\alpha(p)$ son funciones razonablemente bien comportadas para $p < 1$.

El resultado para la pendiente límite en el caso del modelo de Ising de espín $1/2$ con interacciones a primeros vecinos donde la impureza es un enlace de intensidad λJ es

$$S = \frac{1}{k_c} [(\sigma_0 \sigma_1)_c + \coth K_c(\lambda - 1)]^{-1};$$

donde $\langle \sigma_0 \sigma_1 \rangle_c$ es la función de correlación a primeros vecinos para la malla pura en su punto crítico y $K_c = J/kT_c$. Los valores de estas pendientes se presentan en la tabla 5.3.

Tabla 5.3.- Pendientes límite para el modelo de Ising diluido templado.

Malla	Dilución de enlace	Dilución de sitio
Cuadrada	1.329	1.565
Hexagonal	1.578	1.754

Otros estudios [5.14-15] se centraron en el problema de la pendiente límite para el enrejado cuadrado diluido de Ising mediante el modelo de vacancias en una supermalla de tamaño variable, encontrando que el calor específico diverge logarítmicamente y que tiene, para concentraciones pequeñas de defectos, la forma

$$C = A(x) \ln\{[T - T_c(x)]/T_c(0)\}$$

$$A(x) = A_0 - C_0^2 x \ln x - A_2(n/m)x + O(x^2 \ln^2 x)$$

en una malla de dimensión $n \times m$, y $x = 1 - p$. Este resultado implica que, para $p \ll 1$, la singularidad del calor específico es la misma que la del magneto puro en el caso del modelo de Ising bidimensional.

Bergstresser et. al. [5.16] dio cotas máximas y mínimas para $T_c(p)$ para el caso de dilución de enlace en el modelo de Ising, al considerar el cambio en las propiedades termodinámicas* o en las funciones de correlación causado por la remoción de un enlace en el sistema, y mediante el uso de las desigualdades de Griffiths [5.17], las cuales también pueden usarse para obtener cotas en $T_c(p)$, encontrándose que el comportamiento asintótico en el régimen percolativo, $p \geq p_c$ es

$$\frac{kT_c(p)}{2J} \rightarrow \frac{1}{\ln[1/(p - p_c)]}$$

de donde se sigue que $\phi = 1$, valor que es apoyado por otros estudios que se basan en la teoría del grupo de renormalización, así como por los resultados de Domany y Nishimori, [5.18-19] quienes haciendo uso de un método que combina réplica con dualidad obtuvieron una generalización del resultado anterior

$$\exp\left(-\frac{2J}{kT_c(p)}\right) = \left(\frac{p - p_c}{p_c}\right) \ln 2 + O(p - p_c)^2.$$

5.6.- Resultados de Monte Carlo.

La simulación de los sistemas diluidos con desorden localizado se logra con la ocupación aleatoria de sitios (enlaces) a una probabilidad p , mediante la comparación de números aleatorios con la concentración de espines p .

La técnica Monte Carlo es particularmente útil para el cómputo de diagramas de fase y propiedades termodinámicas como la magnetización, calor específico, susceptibilidad, etc. Puede usarse para la determinación de exponentes críticos al combinarse con métodos de escalamiento a tamaño finito [5.20] para extraer el comportamiento crítica adecuado a partir de las singularidades redondeadas debidas al tamaño finito de los sistemas simulados. A continuación se presentan resultados de simulaciones MC

* En este contexto, "termodinámicas" se refiere a que los efectos de frontera o superficiales no influyen en las propiedades en cuestión, en inglés se emplea la palabra *bulk* para tal efecto.

para la frontera de fases y propiedades termodinámicas de sistemas desordenados con dilución de tipo templado.

Uno de los primeros trabajos en este sentido fue el realizado por Wildpaner [5.21] en un modelo de Heisenberg clásico cúbico con un solo defecto, a partir del cual obtuvo la pendiente límite de la curva crítica:

$$\left. \frac{1}{T_c} \frac{dT_c}{dp} \right|_{p=1} = 1.3 \pm 0.2.$$

En cuanto a las propiedades estáticas autores como Ching y Huber [5.22], Stoll y Schneider [5.23] realizaron estudios en el modelo de Ising bidimensional con dilución de sitio, donde se calculó la magnetización, el calor específico, la energía interna, y la susceptibilidad. Estas simulaciones mostraron que el pico del calor específico es significativamente reducido por la dilución, determinaron la temperatura de transición y el exponente de la longitud de correlación a partir de la posición del pico mediante el uso de escalamiento a tamaño finito, según el cual [5.20,24] la dependencia de T_c con el tamaño de la muestra L debe ser de la forma

$$T_c(\infty) - T_c(L) \propto L^{1/\nu(\rho)}.$$

Usando esta expresión, Ching y Huber [5.22] encontraron $T_c(\rho)$ para el modelo de Ising en la malla triangular con dilución de sitio para varias concentraciones mayores a 0.7. La pendiente límite que calcularon fue

$$\left. \frac{1}{T_c} \frac{dT_c}{dp} \right|_{p=1} = 1.47 \pm 0.02.$$

Landau [5.25] estudió el caso tridimensional para malla cúbica simple con dilución de sitio. En la región estudiada, ($p \geq 0.7$) la pendiente límite que encontró fue

$$\left. \frac{1}{T_c} \frac{dT_c}{dp} \right|_{p=1} = 1.09 \pm 0.03.$$

En estas investigaciones, no se encontró ninguna variación de los exponentes críticos con respecto a los valores del sistema puro, lo cual concuerda con lo esperado a partir los resultados de Fisher y Au-Yang; para el caso tridimensional, el comportamiento crítico nuevo esperado no se revela debido a que el ancho de la región crítica esta más allá de la precisión lograda con simulaciones Monte Carlo.

Stauffer [5.26] aplicó la técnica MC para obtener el frenado crítico (en inglés "critical slowing down") en el umbral de percolación para el ferromagneto de Ising diluido, usando un modelo de gata.

5.7.- Investigaciones con expansiones en series.

Domb [5.27], señaló que el método de expansiones en series para sistemas magnéticos puros proporciona resultados precisos para varias cantidades termodinámicas y, en particular, para el comportamiento crítico cerca de una transición de fase de segundo orden.

Debido a que en el caso de sistemas diluidos hay, al menos, dos variables (concentración y temperatura), se pueden desarrollar expansiones en la concentración a temperatura fija, o expansiones a temperatura alta y concentración fija

$$\chi(T, p) = \sum_{n \geq 0} a_n(T) p^n = \sum_{n \geq 0} b_n(T) w^n$$

donde $w = 1/T \delta \tanh(J/kT)$.

Elliot [5.28], al aplicar el método de expansiones en la concentración, llegó a la conclusión de que la concentración crítica p_c a la cual se observa orden de largo alcance en magnetos con dilución de sitio es la misma en los modelos de Heisenberg e Ising, independiente de la magnitud del espín. Los primeros trabajos realizados en el modelo de Ising diluido templado fueron los realizados por Morgan y Rushbrooke [5.29], Elliot y Heap [5.30-31] con expansiones de la susceptibilidad en potencias de la concentración (dilución de sitio), así como los desarrollos en potencias de $1/T$ y el caso mixto [5.32], atendiendo principalmente al comportamiento de la curva $T_c(p)$. Estos resultados fueron consistentes con la anulación de T_c a una concentración crítica p_c , y sugerían que la aproximación a cero de $T_c(p)$ tiene una tangente vertical. Para $p \cong 1$ se obtuvo una dependencia lineal de T_c con p .

Rapaport [5.33] usó expansiones en series para temperatura alta y concentración en los sistemas de Ising templado con dilución de sitio y los casos templado y recocido de la dilución de enlace para la malla f. c. c., encontrando que las fronteras de fase eran muy similares para los dos casos de dilución de enlace. Junto con Rushbrooke et. al. [5.34] encontró una dependencia anómala del exponente de la susceptibilidad y con la concentración: en el sistema templado de sitio, para p cerca de 1, parecía aumentar rápidamente a partir de su valor puro y divergir a una concentración muy por encima de p_c .

El método de series se ha empleado también para el estudio del diagrama de fase del modelo de Ising bidimensional con mezcla de enlaces ferro y antiferromagnéticos, para los problemas templados y recocidos.[5.35] En este problema, las concentraciones límite p_c parecen depender de la razón de los acoplamientos ferro y antiferro.

El estudio del modelo XY de espín $\frac{1}{2}$ con dilución de sitio (templado y recocido) se realizó originalmente por Reeve et. al. Para el modelo templado en tres dimensiones [5.36], se desarrolló en potencias de p para obtener la frontera de fases, la cual se muestra en la figura 5.9, para mallas f. c. c., b. c. c. y s. c. En la misma figura se muestran, por comparación, los resultados de series para los modelos de Ising y Heisenberg en la malla f. c. c., así como el resultado de campo medio. Para el caso bidimensional, tratado por Reeve [5.37], los resultados proporcionan evidencia de una transición para un rango de concentraciones que incluyen al caso puro.

CAPITULO 6.- MÉTODO MONTE CARLO EN MECÁNICA ESTADÍSTICA.

6.1.- Descripción de la técnica Monte Carlo para sistemas de espines.

Considere un sistema de N partículas clásicas, donde cada partícula está descrita por una variable dinámica α_i y donde las interacciones entre estas partículas están descritas por un Hamiltoniano $H_N(\alpha)$. Denotemos a un punto del espacio fase o configuración del sistema por $\mathbf{x}(\alpha)$, $\alpha = \{\alpha_i\}$. Entonces el valor de expectación de un operador $\langle A \rangle$ calculado en el ensamble canónico es [6.1]:

$$\langle A \rangle = \frac{\int d\mathbf{x} A(\mathbf{x}) \exp\{-H_N(\mathbf{x})/kT\}}{\int d\mathbf{x} \exp\{-H_N(\mathbf{x})/kT\}} \quad (6.1)$$

La idea básica del método de Monte Carlo es evaluar las integrales sobre el espacio de fase numéricamente, mediante la aproximación de éstas por sumas con un número finito de términos. En principio, la elección de los puntos del espacio de fase para tales evaluaciones puede ser aleatoria (lo cual constituye el denominado muestreo simple) [6.2], pero debido a que el integrando $\exp\{-H_N(\mathbf{x})/kT\}$ varía sobre varios órdenes de magnitud para sistemas de muchos cuerpos, tal muestreo simple es ineficiente para propósitos prácticos. El método Monte Carlo introducido por Metropolis et. al. [6.3], se basa en un muestreo inducido ("importance sampling"), en donde la elección de los puntos en el espacio fase no es aleatoria del todo, si no que se eligen en aquellas regiones que dan una contribución principal a las integrales que se desean evaluar. Así, los estados \mathbf{x} se eligen de acuerdo a una densidad de probabilidad

$$P^{eq}(\mathbf{x}_v) d\mathbf{x} = \frac{\exp\{-H_N(\mathbf{x}_v)/kT\} d\mathbf{x}}{\int d\mathbf{x} \exp\{-H_N(\mathbf{x})/kT\}} \quad (6.2)$$

de modo que la estimación Monte Carlo de un promedio $\langle A \rangle$ se reduce a un promedio aritmético:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{v=1}^M A(\mathbf{x}_v), \quad (6.3)$$

donde M es el número total de estados generados en el proceso Monte Carlo.

Originalmente se desconoce a $P^{eq}(\mathbf{x}_v)$, pero es posible realizar una cadena de Markov generando las M configuraciones \mathbf{x}_v de acuerdo a una probabilidad de transición dada $W(\mathbf{x}_v \rightarrow \mathbf{x}_{v'})$. Este proceso se construye de modo que, en el límite $M \rightarrow \infty$, la probabilidad asociada a la configuración \mathbf{x}_v en la cadena de Markov está dada por (6.2).

Las condiciones sobre $W(\mathbf{x}_v \rightarrow \mathbf{x}_{v'})$ que son suficientes para que se tenga esta propiedad asintótica son [6.4]:

1.-Condición de normalización:

$$\sum_{v'} W(\mathbf{x}_v \rightarrow \mathbf{x}_{v'}) = 1 \quad \text{para toda } v. \quad (6.4)$$

2.- Condición de ergodicidad: Si $P^{eq}(\mathbf{x}_v) > 0$ y $P^{eq}(\mathbf{x}_{v'}) > 0$, se requiere que:

$$W(\mathbf{x}_v \rightarrow \mathbf{x}_{v'}) > 0$$

3.-Condición de estado homogéneo:

$$\sum_{\nu} P^{\alpha}(\mathbf{x}_{\nu}) W(\mathbf{x}_{\nu} \rightarrow \mathbf{x}_{\nu}) = P^{\alpha}(\mathbf{x}_{\nu}), \quad \text{para toda } \nu.$$

Estas condiciones no especifican a W de manera única; una elección simple que satisface a la condición 2 es la denominada condición de *balance detallado*:

$$P^{\alpha}(\mathbf{x}_{\nu}) W(\mathbf{x}_{\nu} \rightarrow \mathbf{x}_{\nu}) = P^{\alpha}(\mathbf{x}_{\nu}) W(\mathbf{x}_{\nu} \rightarrow \mathbf{x}_{\nu})$$

Siendo esta una condición adicional, aún no especifica a W . La elección de Metropolis [6.3] consistió en:

$$W(\mathbf{x}_{\nu} \rightarrow \mathbf{x}_{\nu}) = \begin{cases} \exp\left[-\frac{H_N(\mathbf{x}_{\nu}) - H_N(\mathbf{x}_{\nu})}{kT}\right] & \text{si } H_N(\mathbf{x}_{\nu}) > H_N(\mathbf{x}_{\nu}) \\ 1 & \text{otro caso.} \end{cases} \quad (6.5)$$

Un argumento que permite mostrar que esta probabilidad de transición tiene las características asintóticas deseadas es el siguiente: considere un número muy grande de cadenas de Markov. En el paso ν -ésimo de cada cadena tenemos a N_r sistemas en el estado \mathbf{x}_r con energía $H(\mathbf{x}_r)$ y N_s sistemas en el estado \mathbf{x}_s con energía $H(\mathbf{x}_s)$, con $H(\mathbf{x}_r) < H(\mathbf{x}_s)$. La probabilidad a priori para el movimiento $\mathbf{x}_r \rightarrow \mathbf{x}_s$ (esto es, sin la condición (6.5)) es $W_{rs} = W_{sr}$. A partir de estas probabilidades obtenemos razones de transición que satisfacen (6.4) mediante

$$W(\mathbf{x}_r \rightarrow \mathbf{x}_s) = W_{rs} \exp\left[-\frac{H_N(\mathbf{x}_s) - H_N(\mathbf{x}_r)}{kT}\right]$$

y

$$W(\mathbf{x}_s \rightarrow \mathbf{x}_r) = W_{sr} = W_{rs},$$

resultando entonces que el número total de transiciones del estado \mathbf{x}_r al \mathbf{x}_s es

$$N_{r \rightarrow s} = N_r W(\mathbf{x}_r \rightarrow \mathbf{x}_s) = N_r W_{rs} \exp\left[-\frac{H_N(\mathbf{x}_s) - H_N(\mathbf{x}_r)}{kT}\right],$$

y para el proceso inverso

$$N_s W(\mathbf{x}_s \rightarrow \mathbf{x}_r) = N_s W_{rs},$$

de modo que el número neto de transiciones $N_{r \leftrightarrow s}$ es

$$N_{r \leftrightarrow s} = N_r W_{rs} \left\{ \frac{\exp[-H_N(\mathbf{x}_s)/kT]}{\exp[-H_N(\mathbf{x}_r)/kT]} - \frac{N_s}{N_r} \right\}.$$

Si N_s/N_r es menor que la razón de exponenciales, tenemos que $N_{r \leftrightarrow s} > 0$ y N_s/N_r aumenta. Por otro lado, si N_s/N_r es mayor que el valor canónico, $N_{r \leftrightarrow s} < 0$ y N_s/N_r decrece de forma tal que, asintóticamente, el estado estacionario satisface el que N_s/N_r es igual al valor canónico. En vez de considerar muchas cadenas de Markov, podemos considerar segmentos de una sola cadena muy larga, con lo que se justifica la convergencia asintótica hacia la distribución de Boltzmann.

6.2.- Aspectos prácticos del Método.

En la discusión precedente, el ensamble sobre el cual se han realizado los promedios de las cantidades termodinámicas fue el NVT para sistemas de líquidos o NHT para un magneto. El tamaño finito de los sistemas estudiados debe tomarse en cuenta, así como una elección juiciosa de las condiciones de frontera para facilitar la extrapolación de los resultados al límite termodinámico. Mediante el uso de números pseudo-aleatorios se genera un cambio de estado $x_v \rightarrow x_{v'}$. Usualmente este cambio de estado corresponde al cambio en una sola partícula, aunque métodos recientes de actualización de cúmulos han demostrado ser más eficientes, reduciendo considerablemente el tiempo de correlación entre configuraciones sucesivas.

El cálculo del cambio en energía se realiza a partir del Hamiltoniano

$$\delta E = H_N(\alpha_1, \dots, \alpha_i', \dots, \alpha_N) - H_N(\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N).$$

Si $\delta E < 0$, el intento es aceptado como una configuración nueva, mientras que si $\delta E > 0$, se elige un número pseudo-aleatorio ξ entre 0 y 1 y se compara con $\exp\{-\delta E/kT\}$. Si $\xi \leq \exp\{-\delta E/kT\}$ se admite la configuración de prueba, en caso contrario se rechaza. La evaluación de promedios consiste en medias aritméticas, como se señaló anteriormente. La precisión del procedimiento depende de las siguientes consideraciones:

(a).- *Correlaciones entre números pseudo-aleatorios.* Esta fuente de error puede eliminarse si se emplean varias secuencias de números pseudo-aleatorios mezcladas de una manera adecuada [6.5].

(b).- *Influencia de la configuración inicial.* Dada una configuración inicial a una cierta temperatura, en general tendremos que esta configuración no se habrá elegido con una probabilidad proporcional a la densidad canónica, así como un cierto número de configuraciones subsecuentes, de modo que estas constituyen una especie de configuraciones transitorias antes de llegar al equilibrio P_{eq} , las cuales habrá que desechar al momento de realizar los promedios. En la práctica puede ser difícil determinar cuántas de tales configuraciones deben desecharse. Una manera de saber que se ha desechado el número adecuado de configuraciones consiste en realizar corridas a una temperatura fija con diferentes configuraciones iniciales [6.6]. Si los resultados de estas corridas coinciden dentro de los errores estadísticos determinados, se puede concluir que se ha eliminado la influencia de la configuración inicial. En este tipo de mediciones se encuentra que cuando T se aproxima a la temperatura crítica, la relajación al equilibrio se vuelve cada vez más lenta, fenómeno denominado "critical slowing down".

(c).- *Imprecisión estadística.* Después de eliminar δM configuraciones iniciales, tendremos M configuraciones para realizar el análisis estadístico. Si a estas M configuraciones las subdividimos en n' piezas, con $n' \gg 1$ y de modo que piezas subsecuentes no estén correlacionadas, se puede estimar el error estadístico a través de la expresión

$$\Delta A^{exp} \equiv \sqrt{\frac{\sum_{v=1}^{n'} (\langle A_v \rangle - \langle A \rangle)^2}{n'(n'-1)}},$$

donde $\langle A_v \rangle$ es el promedio de A tomado en la v -ésima pieza de la división.

6.3.- Interpretación dinámica del proceso Monte Carlo.

Para introducir una dinámica en el proceso, asociamos una escala temporal t a la escala v de configuraciones subsecuentes. Si suponemos que N/τ_s transiciones de una partícula se realizan en la unidad de tiempo, podemos escribir a la densidad de probabilidad como $P(\mathbf{x}_v) \equiv P(\mathbf{x}, t)$. Müller-Krumbhaar y Binder [6.7] dan una demostración de que la evolución dinámica de $P(\mathbf{x}, t)$ está gobernada por la ecuación maestra

$$\frac{dP(\mathbf{x}, t)}{dt} = -\int d\mathbf{x}' \{W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')P(\mathbf{x}, t) - W(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})P(\mathbf{x}', t)\},$$

de modo que si los cambios de estado involucran únicamente el cambio en una partícula, entonces

$$\begin{aligned} \frac{dP(\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N, t)}{dt} = & -\sum_{i=1}^N \sum_{\alpha_i, \alpha_i'} W(\alpha_i \rightarrow \alpha_i') P(\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N, t) \\ & + \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha_i, \alpha_i'} W(\alpha_i' \rightarrow \alpha_i) P(\alpha_1, \dots, \alpha_i', \dots, \alpha_N, t), \end{aligned}$$

donde la suma sobre α_i representa al conjunto de estados accesibles a la partícula. Para el modelo de Ising, esta expresión se reduce a

$$\begin{aligned} \frac{dP(\mu_1, \dots, \mu_i, \dots, \mu_N, t)}{dt} = & -\sum_{i=1}^N W(\mu_i \rightarrow -\mu_i) P(\mu_1, \dots, \mu_i, \dots, \mu_N, t) \\ & + \sum_{i=1}^N W(-\mu_i \rightarrow \mu_i) P(\mu_1, \dots, -\mu_i, \dots, \mu_N, t) \end{aligned}$$

que define al denominado modelo de Ising cinético [6.8]. A partir de la ecuación maestra, se pueden derivar ecuaciones para el movimiento de cualquier operador $A(\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N, t)$

$$\frac{d\langle A(\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N, t) \rangle}{dt} = -\sum_{i=1}^N \sum_{\alpha_i, \alpha_i'} \langle W(\alpha_i \rightarrow \alpha_i') [A(\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N, t) - A(\alpha_1, \dots, \alpha_i', \dots, \alpha_N, t)] \rangle,$$

y donde

$$\langle A(\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N, t) \rangle \equiv \sum_{\{\alpha_i\}} A(\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N, t) P(\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N, t)$$

La ventaja de esta aproximación radica en que ahora la convergencia estocástica del sistema tiene un significado preciso, donde el tiempo está definido hasta un factor constante τ_s ($\tau_s = 1$ corresponde a un paso de Monte Carlo por espín en una unidad de tiempo).

Para el estudio de la dinámica en procesos estocásticos, se introducen las denominadas funciones de relajación o de correlación temporal. En equilibrio térmico, la relajación de un operador $A(t)$ está caracterizada por la función de relajación $\phi_{\delta A \delta A}(t)$ [6.9]

$$\phi_{\delta A \delta A}(t) = \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A(0) \rangle \langle A(t) \rangle}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

$$\phi_{\delta A \delta t}(t) = \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A(0) \rangle \langle A(t) \rangle}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

y el tiempo de relajación asociado $\tau_{\delta A \delta t}$

$$\tau_{\delta A \delta t} = \int_0^{\infty} \phi_{\delta A \delta t}(t) dt,$$

que es una medida de la independencia estadística entre configuraciones sucesivas para el operador A .

6.4.- Precisión y convergencia en la interpretación dinámica.

Kawasaki [6.10] proporcionó argumentos de plausibilidad para estimar al parámetro de orden como la cantidad que tiene el tiempo de relajación mayor, de modo que el número de configuraciones iniciales que deben desecharse δn está determinado por la condición

$$\delta n \gg \tau_{\mu}^{\Delta l},$$

donde $\tau_{\mu}^{\Delta l}$ es el tiempo de relajación para el parámetro de orden a partir de una configuración en equilibrio con parámetro l hasta una con parámetro l' tal que $\Delta l = l' - l$. Cerca de T_c ocurre un frenado crítico (en inglés "critical slowing down") que consiste en la divergencia de $\tau_{\mu}^{\Delta l}$ según [6.11]

$$\tau_{\mu}^{\Delta l} \propto |1 - T/T_c|^{-\Delta_{\mu}^{\Delta l}},$$

con $\Delta_{\mu}^{\Delta l}$ el exponente crítico asociado al tiempo de relajación hacia el equilibrio $\tau_{\mu}^{\Delta l}$.

Para estimar la desviación $\Delta A = \bar{A} - \langle A \rangle$ entre el resultado Monte Carlo \bar{A} y el resultado "verdadero" $\langle A \rangle$, que se obtiene sólo en el límite $M \rightarrow \infty$, consideremos la variancia de las variables correlacionadas A_v .

$$\begin{aligned} \langle \delta A^2 \rangle &= \left\langle \left(\frac{1}{M} \sum_{v=1}^M (A_v - \langle A \rangle) \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{M^2} \left\langle \sum_{v=1}^M (A_v - \langle A \rangle)^2 \right\rangle \\ &+ \frac{2}{M^2} \sum_{v_1=1}^M \sum_{v_2=v_1+1}^M \left(\langle A_{v_1} A_{v_2} \rangle - \langle A \rangle^2 \right). \end{aligned}$$

En equilibrio térmico existe invariancia translacional a lo largo de la cadena, de modo que

$$\langle \delta A^2 \rangle = \frac{1}{M} \left(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right) + \frac{2}{M} \sum_{v=1}^M \left(1 - \frac{v}{M} \right) \left(\langle A_0 A_v \rangle - \langle A \rangle^2 \right). \quad (6.5)$$

Si medimos el tiempo en "pasos de Monte Carlo por espín" ($t = \tau_r v / N$), en el límite $N \rightarrow \infty$ obtenemos

$$\langle \delta A^2 \rangle = \frac{\tau_r}{\tau_n} \frac{1}{N} \chi_{MM} \left\{ 1 + 2 \int_0^{\tau_n} \frac{dt}{\tau_r} \left(1 - \frac{t}{\tau_n} \right) \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \right\},$$

donde τ_n denota al tiempo asociado a n pasos de Monte Carlo por espín y $\chi_{MM} = (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) / M$ es la desviación estándar que resultaría si los estados consecutivos no estuviesen correlacionados.

Para que la aproximación (6.5) sea válida se requiere que $\tau_n \gg \tau_{\delta A \delta A}$ (o $n \gg \tau_{\delta A \delta A} / \tau_s$). En este caso, la expresión para el error se reduce a

$$\langle \delta A^2 \rangle = \frac{1}{nN} \chi_{AA} \{1 + 2\tau_{AA} / \tau_s\}$$

Dado que en el límite asintótico la distribución de probabilidad es Gaussiana, se encuentra que el error esperado para la variable A es

$$\Delta A \approx \sqrt{\langle \delta A^2 \rangle}.$$

Cerca del punto crítico χ_{AA} y $\tau_{\delta A \delta A}$ divergen siguiendo una ley de potencias

$$\chi_{AA} = \chi_{AA}^0 \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\gamma_{AA}}$$

$$\tau_{\delta A \delta A} = \tau_{\delta A \delta A}^0 \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\Delta_{AA}}$$

de modo que el comportamiento crítico del error estadístico es

$$\Delta A \propto \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-(\gamma_{AA} + \Delta_{AA})/2}$$

Para hacer uso de estas estimaciones, se requiere evaluar $\tau_{\delta A \delta A}$. Si A es el parámetro de orden μ , la teoría convencional del "critical slowing down" [6.12] predice que

$$\tau_{\delta A \delta A} = \tau_s \chi_{\mu\mu} / \chi_0,$$

donde χ_0 es la susceptibilidad del sistema con espines que no interactúan, de donde se sigue que el error se incrementa proporcionalmente a la susceptibilidad en la región crítica, y no a su raíz

$$\Delta A \cong \sqrt{\frac{2}{nM} \chi_{\mu\mu}} \sqrt{1 + \frac{1}{2\chi_{\mu\mu}}} \approx \chi_{\mu\mu} \sqrt{\frac{2}{nM}}$$

Puesto que la teoría convencional del frenado crítico resulta ser incorrecta en la mayoría de los casos, pueden obtenerse mejores estimaciones de $\tau_{\delta A \delta A}$ a través de expansiones en series, así como de las propias simulaciones de Monte Carlo.

6.5.- Condiciones de frontera y sus implicaciones en el límite termodinámico.

(a).- Condiciones de frontera: libres y periódicas.

Debido a que los sistemas simulados son finitos, la cuestión de las condiciones de frontera es muy importante si estamos interesados en las propiedades del sistema uniforme infinito. La elección más natural para un sistema finito es la de superficies libres al simular, por ejemplo, a una pequeña partícula magnética. El método MC no está restringido en cuanto al tipo de frontera que se simula, pudiendo ser ésta aproximadamente esférica o bien irregular. En experimentos con partículas de distintas formas [6.14], se observa que la singularidad crítica cambia de posición en el valor de la temperatura y se redondean las

singularidades, y que la magnitud de estos efectos depende tanto del tamaño como de la forma de las muestras. Para temperaturas bajas, se ha observado que las variaciones con respecto a las propiedades termodinámicas son más bien pequeñas, aún en sistemas relativamente pequeños.

Otra aproximación a un sistema infinito lo constituyen las condiciones de fronteras periódicas, de modo que se eliminan los efectos de superficie, pero se retienen los efectos de tamaño finito. En este caso, las interacciones de espines en una superficie (plana) se producen con espines correspondientes en la superficie opuesta del sistema. En una malla cúbica con $N = n_1 \times n_2 \times n_3$ sitios estas condiciones de periodicidad se escriben como

$$\bar{s}(h \pm n_1, k, l) = \bar{s}(h, k, l), \bar{s}(h, k \pm n_2, l) = \bar{s}(h, k, l), \bar{s}(h, k, l \pm n_3) = \bar{s}(h, k, l),$$

donde h, k, l son las coordenadas del sitio R_i de la malla.

El método MC permite estudiar también subsistemas de sistemas mayores, en cuyo caso las condiciones de frontera están consideradas en términos de una interacción de los espines en el subsistema con el resto del sistema, como pueden ser los cúmulos de espines de un mismo signo para el modelo de Ising [6.16].

(b).- El método Monte Carlo auto-consistente.

Una transición de fase sólo puede ocurrir en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$. De manera análoga, el parámetro de orden está definido sólo en el límite termodinámico, dado que

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^z \right\rangle = \langle m \rangle > 0, \text{ para } T < T_c,$$

mientras que

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^z \right\rangle = 0, \text{ para toda } T, N < \infty.$$

En el caso del modelo de Ising, no se observa el resultado anterior si N es grande y T no está muy cerca de la temperatura crítica, y el resultado que se obtiene de la estimación del parámetro de orden en este estado meta-estable es una buena aproximación a los resultados en el sistema infinito. En el caso de Heisenberg, cuando la magnetización puede adoptar cualquier dirección en ángulo sólido, no se presenta esta meta estabilidad y se tiene que recurrir a estimaciones de la magnetización del tipo

$$\sqrt{\langle m^2 \rangle} \equiv \sqrt{\left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \right)^2 \right\rangle}.$$

pese a que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\langle m^2 \rangle} = \langle m \rangle,$$

la convergencia hacia este límite es más bien lenta en la región crítica.

6.6.- Teoría de escalamiento para efectos de tamaño finito.

El comportamiento crítico de un sistema se modifica notablemente si el sistema es finito en alguna de sus dimensiones [6.17]. Por ejemplo, para una película delgada de Ising de grosor L y con las otras dos dimensiones infinitas, se espera que la temperatura de transición se vea modificada con respecto a la del sistema infinito tridimensional. Más aún, el carácter de la transición será bidimensional (i. e., los valores de los exponentes críticos son los del sistema bidimensional), pero para temperaturas no muy cercanas a la crítica, el comportamiento crítico aparente será el tridimensional si el grosor L es suficientemente grande al compararlo con la longitud de correlación. Al aproximarse al valor $T_c(L)$, ocurre un cruzamiento de un régimen tridimensional a uno bidimensional. Algo similar ocurre en sistemas finitos en todas sus direcciones; para temperaturas no muy cercanas a su temperatura crítica se observa un comportamiento crítico efectivo, en tanto que al aproximarse a aquellas, las anomalías críticas se redondean, puesto que un sistema finito se comporta de manera regular para todas las temperaturas.

Consideremos una película delgada de dimensión lineal L . La parte singular de la energía libre es [6.18]

$$F(T, H, L) = L^\psi f(\varepsilon |L^\theta, L^{-\phi} H) \quad \text{cuand } L \rightarrow \infty, \quad (6.6)$$

donde ψ , θ , ϕ son tres exponentes, y ε es la diferencia de temperatura con respecto a la temperatura crítica $T_c(L)$.

$$\varepsilon' = \varepsilon + \frac{a'}{L^\lambda} = \frac{T - T_c}{T_c} + \frac{a'}{L^\lambda}, \quad \text{cuando } L \rightarrow \infty,$$

λ es el exponente de corrimiento y a' es una constante. Para L suficientemente grande se requiere que

$$F(T, H, L) = F_s(T, H) + \frac{2}{L} F_s(T, H) + \dots,$$

donde se ha supuesto que existe una energía libre superficial F_s , distinta de cero. Con el fin de tener el escalamiento ordinario ($\Delta = \beta\delta$),

$$F_s = |\varepsilon|^{2-\alpha} f_s(|\varepsilon|^{-\Delta} H)$$

se requiere que los exponentes ψ , θ , ϕ satisfagan las relaciones

$$\psi = -(2-\alpha)\theta, \quad \phi = -\Delta\theta,$$

y si $\lambda > 1$ tenemos un escalamiento para la energía libre superficial

$$F_s = |\varepsilon|^{2-\alpha_s} f_s(|\varepsilon|^{-\Delta} H)$$

donde

$$\alpha_s = \alpha - 1/\theta.$$

De estas ecuaciones se sigue que el comportamiento crítico en el límite termodinámico será el dominante siempre que $|dL^\theta| \gg 1$, en tanto que estará encubierto para $|dL^\theta| \approx 1$. Para obtener una estimación del valor de θ , usamos el hecho de que el encubrimiento se establece cuando la dimensión lineal es igual a la longitud de correlación termodinámica $\xi = \kappa^{-1} \propto |\varepsilon|^{-\nu}$, lo cual ocasiona que

$$\theta = 1/\nu.$$

Esta teoría es consistente con los resultados exactos para mallas de Ising cuadradas finitas con condiciones de frontera periódicas [6.19], en cuyo caso $\theta = 1/\nu = 1$, $\lambda = 1/\nu = 1$, y en campo cero la dependencia con L de la energía libre se deduce del resultado (nótese que aquí $\alpha = 0$)

$$C = \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = \frac{A}{2} \ln \varepsilon^{*2}, \quad \varepsilon^{*2} = \varepsilon'^2 + (b/L^\theta)^2, \quad L \rightarrow \infty.$$

También resulta interesante describir el comportamiento de la magnetización. A partir de la ecuación (6.6) se encuentra, al diferenciar con respecto al campo y usando $N = L^d$ y el escalamiento estático [6.20]

$$m(T = T_c) = cL^{-\beta/\nu} = cN^{-\beta/(d+1)},$$

donde c es una constante del orden de la unidad.

6.7.- Métodos modernos de actualización de espines.

Los resultados MC para el estudio del fenómeno crítico encuentran una dificultad considerable en el frenado crítico: el tiempo de auto-correlación τ de los métodos tradicionales (que corresponde al tiempo que debe transcurrir para que una medición sea estadísticamente independiente a la que la precede) crece rápidamente al aproximarse al punto crítico. La razón del "critical slowing down" (CSD) está en el hecho de que los algoritmos convencionales (tipo Metropolis) son locales; de modo que los cambios en las configuraciones se propagan difusivamente [6.21]. Para obtener una dinámica más rápida se requiere una *actualización no local*. Entre los intentos realizados para reducir el CSD están: aceleración de Fourier, Monte Carlo MultiGrid, algoritmos basados en el grupo de renormalización, algoritmos sobre-relajados y algoritmos de actualización por cúmulos (también denominados de variables subsidiarias).

(a).- Algoritmos de cúmulos.

1.- Algoritmo de Swendsen-Wang.

Swendsen y Wang [6.22] propusieron un algoritmo de actualización para modelos de espines de Potts que reduce extraordinariamente el CSD. El éxito de tal algoritmo suscitó una serie de investigaciones encaminadas a generalizar tal algoritmo hacia otros modelos, especialmente modelos de espines continuos tales como modelos σ no lineales. El algoritmo hace uso del resultado encontrado por Fortuin y Kasteleyn [6.23] de que existe una relación entre el modelo de Potts y el problema de percolación, lo cual hizo posible describir transiciones de fase termodinámicas mediante transiciones geométricas.

La exposición que se presenta aquí sigue a la de Swendsen y Wang, así como a la de Edwards y Sokal [6.21 y 6.24-25]. Consideremos un modelo de Potts definido por la distribución

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} \exp \left(K \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{\sigma_i \sigma_j} - 1) \right) \quad (6.7)$$

Un movimiento SW consiste en dos pasos: el primero transforma a una configuración de Potts en una configuración de enlaces; la segunda transforma a la configuración de enlaces en una configuración nueva de Potts.

1.- Genere un enlace η_{ij} , entre los sitios vecinos i, j estocásticamente con una probabilidad $p = 1 - \exp(-K)$, si $\sigma_i = \sigma_j$, y $p = 0$ en caso contrario.

2.- Identifique cúmulos con sitios conexos por enlaces, o sitios aislados. Dos sitios pertenecen al mismo cúmulo si existe una trayectoria conexa de enlaces que los una. A cada cúmulo se le asigna una nueva variable de Potts elegido con probabilidad igual entre 1 y q . Las variables de Potts σ' toman el valor del cúmulo al cual pertenecen.

La ergodicidad se garantiza debido a que cualquier configuración puede alcanzarse a partir de cualquier otra en un solo movimiento con una probabilidad distinta de cero. Además, los pasos 1 y 2 dejan la distribución de probabilidad invariante. [6.21]. Una eficiente implementación del algoritmo descansa en la posibilidad de realizar el paso 2 en un número de operaciones del orden de L^d . Tal algoritmo de etiquetamiento de cúmulos [6.26] ha sido desarrollado para problemas de percolación.

2.- Algoritmo de un solo cúmulo de Wolff.

Wolff [6.27] generalizó el algoritmo SW en dos formas: (1) Introdujo el método de un solo cúmulo y (2) generalizó el algoritmo para aplicarlo a modelos $O(n)$.

En el método de un solo cúmulo se elige aleatoriamente un sitio de la malla. Los vecinos de éste se agregan al cúmulo en crecimiento con la misma probabilidad que en SW

$$P(\sigma_i, \sigma_j) = 1 - \exp(-K\delta_{\sigma_i, \sigma_j})$$

El proceso continúa hasta que no se generan nuevos vecinos pertenecientes al cúmulo en la periferia, es decir, cuando todos los enlaces de la periferia han sido probados y rechazados. Para $q = 2$, los espines del cúmulo se voltean, en tanto que si $q > 2$, se elige un estado nuevo al azar entre los $q - 1$ estados. Algunas investigaciones indican que el algoritmo de Wolff de un solo cúmulo es más eficiente que SW para dimensiones superiores. [6.28]

3.- Reducción de variancia.

Una de las ventajas de los algoritmos de cúmulos es que los cúmulos generados en el proceso contienen información útil [6.29]. Por ejemplo, la susceptibilidad magnética está dada por el segundo momento de la distribución de los números de cúmulos, y el calor específico está relacionada con la fluctuación del número de enlaces. Estas relaciones se derivan de la distribución conjunta que describe al algoritmo, donde se tiene un problema correlacionado de enlaces y sitios

$$P_{\text{conj}}(\sigma, \eta) = P(\eta | \sigma)P(\sigma)$$

Dado que una configuración de cúmulos está asociada a muchas configuraciones de espines, la variancia es menor y los resultados más precisos si se calculan las propiedades a partir de la primera [6.30].

4.- Método de Woff para modelos $O(n)$.

Un concepto importante en este método es la generalización del operador de reflexión de espín (en inglés "spin-flip") $\sigma_x \rightarrow -\sigma_x$ en el modelo de Ising. Para $n \geq 2$ y $r \in S_{n-1}$ se define éste como la *reflexión con respecto al hiperplano ortogonal a r*

$$R(r)\sigma_x = \sigma_x - 2(\sigma_x \cdot r)r.$$

El hecho de que este sea un operador idempotente implica que la acción del modelo

$$Z = \prod_{x \in \Lambda} \int_{S_{n-1}} d\sigma_x \exp \left\{ \beta \sum_{\langle x,y \rangle} \sigma_x \cdot \sigma_y \right\},$$

es invariante bajo transformaciones globales R

$$[R(r)\sigma_x] \cdot [R(r)\sigma_y] = \sigma_x \cdot \sigma_y.$$

Un paso de actualización elemental consiste en las siguientes operaciones:

- Se elige una reflexión aleatoria $r \in S_{n-1}$ y un sitio en la malla $x \in \Lambda$ como el primero en el cúmulo $c \in \Lambda$.
- Modifica a $\sigma_x \rightarrow R(r)\sigma_x$ y marca a x .
- Visita a todos los enlaces que conectan a $x \in c$ con sus vecinos y , activándolos con probabilidad

$$P(\sigma_x, \sigma_y) = 1 - \exp\{-\min[0, 2\beta(\sigma_x \cdot r)(\sigma_y \cdot r)]\}$$

En caso de activarlo, se "voltea" a σ_y y se marca a y como nuevo elemento del cúmulo c .

- continúe iterativamente para todos los enlaces que aún no se hallan probado.

Para el modelo de Ising ($n = 1$) las probabilidades de activación coinciden con las del algoritmo de SW ($1 - \exp(-2\beta)$). Si se descomponen a la malla siguiendo el método SW y se elige un sitio x al azar, de modo que el cúmulo asociado a x sea el que se voltee, ignorando a los demás, tenemos que el cúmulo a voltear se alcanza de cualquiera de sus sitios, y en consecuencia la probabilidad de elegir un cúmulo SW está dada por la fracción $|c_{sw}| / |\Lambda|$ de sitios que ocupa. El tamaño medio de cúmulos es

$$\langle |c| \rangle = \left\langle \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{c_{sw}} |c_{sw}|^2 \right\rangle,$$

el cual (para $n = 1$) es un estimador mejorado para la susceptibilidad [6.31]. Con esta variante, se invierte una fracción de tiempo de cómputo mayor en cúmulos grandes, lo cual ocasiona una mejor decorrelación.

(b).- Algoritmo MultiGrid de Monte Carlo (MGMC).

El método MGMC es una generalización estocástica del método MultiGrid (MG) para resolver un sistema de ecuaciones lineales o no lineales con dispersión grande [6.32-33].

La idea básica de método consiste en considerar, además del problema original ("malla fina") a una serie de problemas auxiliares de malla burda ("coarse-grid") que aproximen al comportamiento del

problema original para excitaciones de escalas de longitud sucesivamente más grandes. Las actualizaciones locales de los algoritmos tradicionales son suplementados con actualizaciones de malla burda cuyo propósito es acelerar la equilibración de los modos de longitud de onda larga. El procedimiento se repite recursivamente para todas las escalas de longitud.

Para el modelo XY, el algoritmo MGMC se define como sigue: se introducen, además de la malla original Ω , una sucesión de "mallas burdas" $\Omega_M = \Omega, \Omega_{M-1}, \Omega_{M-2}, \dots, \Omega_0$ de tamaño lineal $L, L/2, L/4, \dots, L/2^M$, respectivamente. Estas juegan un papel en etapas intermedias del algoritmo MG. Cada sitio $y \in \Omega_{n-1}$ se considera asociado con un bloque B_y de 2^d espines en la malla más fina próxima Ω_n , Fig. 6.4. definimos un operador de interpolación $P_{n,n-1}$ que mapea una configuración de campo en la malla Ω_{n-1} hacia una en la malla Ω_n usando una interpolación constante por tramos:

$$(P_{n,n-1}\theta)_x = \theta_y, \quad \text{para } x \in B_y.$$

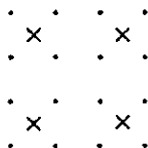


Fig. 6.1.- Escalonamiento hacia mallas burdas para el algoritmo MGMC.

En cada malla Ω_n se consideran Hamiltonianos H_n con interacciones a primeros vecinos y coeficientes que dependen de la posición

$$H_n(\theta) = - \sum_{\langle x,x' \rangle} \{ \alpha_{x,x}^{(n)} \cos(\theta_x - \theta_{x'}) + \beta_{x,x}^{(n)} \sin(\theta_x - \theta_{x'}) \}$$

Para cada Hamiltoniano H_n se supone que existe un método de actualización local $G_n(\theta, H_n)$ que actualiza a las variables de campo θ . Finalmente, γ es un número positivo entero, denominado parámetro de control de ciclo, que controlará el número de veces que se visiten a las mallas burdas.

Bajo estas circunstancias, una definición recursiva del algoritmo MGMC es la siguiente [6.32]:

```

Procedure MGMC( $n, \theta, H_n$ )
For  $j = 1:m_1$  do  $\theta \leftarrow G_n(\theta, H_n)$ 
If  $n > 0$  then
    Calculate  $H_{n-1}(\bullet) \equiv H_n(\theta + P_{n,n-1}\bullet)$ 
     $\phi \leftarrow 0$ 
    For  $j = 1:\gamma$  do  $\theta \leftarrow \text{MGMC}(n-1, \phi, H_{n-1})$ 
     $\theta \leftarrow \theta + P_{n,n-1}\phi$ 
End if
For  $j = 1:m_2$  do  $\theta \leftarrow G_n(\theta, H_n)$ 
End

```


Los barridos realizados con la actualización local $G_n(\theta, H_n)$ sirven para actualizar los modos cortos del modelo, y el factor que importa para tal efecto es la suma $m_1 + m_2$, pudiéndose anular ya sea el pre-barrido o el post-barrido.

El cálculo del Hamiltoniano H_{n-1} está determinado por el cálculo de los coeficientes:

$$H_{n-1}(\phi) = - \sum_{\langle y, y' \rangle} \{ \alpha'_{y, y'} \cos(\phi_y - \phi_{y'}) + \beta'_{y, y'} \text{sen}(\phi_y - \phi_{y'}) \} + \text{const.},$$

donde

$$\alpha'_{y, y'} = \sum_{x \in B, x' \in B, y} \{ \alpha_{x, x'} \cos(\theta_x - \theta_{x'}) + \beta_{x, x'} \text{sen}(\theta_x - \theta_{x'}) \}$$

$$\beta'_{y, y'} = \sum_{x \in B, x' \in B, y} \{ \beta_{x, x'} \cos(\theta_x - \theta_{x'}) - \alpha_{x, x'} \text{sen}(\theta_x - \theta_{x'}) \}$$

Una iteración del algoritmo involucra una visita a la malla M , γ visitas a la malla $M-1$, γ^2 visitas a la malla $M-2$, y así sucesivamente.

(c).- Algoritmo sobre-relajado.

La idea básica del algoritmo sobre-relajado es la elección de una configuración de prueba para una variable de campo de forma que la configuración de prueba se halle lo más lejos posible de la configuración original en el espacio de fase y de modo que la diferencia entre las energías sea relativamente pequeña [6.34]. Esto se logra mediante la localización aproximada de los puntos de energía mínima para la variable en consideración, y realizando la elección del elemento de prueba en el lado "opuesto" de este valor.

Si se piensa en las variables de campo como en elementos de un grupo G y suponemos conocido un método para localizar un elemento del grupo g_0 que minimice aproximadamente a la energía $H(g)$, considerando a g como la única variable y manteniendo a las demás fijas, de modo tal que el cálculo se ha realizado sin el uso directo de la variable g , entonces el elemento de prueba para el algoritmo sobre-relajado es

$$g' = g_0 g^{-1} g_0.$$

El algoritmo no funciona si se parte de una configuración completamente ordenada, pues en tal caso $g' = g$ y no se realizan pruebas de configuraciones distintas, de suerte tal que para temperaturas bajas, el tamaño de los cambios energéticos entre configuraciones consecutivas disminuye.

(d) Algoritmos basados en grupo de renormalización.

Al igual que en el algoritmo sobre-relajado, en este método se busca generar configuraciones sucesivas que den origen a una razón de intentos aceptados no demasiado pequeña, aún cuando las configuraciones estén relativamente separadas en el espacio de fase. Un procedimiento desarrollado por Schmidt [6.35] consiste en generar a partir de una configuración de espines en una malla pequeña, configuraciones de espines que se van duplicando conforme a un conjunto de reglas adecuado, hasta

alcanzar el número N de espines de la malla, y estas configuraciones es la que se propone como subsecuente a la actual.

6.8.- Análisis de resultados mediante la técnica de peso estadístico de histogramas.

En 1988, A. M. Ferrenberg y R. H. Swendsen presentaron una técnica de análisis de los resultados de simulaciones de Monte Carlo que permite extrapolar los resultados de la simulación hacia puntos en el espacio de parámetros distintos a aquel en el que se realizó el experimento.

El objetivo de su investigación era el desarrollar un método que permitiese una optimización de la eficiencia de las simulaciones, y el resultado de la misma se tradujo en una técnica que hace uso de una mayor cantidad de información a partir de una simulación para extrapolar los resultados, de modo que es posible generar funciones termodinámicas continuas en toda una región del espacio de parámetros.[6.36]

Consideremos una simulación MC de algún sistema físico. Cada configuración se genera con su peso térmico apropiado, de modo tal que los promedios temporales dan los promedios en equilibrio de cualquier cantidad de interés. No obstante, debido a que se conoce la forma de la distribución de probabilidad, es posible extraer más información de la simulación.

Para ejemplificar, considérese al modelo de Ising en un campo magnético, con Hamiltoniano

$$-\beta H = K \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i = KS + hM.$$

La distribución de probabilidad de S y M para un punto en el espacio de parámetros (K, h) está dado por

$$P_{(K,h)}(S, M) = \frac{1}{Z(K, h)} N(S, M) \exp(KS + hM),$$

donde $N(S, M)$ es el número de configuraciones en el punto (S, M) del espacio de fase, y $Z(K, h)$ es la función de partición canónica dada por

$$Z(K, h) = \sum_{S, M} N(S, M) \exp(KS + hM).$$

El histograma de valores de (S, M) generado por la simulación MC es proporcional a $P_{(K,h)}(S, M)$, y mediante el cómputo de este histograma es posible generar la distribución de probabilidad normalizada. Si deseamos calcular la distribución normalizada para otro punto (K', h') , podemos calcularla a partir de

$$P_{(K',h')}(S, M) = \frac{P_{(K,h)}(S, M) \exp[(K' - K)S + (h' - h)M]}{\sum_{S, M} P_{(K,h)}(S, M) \exp[(K' - K)S + (h' - h)M]},$$

el denominador en la anterior ecuación sirve como una estimación de la función de partición. Dado que las variables K' y h' son continuas, cualquier cantidad puede calcularse como función continua de los parámetros.

CAPÍTULO 7.- SIMULACIÓN MONTE CARLO DE LOS MODELOS DE ISING Y XY CON DILUCIÓN MAGNÉTICA DE SITIO.

7.1. - Implementación de los algoritmos usados.

Las simulaciones Monte Carlo (MC) que se han realizado tanto para el modelo de Ising con interacciones antiferromagnéticas y dilución de sitio, como para el modelo XY con interacciones ferromagnéticas, también diluido, han consistido en dos distintas aproximaciones al problema: (a) la primera de ellas consiste en la simulación del modelo haciendo uso de un método de actualización de espines propuesta por Metropolis et. al. [6.3] (b) la segunda consiste en la aplicación de las técnicas de actualización por cúmulos o de variables auxiliares desarrolladas por Swendsen, Wang, Wolff, et. al. [6.21,22,27-31], así como un análisis de los resultados mediante el empleo de histogramas, propuesto por Ferrenberg y Swendsen. [6.36]

Se ha puesto énfasis en estas simulaciones en las propiedades termodinámicas de los sistemas, especialmente en la dependencia con la temperatura y el número de partículas (ó longitud de la malla) del calor específico, el parámetro de orden, la susceptibilidad y el cumulante de cuarto orden, todos a campo magnético cero. El programa se ha implementado siguiendo las líneas generales de la simulación MC presentado por K. Binder. [7.2], y en su forma final constituye una versión adaptada al problema con dilución de algoritmos propuestos en otra parte: [7.2] para el caso de dinámica de Metropolis, tanto modelo de Ising como XY, y [6.21] para el caso del algoritmo con dinámica de cúmulos.

7.2. - Modelo de Ising con dilución de sitio (interacciones antiferromagnéticas).

(a) Resultados para dinámica tradicional.

1.- Código en FORTRAN para el algoritmo con dinámica tradicional.

C Programa MC para el modelo de Ising 2d de espín $\frac{1}{2}$ con dilución de sitio e interacciones antiferromagnéticas. C

```
PARAMETER(VEC = 4)
INTEGER LATTICE(150,150)
REAL FACBOLTZ(0:8)
DOBLE PRECISION M E, PO, SUSC, CALESP, SCUM, CUM
DOBLE PRECISION MAG, ENE, POT, P
INTEGER EMPTY, CONC, NOEQ
INTEGER X, Y, XP, YP, XM, YM, MCSMAX
```

C Ingreso de los parámetros de la simulación

```
WRITE(*,*) 'TAMAÑO DE LA MALLA L ='
READ(*,*) L
WRITE(*,*) 'NUMERO DE PASOS M. C.'
READ(*,*)MCSMAX
WRITE(*,*) 'PROBABILIDAD DE OCUPACION'
READ(*,*)P
WRITE(*,*) 'PASOS PARA EL EQUILIBRIO TERMICO'
```

```
READ(*,*)NOEQ
```

```
NORM = MCSMAX - NOEQ
```

```
OPEN(UNIT = 20, FILE = 'IAFD', STATUS = 'NEW')
WRITE(20,*)'LOS PARAMETROS DE LA SIMULACION SON:'
WRITE(20,*)'L = ',L
WRITE(20,*)'NUMERO DE PASOS M. C. EFECTIVOS',NORM
WRITE(20,*)'CONFIGURACIONES DESECHADAS',NOEQ
WRITE(20,*)'PROBABILIDAD DE OCUPACION =',P
WRITE(20,*)'TEMPERATURA      MAGNETIZACION      P. O.      ENERGIA
SUSC.      SUSC. STAGG.      CAL. ESP.      CUM'
```

```
L2 = L**2
```

```
CONC = L2 - INT(P*L2 + 0.5)
```

```
! LLENADO DE LA MALLA EN ESTADO BASE CON INTERACCIONES
ANTIFERROMAGNÉTICAS.
```

```
DO 102 J = 1,L
```

```
DO 102 I = 1,L
```

```
IF(((MOD(I,2).NE.0).AND.(MOD(J,2).NE.0)).OR.
+ ((MOD(I,2).NE.1).AND.(MOD(J,2).NE.1))) THEN
```

```
LATTICE(I, J) = -1
```

```
ELSE
```

```
LATTICE(I, J) = +1
```

```
END IF
```

```
102 CONTINUE
```

```
! DILUCIÓN DE LA MALLA A PROBABILIDAD P:
```

```
EMPTY = 0
```

```
DO WHILE(EMPTY. LT .CONC)
```

```
I = INT(RAN(4)*L)
```

```
J = INT(RAN(4)*L)
```

```
IF(LATTICE(I, J).NE.0) THEN
```

```
LATTICE(I, J) = 0
```

```
EMPTY = EMPTY + 1
```

```
END IF
```

```
END DO
```

```
E = 0.0
```

```
MAG = 0.0
```

```
PO = 0.0
```

```
SUSC = 0.0
```

```
SCUM = 0.0
```

```
CALESP = 0.0
```

```
CUM = 0.0
```

```
DO 900 N = 0,8
```

900 FACBOLTZ(N) = EXP(2*(N - 4.0)/T)

C CICLO EN PASOS M. C.

DO 200 MCS = 1, MCSMAX

DO 800 Y = 1, L

YP = Y + 1

YM = Y - 1

IF(Y. EQ .1)YM = L

IF(Y. EQ .L)YP = 1

DO 800 X = 1, L

XP = X + 1

XM = X - 1

IF(X. EQ .1)XM = L

IF(X. EQ .L)XP = 1

K = VEC + LATTICE(X, Y)*(LATTICE(XP, Y) +
LATTICE(XM, Y) + LATTICE(X, YP) + LATTICE(X, YM))

IF(K. GT .4)THEN

LATTICE(X, Y) = - LATTICE(X, Y)

ELSE IF(FACBOLTZ(K). GT .RAN(7))THEN

LATTICE(X, Y) = - LATTICE(X, Y)

END IF

800 CONTINUE ! CIERRA CICLO EN X & Y.

! ANALISIS DE LA CONFIGURACION GENERADA.

IF(MCS. GT .NOEQ)THEN

ENE = 0

MAG = 0

POT = 0

DO 208 Y = 1, L

DO 208 X = 1, L

MAG = MAG + LATTICE(X, Y)

IF(((MOD(X,2).EQ.0).AND.(MOD(Y,2).EQ.0)).OR.

((MOD(X,2).EQ.1).AND.(MOD(Y,2).EQ.1))) THEN

POT = POT + LATTICE(X, Y)

ELSE

POT = POT - LATTICE(X, Y)

END IF

IF((X. NE .1).AND.(Y. NE .1))THEN

ENE = ENE + LATTICE(X, Y)*(LATTICE(X-1,Y) +

LATTICE(X, Y-1))

ELSE IF((X. EQ .1).AND.(Y. NE .1))THEN

```

                ENE = ENE + LATTICE(X, Y)*(LATTICE(L, Y) +
LATTICE(X, Y-1))
            ELSE IF((X. NE .1).AND.(Y. EQ .1)THEN
                ENE = ENE + LATTICE(X, Y)*(LATTICE(X-1,Y) +
LATTICE(X, L))
            ELSE
                ENE = ENE + LATTICE(X, Y)*(LATTICE(L, Y) +
LATTICE(X, L))
            END IF
208   CONTINUE

        E = E + ENE / L2
        M = M + ABS(MAG)
        PO = PO + ABS(POT / L2)
        SUSC = SUSC + MAG**2
        SCUM = SCUM + (POT / L2)**2
        CALESP = CALESP + (ENE / L2)**2
        CUM = CUM + (POT / L2)**4

        END IF

200   CONTINUE

        ! IMPRESION DE RESULTADOS

        WRITE(20,103) T, M/(NORM*L2), PO/NORM, -E/NORM, SUSC/ (NORM*L2) -
(M/(NORM*L2))**2*L2, (SCUM/NORM - (PO/NORM)**2)*L2, (CALESP/NORM -
(E/NORM)**2)*L2, 1 - CUM*NORM/(3*SCUM**2)

103   FORMAT(1X,F13.4,F13.8,F13.8,F13.8,F13.8,F16.8,F16.8,F13.6)
        CLOSE(20)
        END

```

2.- Relajación al equilibrio.

El estudio de la relajación hacia el equilibrio para el modelo de Ising simulado con dinámica tradicional indica el número de configuraciones MC generadas que se requiere desechar antes de iniciar el promedio sobre configuraciones en equilibrio a la temperatura (y campo magnético) de la simulación. La tabla 7.1 indica el comportamiento de varias cantidades termodinámicas para una concentración y temperatura fijas. Un comportamiento similar se obtiene para otras concentraciones. En la figura 7.1 se muestran los mismos resultados de una manera gráfica.

Tabla 7.1 Relajación al equilibrio de varias cantidades termodinámicas para el modelo de Ising con dinámica tradicional. La concentración de espines es $\rho = 0.95$, y la temperatura $kT/J = 2.0$.

Parametro de orden				
MCS	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$
10000	0.6853125	0.6983359	0.7208047	0.7374697
20000	0.6822344	0.6978125	0.7191680	0.7394941
30000	0.6826250	0.6984922	0.7175215	0.7415360
40000	0.6785625	0.6952520	0.7143106	0.7416019
50000	0.6754688	0.6910766	0.7101477	0.7403465
60000	0.6772396	0.6960573	0.7130130	0.7414061
70000	0.6770938	0.6976272	0.7136367	0.7412927
80000	0.6767734	0.6969004	0.7128147	0.7414088
90000	0.6745174	0.6945043	0.7097760	0.7395621
100000	0.6758781	0.6960883	0.7110076	0.7396045
110000	0.6752216	0.6954546	0.7111877	0.7399320
120000	0.6737188	0.6956003	0.7121579	0.7405582
130000	0.6743630	0.6965204	0.7130551	0.7405637
140000	0.6742679	0.6957857	0.7114824	0.7398533
150000	0.6734917	0.6944859	0.7103307	0.7398303
160000	0.6739375	0.6946450	0.7107285	0.7401102
170000	0.6736930	0.6950901	0.7113876	0.7399531
180000	0.6723559	0.6939753	0.7110612	0.7398470

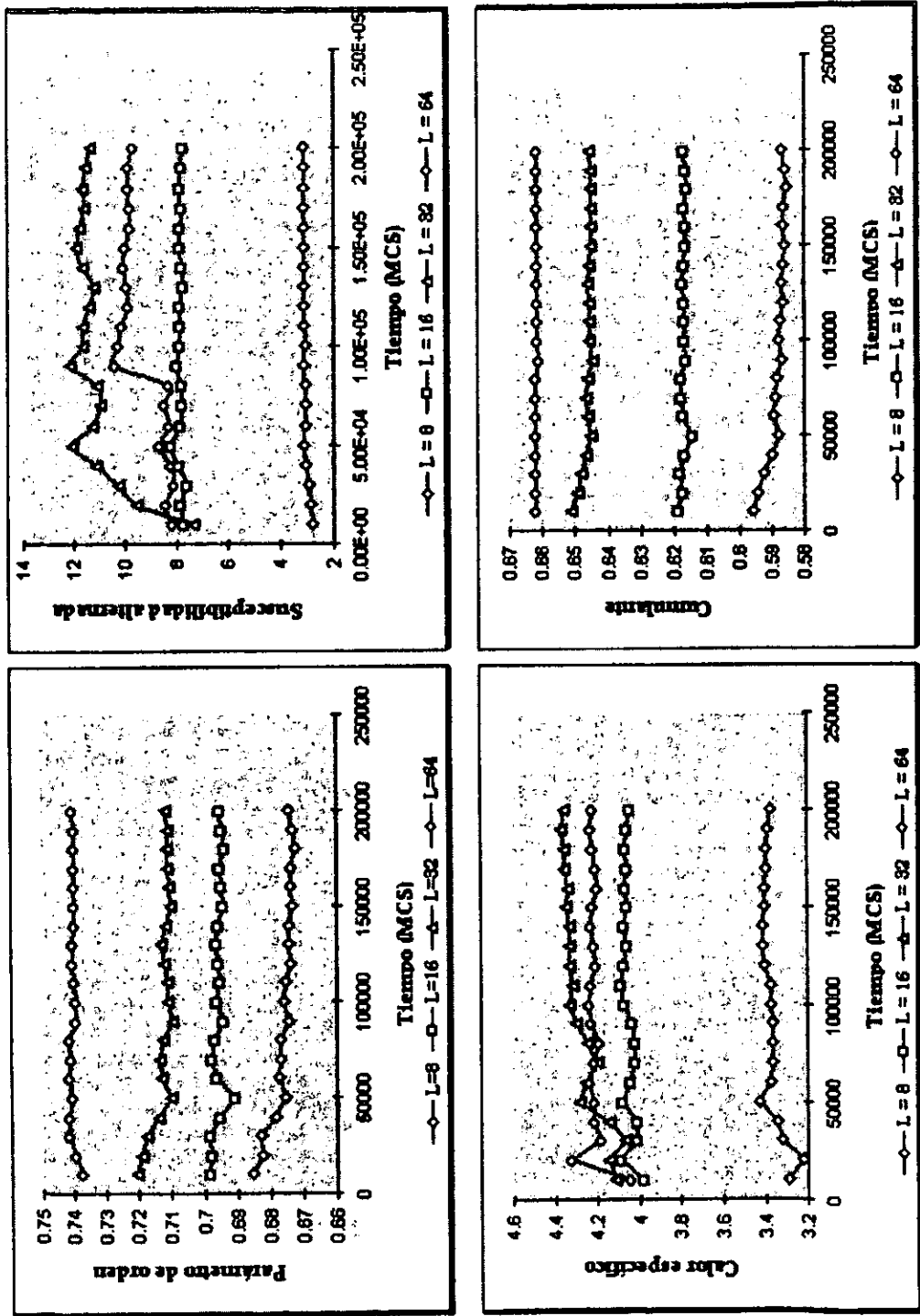
Susceptibilidad escalonada				
MCS	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$
10000	2.8348188	7.6885036	7.3246535	8.1440740
20000	2.9067567	7.8530875	9.5200750	8.4158044
30000	2.9702707	7.5891409	10.2484936	8.1138404
40000	3.0669190	7.9228819	11.1130350	8.1929439
50000	3.1129234	8.2389003	12.0803112	8.6774618
60000	3.0667415	7.8741549	11.2269026	8.3024111
70000	3.0616498	7.7599275	10.9475115	8.4488663
80000	3.0699018	7.8095928	11.0736728	8.3041885
90000	3.1118032	7.9962113	12.1174641	10.3491668
100000	3.0921369	7.8645991	11.6209786	10.2103940
110000	3.1020787	7.8466596	11.5895254	10.0761596
120000	3.1300012	7.8594137	11.3863975	9.8766144
130000	3.1238154	7.7392491	11.1976664	9.8944710
140000	3.1287853	7.7717061	11.5844588	10.0377380
150000	3.1411077	7.8621605	11.8840042	9.9534180
160000	3.1331574	7.8677942	11.7429768	9.7863849
170000	3.1266782	7.7694634	11.5346353	9.8154212
180000	3.1457421	7.8533599	11.6231983	9.8574266
190000	3.1229838	7.7964767	11.4914032	9.8520769
200000	3.1003472	7.7310029	11.2779850	9.6647821

Tabla 7.1.- (Continuación.)

Calor específico				
MCS	L = 8	L = 16	L = 32	L = 64
10000	3.2939028	3.9838590	4.1137633	4.0421665
20000	3.2204625	4.0865099	4.1468229	4.3212349
30000	3.3215416	4.0098115	4.0681745	4.1784622
40000	3.3461859	4.0140933	4.1437363	4.2157043
50000	3.4346977	4.0850576	4.2826474	4.2169532
60000	3.3794348	4.0395900	4.2499540	4.2340678
70000	3.3719970	4.0235090	4.1944561	4.2113118
80000	3.3664907	4.0220346	4.2467192	4.1937689
90000	3.3723202	4.0349249	4.2972958	4.2290536
100000	3.3767210	4.0717201	4.3285150	4.2359157
110000	3.3780855	4.0865234	4.3143531	4.2279629
120000	3.4098985	4.0757218	4.3291401	4.2086955
130000	3.4144230	4.0582435	4.3264715	4.2104794
140000	3.4160633	4.0732281	4.3298213	4.2263069
150000	3.4122573	4.0549447	4.3475898	4.2186781
160000	3.4120566	4.0676927	4.3384008	4.1959363
170000	3.4002424	4.0557991	4.3503209	4.2055144
180000	3.4007959	4.0672898	4.3517441	4.2182442
190000	3.3971845	4.0564373	4.3684533	4.2316340

Cumulante				
MCS	L = 8	L = 16	L = 32	L = 64
10000	0.5960580	0.6193050	0.6511100	0.6620890
20000	0.5942030	0.6176330	0.6490810	0.6620170
30000	0.5925910	0.6185940	0.6484610	0.6622180
40000	0.5896650	0.6169420	0.6469080	0.6621760
50000	0.5876850	0.6147310	0.6451240	0.6619300
60000	0.5891900	0.6173540	0.6463840	0.6621270
70000	0.5889500	0.6182240	0.6466160	0.6620440
80000	0.5885500	0.6179420	0.6462390	0.6621060
90000	0.5871110	0.6164950	0.6449400	0.6613110
100000	0.5879300	0.6173070	0.6455740	0.6613610
110000	0.5873770	0.6169600	0.6456080	0.6614090
120000	0.5863660	0.6169340	0.6458470	0.6615020
130000	0.5867390	0.6175240	0.6461310	0.6614820
140000	0.5865010	0.6172080	0.6455360	0.6613830
150000	0.5860630	0.6165180	0.6450960	0.6614120
160000	0.5863110	0.6164110	0.6452160	0.6614890
170000	0.5862710	0.6168510	0.6455150	0.6614600
180000	0.5854680	0.6161890	0.6453140	0.6614270
190000	0.5861190	0.6165880	0.6454550	0.6614240
200000	0.5868010	0.6170200	0.6457440	0.6615210

Fig. 7.1.- Relajación al equilibrio de varias cantidades termodinámicas en el modelo de Ising. La concentración de espines es $p = 0.95$ y la temperatura $kT/J = 2.0$. La Susceptibilidad alternada muestra el tiempo de relajación más grande.



3.- Cantidades termodinámicas.

Las cantidades termodinámicas calculadas en las simulaciones fueron el parámetro de orden, la energía por espín, la susceptibilidad magnética alternada[#], el calor específico y el cumulante de orden 4, este último útil en la determinación de la temperatura crítica para las distintas concentraciones de dilución: la temperatura crítica está determinada por la intersección de las razones entre cumulantes calculados para distintos tamaños de la malla [7.2]. Los cálculos se han realizado para diversos tamaños de la malla, lo que hace posible un análisis de escalamiento a tamaño finito para cada una de las concentraciones de dilución.

En las tablas 7.2 a 7.6 se muestran algunos resultados representativos de las simulaciones numéricas realizadas para la estimación de las distintas cantidades termodinámicas. Se realizaron 20,000 pasos MC para la relajación hacia el equilibrio y se tomaron 200,000 pasos MC por espín para el cálculo de los promedios para cada una de las cantidades termodinámicas. Asimismo, se tomaron promedios sobre 10 realizaciones distintas de desorden geométrico en la malla, para cada temperatura y concentración. Un primer barrido con estadística pequeña permitió, para cada caso, una estimación somera de la posición de $T_c(p)$. Con esta información se procedió a realizar un estudio más exhaustivo en la vecindad de esos valores estimados.

[#] Debido a que la magnetización se anula para toda T en el sistema antiferromagnético, el parámetro de orden no es la magnetización, sino más bien la denominada magnetización alternada, la cual se calcula en base a dos mallas interpenetradas en las que los espines tienen una de las dos direcciones posibles en el estado base, definiéndose la magnetización alternada M_i como la diferencia entre la magnetización en la malla con espines hacia arriba M_+ y la magnetización en la malla con espines hacia abajo M_- , $M_i = M_+ - M_-$.

➤ **Parámetro de orden**

Tabla 7.2.- Parámetro de orden como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L para distintas concentraciones de dilución de la malla. p es la fracción de sitios ocupados.

$p = 0.850$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.600	0.544753594	0.563429024	0.575181034	0.599226645	0.606800806
1.675	0.516496719	0.522460977	0.521958887	0.532547763	0.541690252
1.700	0.482887815	0.472414843	0.455655606	0.425883973	0.408248373
1.725	0.421126094	0.413374609	0.368774092	0.315388345	0.292406418
1.750	0.438102813	0.380921133	0.324651466	0.247718732	0.200969507
1.775	0.404388439	0.355495546	0.286924502	0.197466426	0.146264984
1.800	0.391734375	0.333567345	0.258160184	0.171376588	0.117177871
$p = 0.75$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.700	0.638450938	0.642150664	0.664103692	0.686936863	0.697922708
1.725	0.612447188	0.609460937	0.627733145	0.65255803	0.665280049
1.750	0.586667345	0.572615546	0.580627256	0.600575028	0.609946318
1.775	0.522219532	0.505761836	0.502028165	0.520859102	0.518493861
1.800	0.492860781	0.461946874	0.436004179	0.415504756	0.389443955
1.825	0.471237501	0.424235859	0.363807597	0.301166986	0.2577207
1.850	0.450146876	0.392653711	0.318525069	0.240934497	0.18634553
1.875	0.43210797	0.368598438	0.286088136	0.195934029	0.140794016
1.900	0.416649063	0.347129648	0.25451998	0.164814449	0.10996978
1.925	0.401157336	0.32447313	0.22907387	0.142669974	0.08856536
$p = 0.65$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.900	0.660132103	0.678188246	0.695872337	0.719579097	0.726270224
1.925	0.634196733	0.641566052	0.655861896	0.682678185	0.689056271
1.950	0.60505412	0.596249681	0.598857485	0.625357671	0.635544443
1.975	0.553780965	0.528463495	0.508488448	0.51601809	0.52612872
2.000	0.502030966	0.45749897	0.406533034	0.370854983	0.351044164
2.025	0.484686222	0.422285902	0.348562554	0.27308146	0.224545304
2.050	0.462161505	0.390733346	0.303495827	0.214821074	0.157629753
2.075	0.444217189	0.364661505	0.270173083	0.177913183	0.118183994
2.100	0.429006676	0.339427911	0.240808993	0.152800881	0.097990353
2.125	0.413027983	0.318845952	0.219229782	0.133040985	0.081293695
$p = 0.550$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
2.000	0.688803125	0.696770626	0.71382072	0.736237266	0.735580453
2.025	0.658296407	0.65766746	0.66872254	0.696903485	0.689671658
2.050	0.59979628	0.596860649	0.603260602	0.631453485	0.620143983
2.075	0.553670469	0.533192032	0.498260674	0.502111613	0.47743589
2.100	0.520166407	0.479016875	0.411146456	0.369866205	0.314017176
2.125	0.4863625	0.448189764	0.347352755	0.266760727	0.205535806
2.150	0.465846719	0.413257342	0.298603038	0.208347322	0.13696518

Fig. 7.2.- Parámetro de orden como función de kT/J y L . Conforme L crece, el decaimiento hacia cero es más pronunciado.

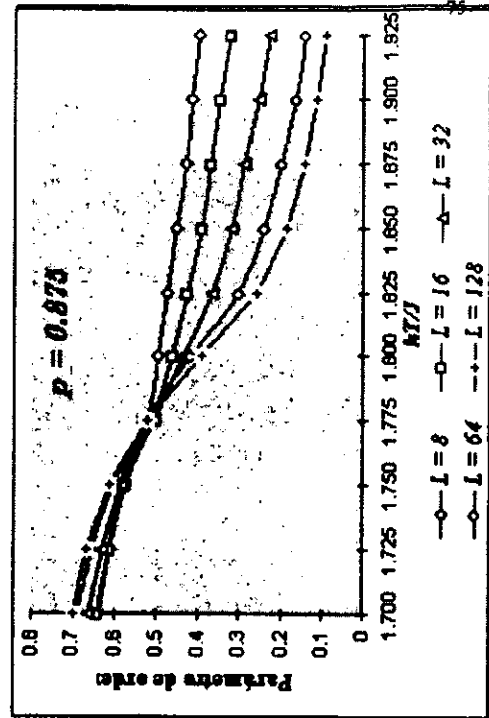
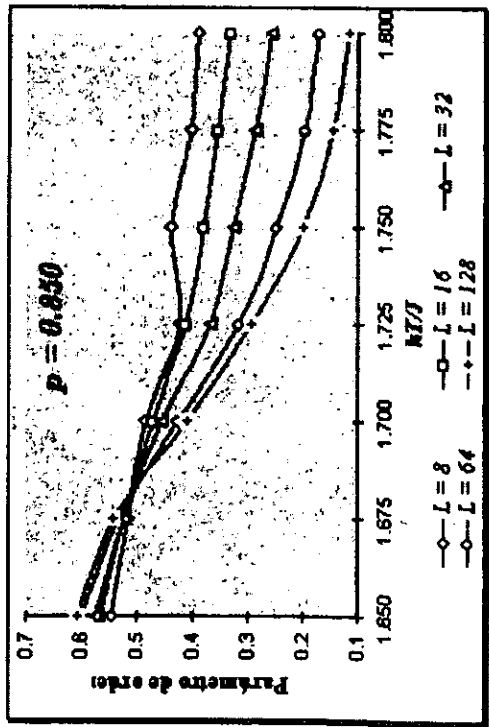
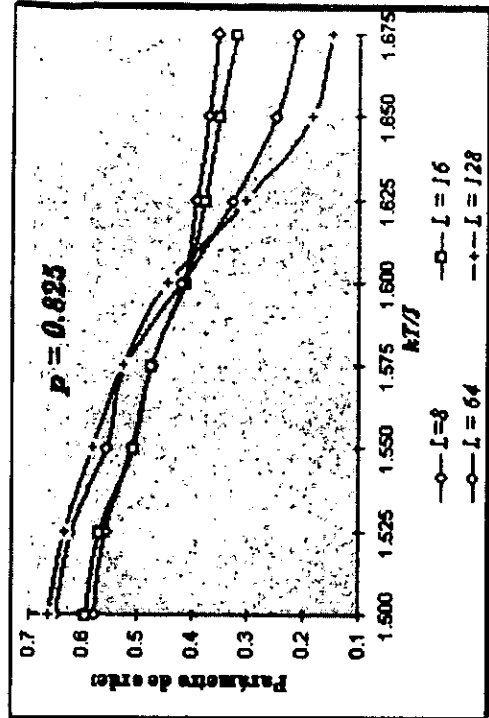
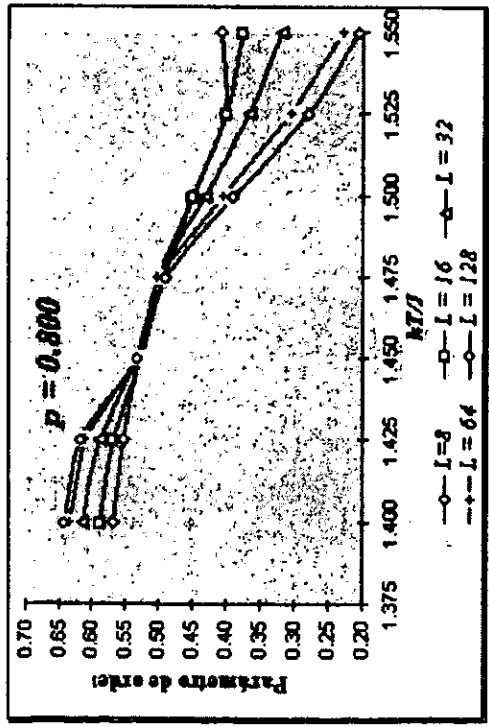
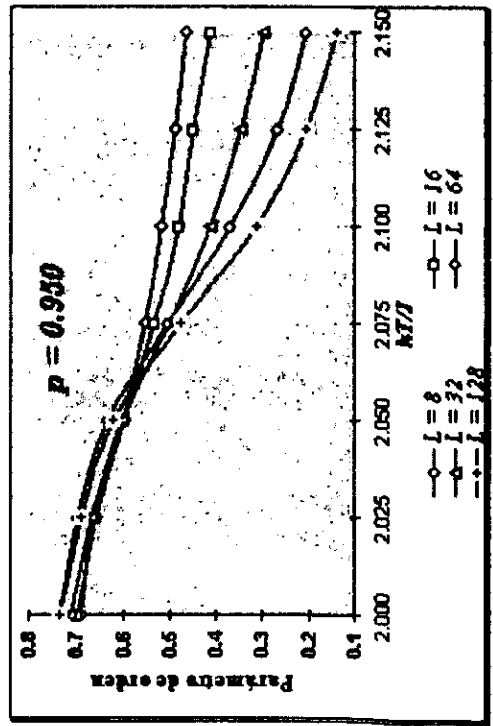
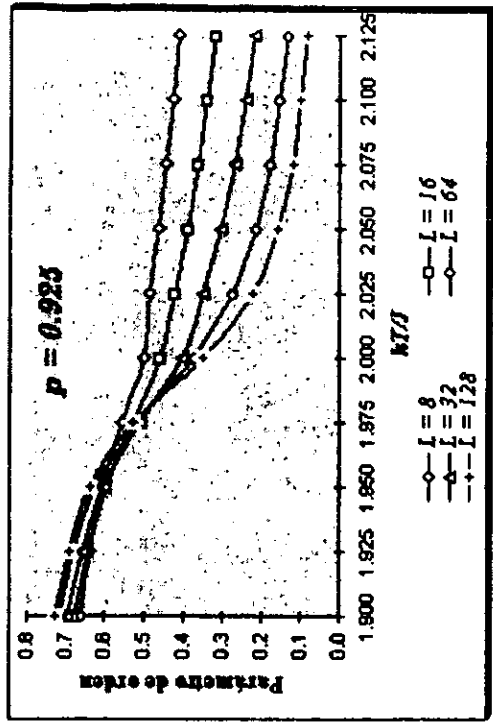
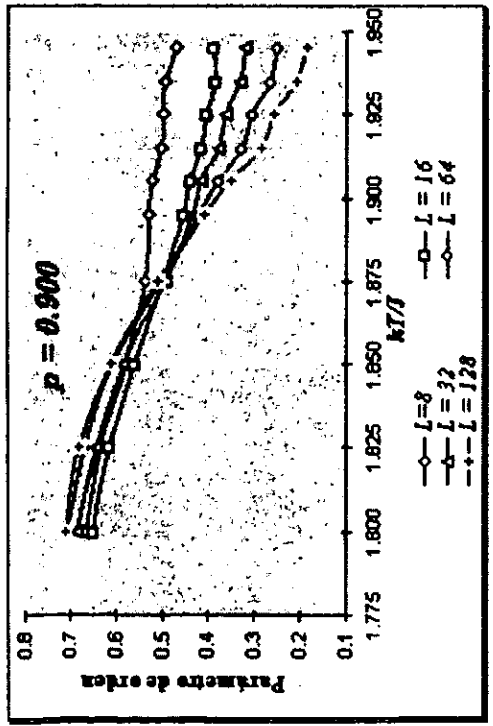


Fig. 7.2.- Continuación.



✓ Energía

Tabla 7.3.- Energía por espín como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L para distintas concentraciones de dilución de la malla. p es la fracción de sitios ocupados.

$p = 0.850$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.650	1.02628297	1.127124103	1.161922704	1.186285241	1.205120357
1.675	1.001065939	1.103875156	1.139456592	1.164129201	1.183171174
1.700	0.969775467	1.077064609	1.114698232	1.138942944	1.158109537
1.725	0.916186874	1.048852969	1.0888163	1.113918641	1.133445121
1.750	0.934717031	1.028633477	1.067539931	1.091395328	1.110185524
1.775	0.900583906	1.010010273	1.04724543	1.069797444	1.088002022
1.800	0.885812814	0.991708867	1.027659276	1.04935626	1.06717048
$p = 0.875$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.700	1.165649376	1.217387851	1.255695322	1.276682528	1.293423232
1.725	1.138293594	1.193134883	1.233587617	1.255590098	1.27290963
1.750	1.111267343	1.168328243	1.209482754	1.232408027	1.250318956
1.775	1.05352125	1.130856915	1.179761211	1.205639322	1.224400608
1.800	1.026288907	1.104182774	1.152804112	1.17762884	1.196037258
1.825	1.004589374	1.080415898	1.125804494	1.149081029	1.167642451
1.850	0.983162969	1.057933633	1.102013644	1.123873085	1.142026648
1.875	0.965435625	1.037721405	1.079991904	1.100343231	1.117925868
1.900	0.948246719	1.018527264	1.058630352	1.078015196	1.094855898
1.925	0.931205033	0.999299654	1.037747865	1.056642169	1.073022462
$p = 0.925$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.800	1.233314915	1.324939525	1.356721273	1.380762363	1.393631615
1.825	1.202134943	1.295191194	1.329068182	1.35437221	1.367627578
1.850	1.169940625	1.262880575	1.298092568	1.324249841	1.338489388
1.875	1.1199152	1.222193039	1.26070466	1.28879413	1.304171519
1.900	1.065584233	1.180277343	1.221949849	1.249765035	1.265541841
1.925	1.044928409	1.153657563	1.191961275	1.216220779	1.230700906
1.950	1.021958237	1.127208628	1.16332809	1.186029476	1.199774891
1.975	1.002767897	1.104097621	1.137653575	1.158264113	1.171579484
2.000	0.983289773	1.08110522	1.112854315	1.132754225	1.145450699
2.125	0.963560368	1.059034161	1.089683095	1.108302371	1.12062051
$p = 0.950$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
2.000	1.29971405	1.370862735	1.40632503	1.430923362	1.439076296
2.025	1.261504687	1.338516172	1.373565898	1.400593475	1.391752888
2.050	1.202078508	1.295035025	1.339363236	1.369789529	1.377915892
2.075	1.14978547	1.252784688	1.291645069	1.323135514	1.333317077
2.100	1.115738594	1.216416992	1.252667736	1.281222781	1.291278741
2.125	1.070276874	1.191346132	1.219036025	1.244456122	1.254448553
2.150	1.046966565	1.162103124	1.188019844	1.211699415	1.221277541

Fig. 7.3.- Continuación.

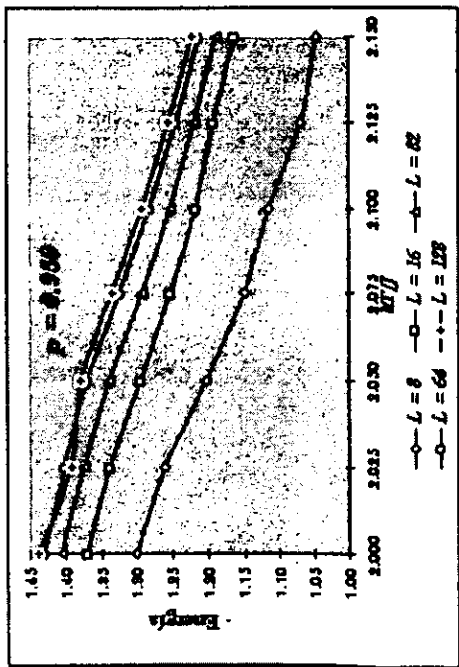
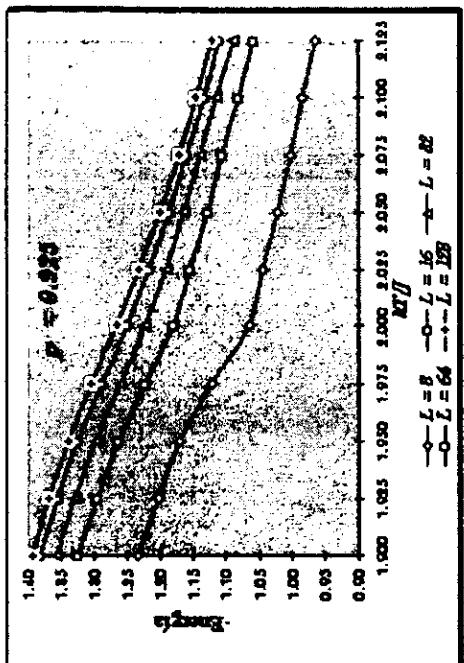
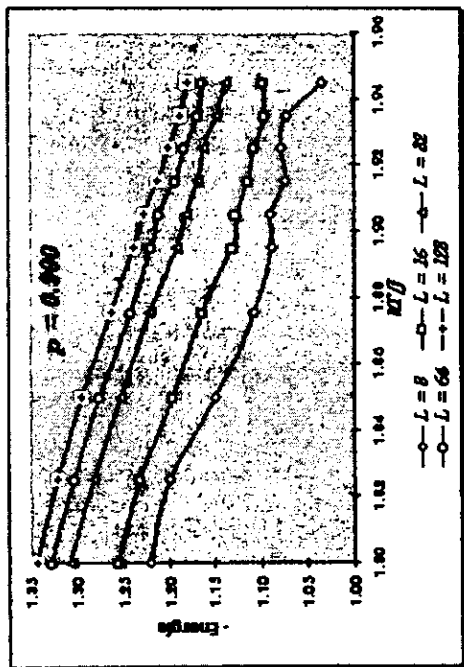
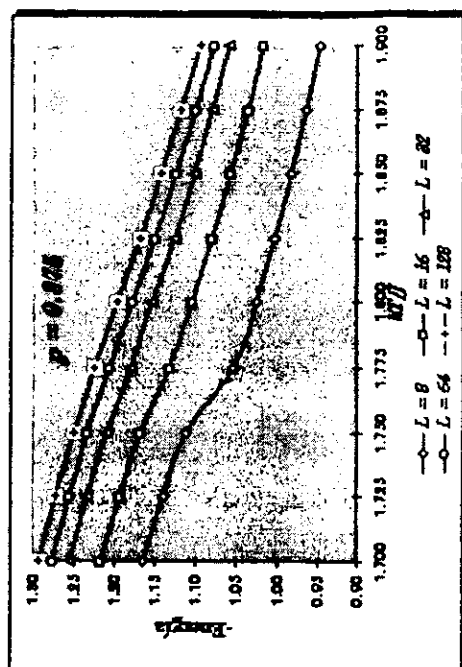
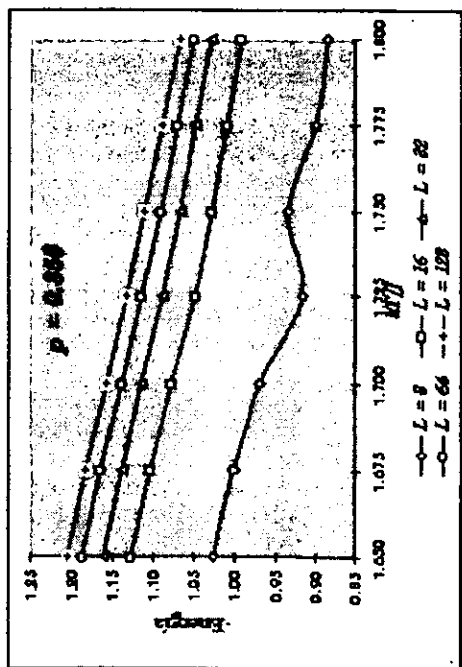
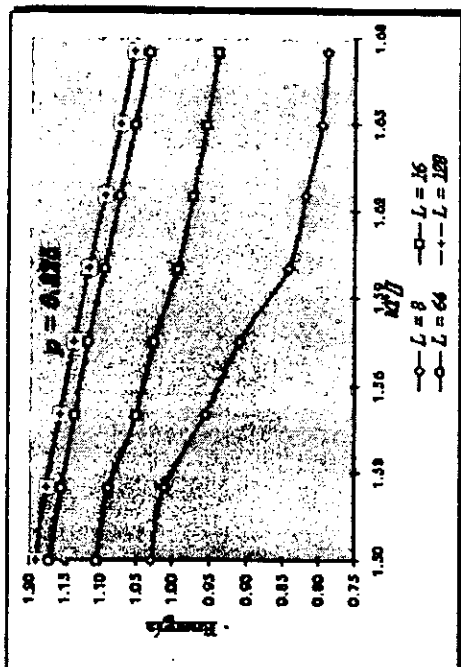
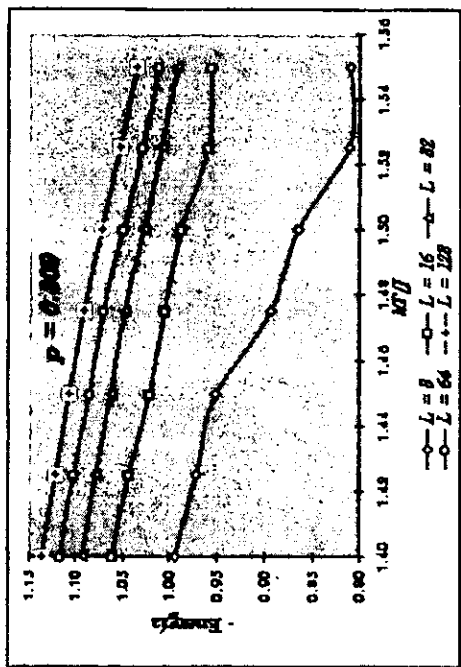


Fig. 7.8.- Energía por espín como función de kT/J y L para distintas concentraciones de llenado de la mallo p .
 Conforme el sistema crece, se vuelve más estable.



➤ Susceptibilidad alternada.

Tabla 7.4.- Susceptibilidad alternada como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L para distintas concentraciones de dilución de la malla. p es la fracción de sitios ocupados.

$p = 0.550$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.650	2.84706238	8.90851838	21.19067353	36.61324525	57.71639129
1.675	3.01363902	10.12453035	27.53424877	72.16011411	114.1087165
1.700	3.131060872	11.31938192	34.29689444	110.4530259	340.531609
1.725	3.085742383	11.3425835	37.03906662	116.4037438	339.7106693
1.750	3.105975283	11.08799475	33.47698621	94.69690311	248.8220535
1.775	3.039940616	10.52851446	29.93938617	71.21965306	168.0162023
1.800	2.980947748	9.935353644	26.54876691	56.40362108	112.219532
$p = 0.575$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.700	2.556488443	6.246901834	11.40877589	11.56228158	12.86954889
1.725	2.858350106	7.641166361	16.5237989	21.61970141	22.65441822
1.750	3.103832831	9.068936645	23.39748129	50.84922624	106.356451
1.775	3.487206368	10.57862913	33.0628319	81.09520967	281.7898879
1.800	3.566721464	11.02624216	36.69117796	119.9814554	415.3832587
1.825	3.605632485	11.02551162	36.60071363	115.8266444	353.4570612
1.850	3.542034009	10.73605879	33.30985094	90.92789515	237.2317283
1.875	3.499399955	10.26023478	30.10212806	70.01062139	156.87097
1.900	3.432251077	9.733876542	26.43154296	53.7577553	102.1621712
1.925	3.312245426	9.185044819	22.91028673	42.47655533	71.13327103
$p = 0.925$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.900	2.655946288	7.098232383	12.43950977	15.88990917	14.53020988
1.925	2.948289651	8.820918323	18.71212737	28.01254967	33.87811489
1.950	3.249515075	10.73401196	28.60886204	54.23600588	63.99740884
1.975	3.550371068	12.63886114	40.65679133	119.2918955	268.7918252
2.000	3.758225451	13.24854815	44.08060067	146.1307739	445.008861
2.025	3.73273651	12.85255685	39.65187577	117.1976014	317.1952318
2.050	3.678527233	12.23960183	34.96740794	84.45153905	189.6097105
2.075	3.632187448	11.51720342	30.30363666	63.82607193	121.0522557
2.100	3.536328002	10.7643212	26.11996036	48.73154614	84.85603078
2.125	3.449791522	10.02717116	22.57594292	38.09082004	59.18834697
$p = 0.950$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
2.000	2.940913104	7.313614023	12.78286714	12.57897808	16.44983833
2.025	3.302293104	9.380735038	19.85983179	24.90879673	30.17841357
2.050	3.807468685	11.65046874	31.66779323	61.37509599	173.1188281
2.075	4.005292195	13.19794687	44.23650229	129.4832021	372.3662009
2.100	4.073573193	13.56004095	45.65747741	143.2184297	431.6584348
2.125	3.946157637	13.19552663	41.14196497	113.0432031	284.9968013
2.150	3.903246791	12.62062223	35.09525419	80.35515626	155.3708564

Fig. 7.A.- Susceptibilidad alternada como función de kT/J y L para distintas concentraciones de llenado de la malla p . La localización de la temperatura en la que se presenta el máximo permite una determinación preliminar de T_0 .

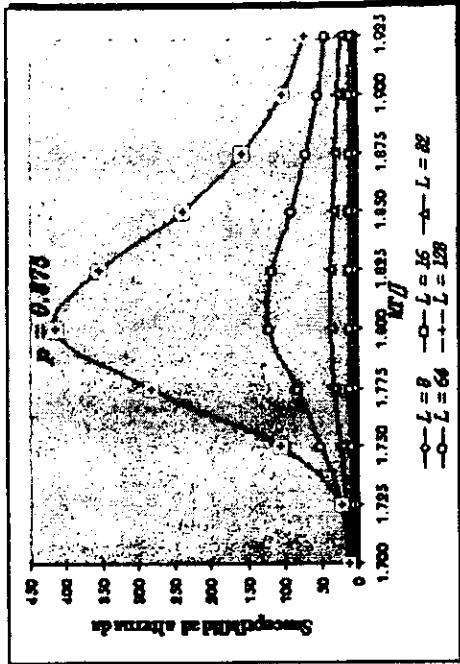
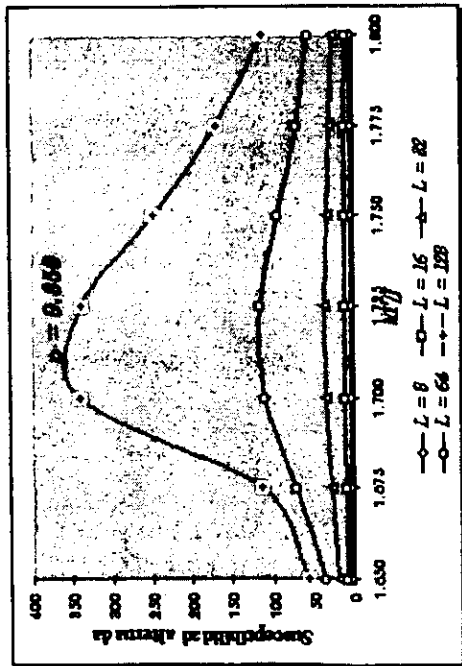
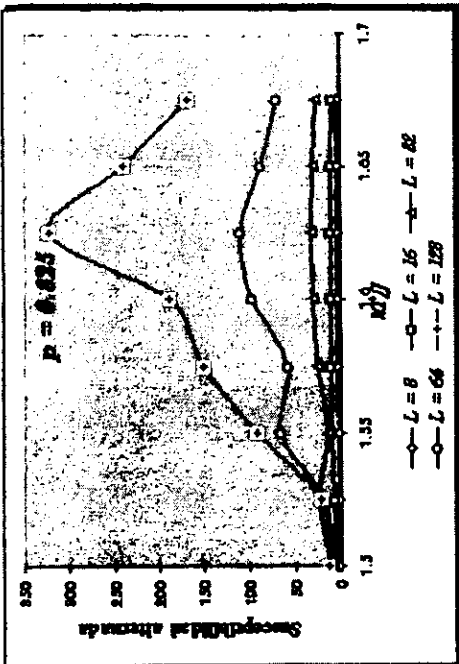
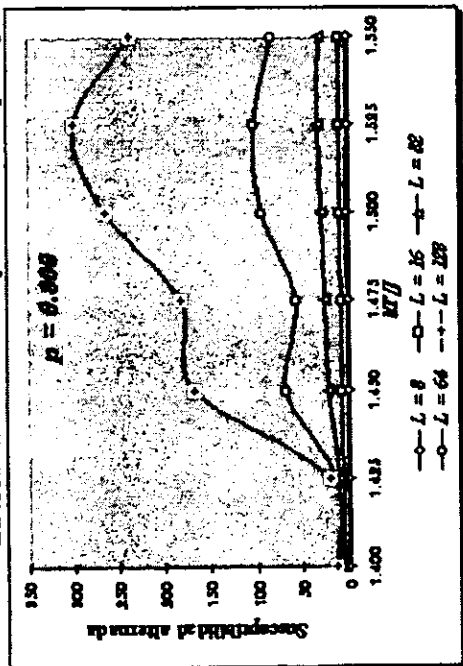
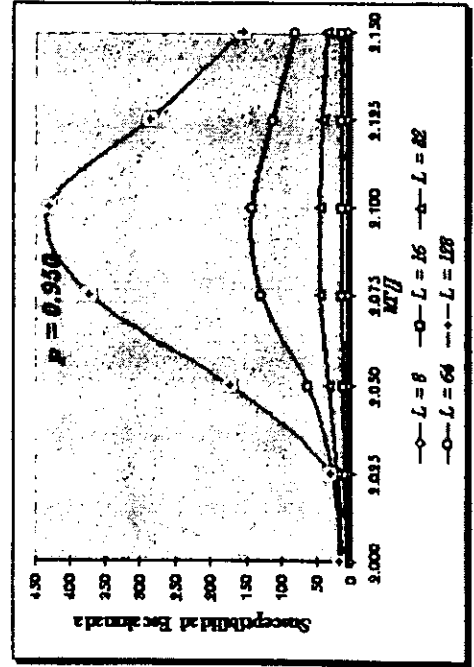
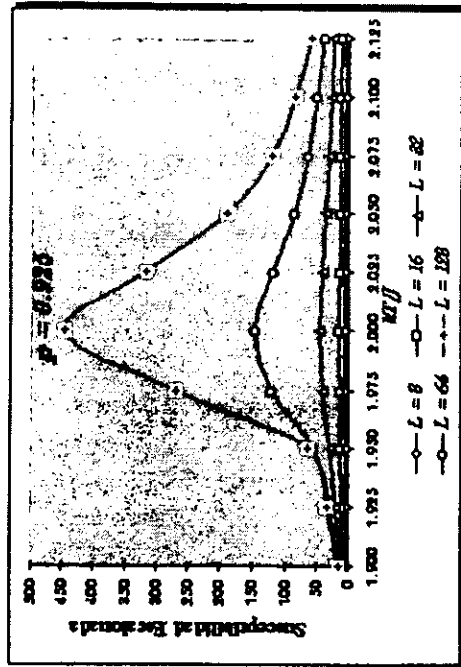
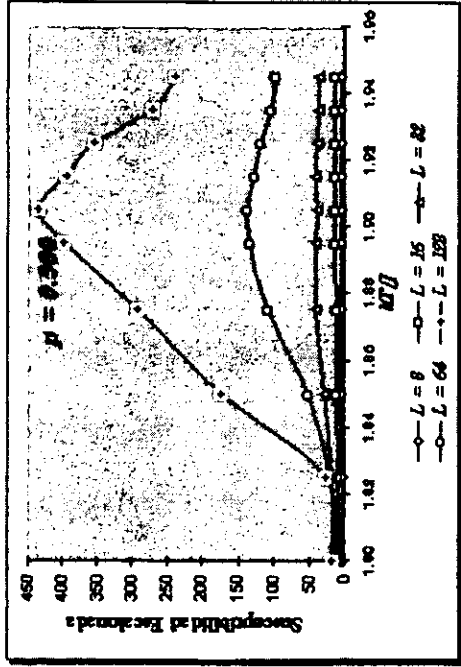


Fig. 7.4.- Continuación.



➤ Calor específico.

Tabla 7.5.- Calor específico como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L , para distintas concentraciones de dilución de la malla. p es la fracción de sitios ocupados.

$p = 0.856$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.850	1.70016606	1.981432747	2.066118617	2.155123128	2.280727035
1.875	1.743761873	2.054464872	2.224863337	2.403116615	2.608724677
1.900	1.756395342	2.099395783	2.338051165	2.56607845	2.983709538
1.925	1.728222898	2.06082025	2.319712146	2.553436729	2.883143417
1.950	1.723186515	2.087917035	2.331662064	2.549514771	2.786819669
1.975	1.754432978	2.130743949	2.357564597	2.514621494	2.707690556
1.990	1.7801131	2.136402275	2.377578032	2.520431227	2.687123548
$p = 0.375$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.900	2.065534346	2.217785482	2.258545203	2.222886024	2.276544942
1.925	2.143252129	2.358879235	2.489650817	2.5063632	2.575515612
1.950	2.212595325	2.488494383	2.692213322	2.835683496	3.01195434
1.975	2.194259338	2.519131001	2.829165601	3.106665019	3.487903303
1.990	2.170147119	2.51793508	2.894581313	3.237359745	3.839346186
1.925	2.158088672	2.509185044	2.864884655	3.193528231	3.624242746
1.850	2.151887047	2.529363785	2.875279789	3.150506675	3.42429037
1.875	2.167604333	2.541070359	2.87503433	3.095428861	3.299900885
1.900	2.171433503	2.549720168	2.855104496	3.060819242	3.252869453
1.925	2.185456275	2.547080433	2.847921703	3.006022896	3.183213642
$p = 0.225$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.900	2.784722843	3.302858372	3.469831506	3.534023475	3.633127166
1.925	2.903825517	3.539571777	3.814454673	3.941991544	4.140609636
1.950	2.979786267	3.727126068	4.177896432	4.482975498	4.761561799
1.975	2.95469015	3.749050085	4.403471636	4.994999251	5.695094887
2.000	2.84799665	3.629538276	4.32524189	5.000820118	5.926832423
2.025	2.846324757	3.60794246	4.201151756	4.749234878	5.388225887
2.050	2.832048242	3.603745973	4.139438277	4.538598265	4.942502266
2.075	2.854466751	3.560008467	4.049981751	4.364789704	4.680484527
2.100	2.841025126	3.513903105	3.935879042	4.253046798	4.526902185
2.125	2.819576287	3.479013802	3.884204528	4.112443621	4.343818341
$p = 0.956$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
2.000	3.425682462	4.050776146	4.362198798	4.336126895	4.571049884
2.025	3.532518895	4.363762951	4.833536307	4.896165888	5.060648236
2.050	3.552301699	4.545111349	5.247353783	5.594216047	6.415080322
2.075	3.421457377	4.481695816	5.426210679	6.308808768	7.368417952
2.100	3.355888223	4.411258091	5.330499481	6.225878253	7.184658972
2.125	3.259525277	4.332285129	5.04946881	5.707798377	6.305530542
2.150	3.239807267	4.257187421	4.845580618	5.358928514	5.761692218

Fig. 7.5.-Calor específico como función de kT/J y L para varias concentraciones de llenado de la malla p .

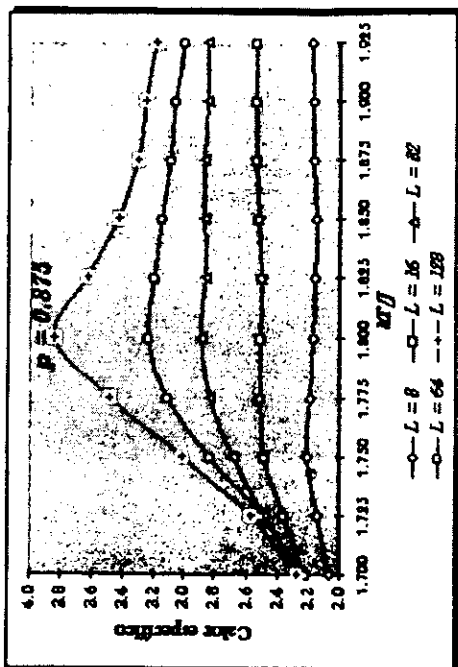
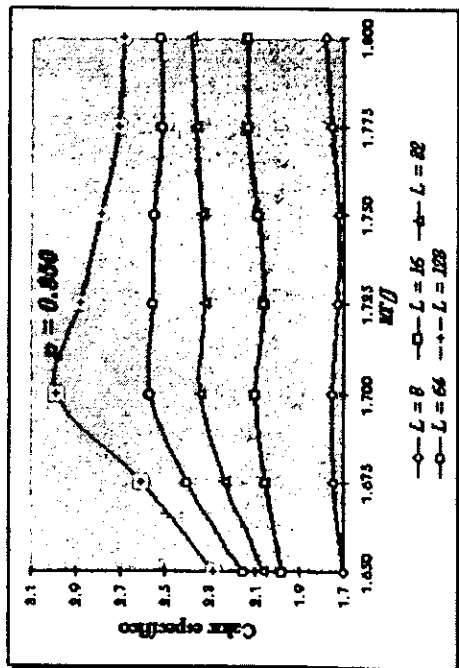
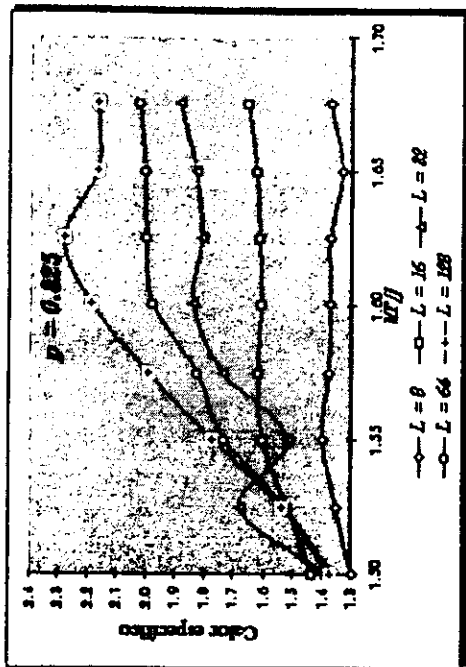
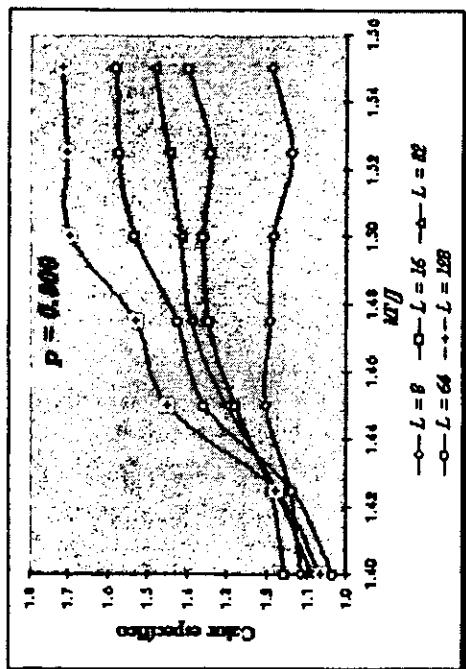
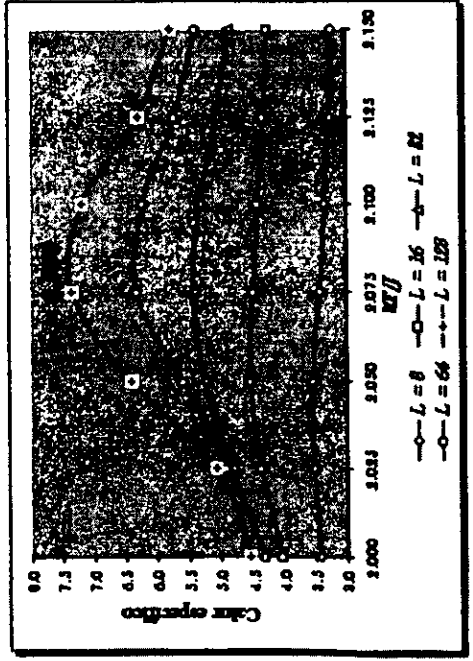
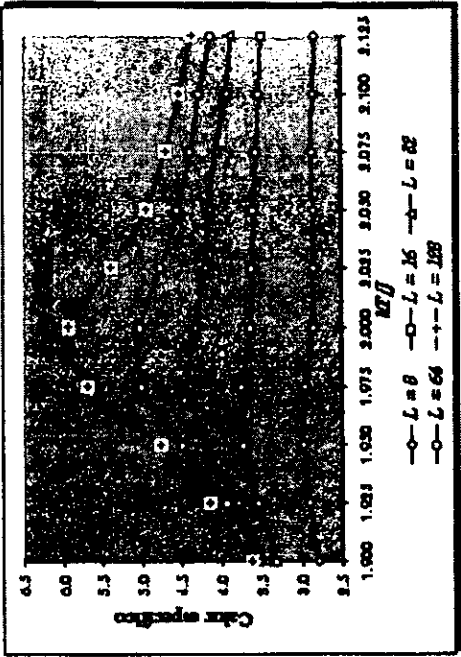
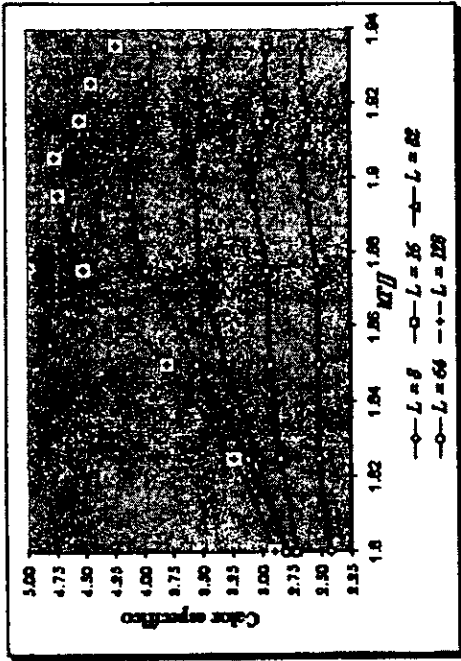


Fig. 7.5.- Continuación.

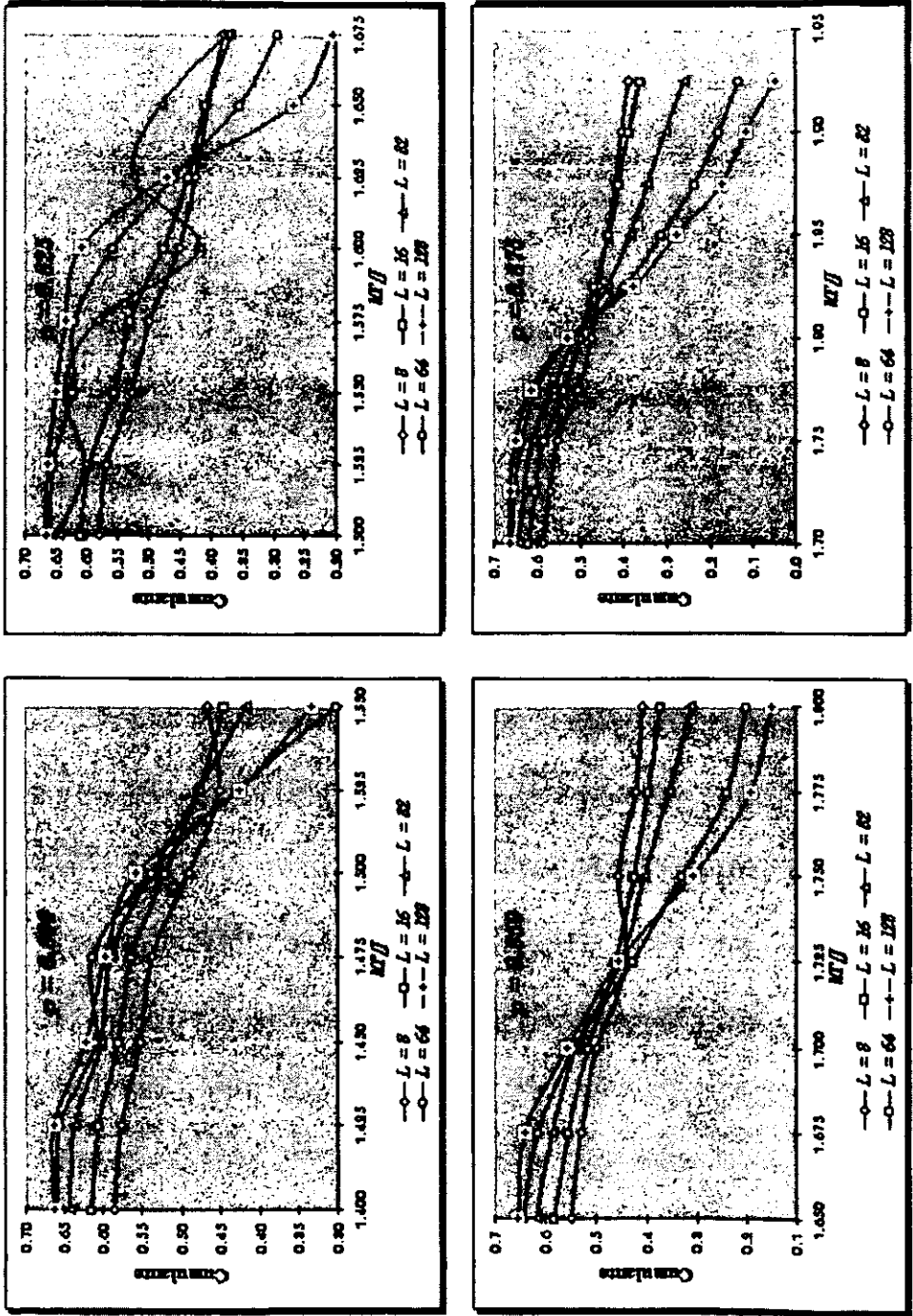


➤ **Cumulante de orden 4.**

Tabla 7.6.- Cumulante de orden 4 como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L para distintas concentraciones de dilución de la malla. p es la fracción de sitios ocupados.

$p = 0.950$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.650	0.5503270	0.5825766	0.6165148	0.6443410	0.6557935
1.675	0.5285184	0.5545258	0.5867715	0.6160346	0.6408699
1.700	0.4992103	0.5154675	0.5407800	0.5437959	0.5581521
1.725	0.4381411	0.4617887	0.4504551	0.4273185	0.4562862
1.750	0.4545891	0.4248506	0.4042641	0.3263726	0.3077482
1.775	0.4215755	0.3966201	0.3534319	0.2405560	0.1906634
1.800	0.4063716	0.3696045	0.3094796	0.1994199	0.1480906
$p = 0.875$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.700	0.5877412	0.6188806	0.6437156	0.6597261	0.6646314
1.725	0.5713929	0.6033328	0.6313414	0.6538160	0.6627653
1.750	0.5549041	0.5828318	0.6112635	0.6381847	0.6511655
1.775	0.5067522	0.5371147	0.5637293	0.6002145	0.6145559
1.800	0.4759596	0.5002924	0.5129683	0.5289980	0.5310531
1.825	0.4569602	0.4661395	0.4378629	0.3979745	0.3786885
1.850	0.4375670	0.4352703	0.3853137	0.3107625	0.2749399
1.875	0.4191015	0.4114147	0.3455399	0.2352771	0.1735612
1.900	0.4042502	0.3883438	0.3009933	0.1797391	0.1146992
1.925	0.3892629	0.3625284	0.2596366	0.1331941	0.0462130
$p = 0.825$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
1.800	0.5944828	0.6191154	0.6445223	0.6589737	0.6645454
1.825	0.5804493	0.6024044	0.6317128	0.6528864	0.6616034
1.850	0.5625385	0.5777590	0.6065696	0.6371350	0.6555891
1.875	0.5252173	0.5325209	0.5498698	0.5805732	0.6167463
1.900	0.4840142	0.4725315	0.4601725	0.4562910	0.4863876
1.925	0.4697368	0.4399126	0.3981578	0.3275265	0.3189492
1.950	0.4492766	0.4077623	0.3419343	0.2361694	0.2064235
1.975	0.4316528	0.3798929	0.2961752	0.1728205	0.1110824
2.000	0.4173855	0.3489398	0.2511495	0.1346330	0.0788005
2.125	0.4015615	0.3235634	0.2195255	0.1037203	0.0536592
$p = 0.950$					
kT/J	$L = 8$	$L = 16$	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
2.000	0.5932376	0.6202119	0.6446238	0.6602265	0.6643404
2.025	0.5769022	0.6019631	0.6306195	0.6543731	0.6522646
2.050	0.5403393	0.5692918	0.6013385	0.6349681	0.6438406
2.075	0.5099067	0.5270762	0.5342181	0.5694320	0.5840610
2.100	0.4824570	0.4843006	0.4582266	0.4593108	0.4453704
2.125	0.4591328	0.4616962	0.3886590	0.3177099	0.2831773
2.150	0.4399606	0.4294847	0.3258963	0.2269320	0.1389751

Fig. 7.6.- Cumulante de Binder como función de hT/j y L para distintas concentraciones de llenado de la malla p .



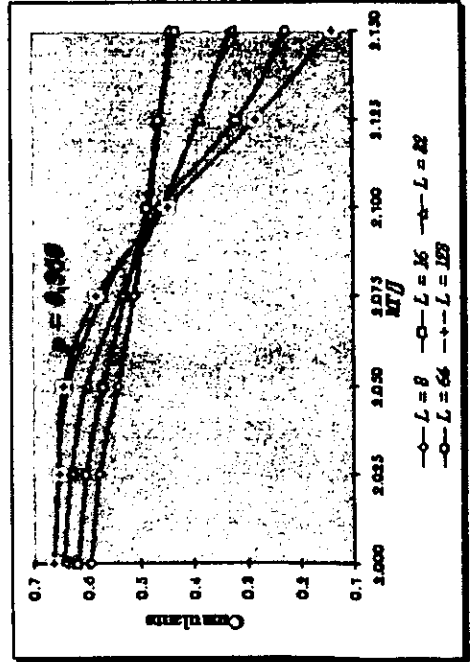
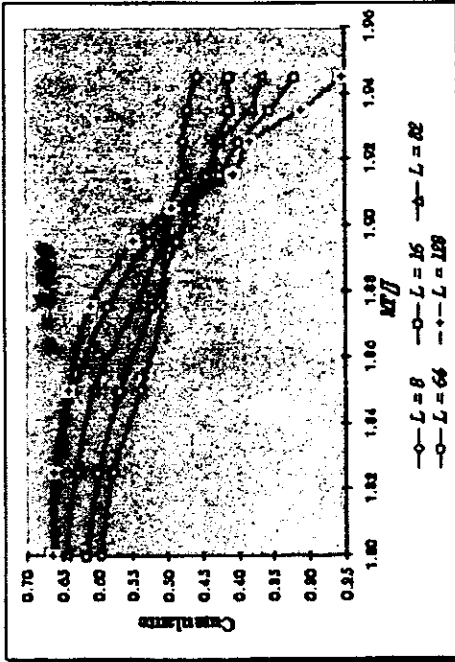
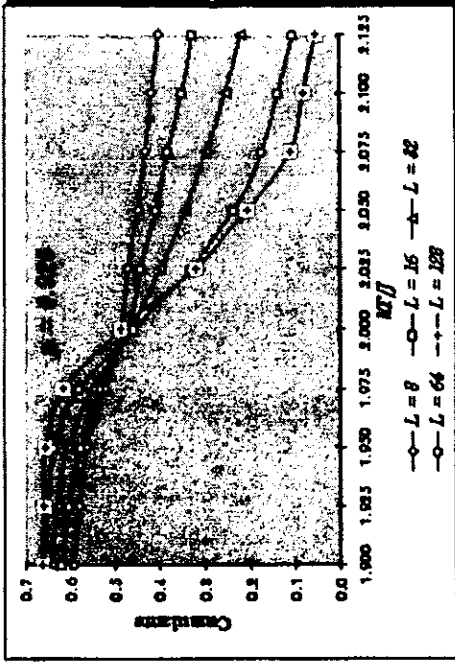


Fig. 7.6.- Continuación.

➤ Razones de cumulantes.

Tabla. 7.7.- Razones de cumulantes como función de la temperatura kT/J para distintas concentraciones de dilución de la malla. p es la fracción de sitios ocupados.

$p = 0.850$						
kT/J	$c8/c32$	$c16/c64$	$c128/c32$	$c64/c16$	$c32/c16$	$c64/c128$
1.050	0.892641993	0.904143303	1.063710879	1.106019363	1.058255344	0.982536423
1.075	0.900722683	0.900153666	1.092196707	1.11092144	1.058150045	0.961247517
1.700	0.923130108	0.947906191	1.032124154	1.054956714	1.049105909	0.974279054
1.725	0.972663202	1.080666295	1.012944908	0.925355038	0.975457173	0.936514188
1.750	1.124485454	1.301734888	0.761255328	0.768205576	0.951544143	1.060518307
1.775	1.19280546	1.648764113	0.539462906	0.606514899	0.891109402	1.261678959
1.800	1.31308041	1.853398282	0.478514577	0.539549437	0.837326385	1.346608324
$p = 0.875$						
kT/J	$c8/c32$	$c32/c64$	$c128/c64$	$c64/c8$	$c128/c32$	$c64/c16$
1.700	0.913044829	0.975731595	1.007435358	1.122477206	1.032492299	1.065998999
1.725	0.905045828	0.965625497	1.013687796	1.14424943	1.049773229	1.083673886
1.750	0.907798519	0.957815974	1.020340193	1.150081068	1.065277904	1.09497234
1.775	0.898928262	0.939213065	1.023893791	1.18443393	1.090161359	1.11747919
1.800	0.927853826	0.969697995	1.003884892	1.111434668	1.0352552	1.057377646
1.825	1.043614794	1.100228532	0.951539609	0.870917205	0.864856328	0.853766952
1.850	1.135612359	1.239897671	0.884726761	0.710205523	0.713548208	0.713952916
1.875	1.212888873	1.468650795	0.737688453	0.561384533	0.502289895	0.571873343
1.900	1.343053815	1.674612257	0.63814273	0.444623404	0.381068947	0.462834993
1.925	1.499260505	1.949310067	0.346959813	0.342170035	0.177991084	0.367403216
$p = 0.925$						
kT/J	$c8/c32$	$c32/c128$	$c64/c16$	$c128/c64$	$c32/c64$	$c64/c8$
1.800	0.922361947	0.96986949	1.064379542	1.00845502	0.978069756	1.108482377
1.825	0.91884992	0.95482105	1.083800854	1.013351481	0.967569325	1.124794869
1.850	0.927409519	0.925228386	1.102769494	1.028964177	0.952026865	1.132607015
1.875	0.955166578	0.891565693	1.090235467	1.062305825	0.947115429	1.105396208
2.000	1.051810418	0.946102286	0.96563077	1.065959303	1.008506533	0.942722377
2.025	1.179775448	1.248342497	0.744526134	0.97381197	1.215650866	0.697255233
2.050	1.313926892	1.656470063	0.57918395	0.874048401	1.447835009	0.525665803
2.075	1.457424	2.666266472	0.454918874	0.642761668	1.713773885	0.40036911
2.100	1.661900099	3.187154911	0.385834442	0.58529889	1.865438232	0.32256275
2.125	1.829225437	4.091107004	0.320562294	0.517345167	2.116514436	0.258292344
$p = 0.950$						
kT/J	$c8/c32$	$c16/c64$	$c64/c32$	$c128/c64$	$c32/c128$	$c16/c8$
2.000	0.920284979	0.939392618	1.02420435	1.006231043	0.97032154	1.04546964
2.025	0.914818207	0.919908077	1.037667088	0.996777832	0.966815461	1.043440465
2.050	0.898560983	0.896567601	1.05592464	1.013973215	0.933986488	1.05358216
2.075	0.954491621	0.925617457	1.065916711	1.025690513	0.914661482	1.033671846
2.100	1.052878641	1.054407168	1.002366078	0.969649309	1.02886631	1.003821273
2.125	1.181325532	1.453200546	0.817451545	0.891307762	1.372493487	1.005583134
2.150	1.350001826	1.892570021	0.696331931	0.612408563	2.344997773	0.976189004

Fig. 7.7.- Razones de cumulantes como función de kT/J y L para varias concentraciones de llenado de la maila p .

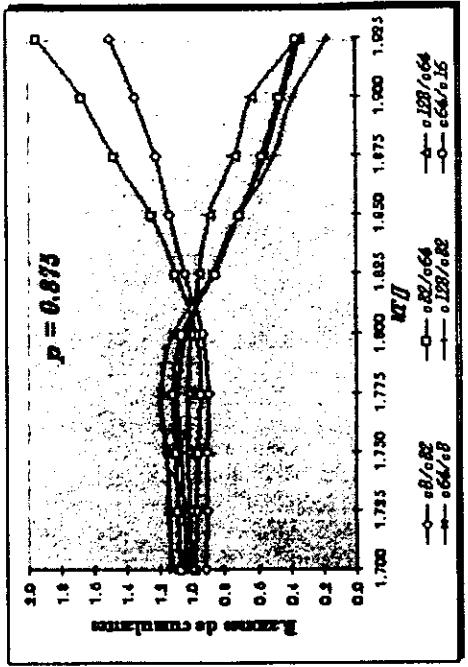
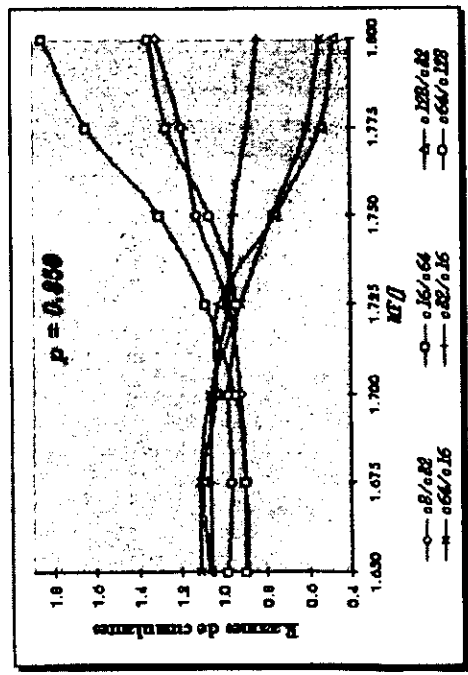
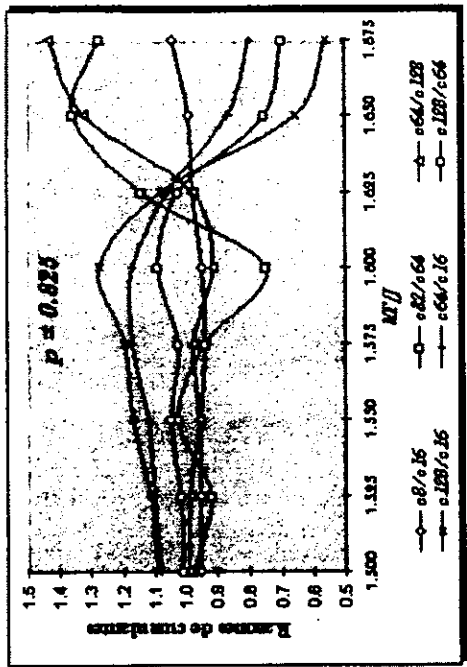
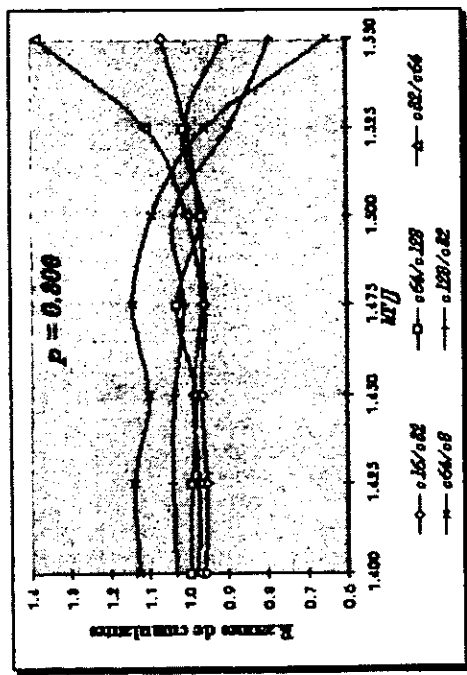
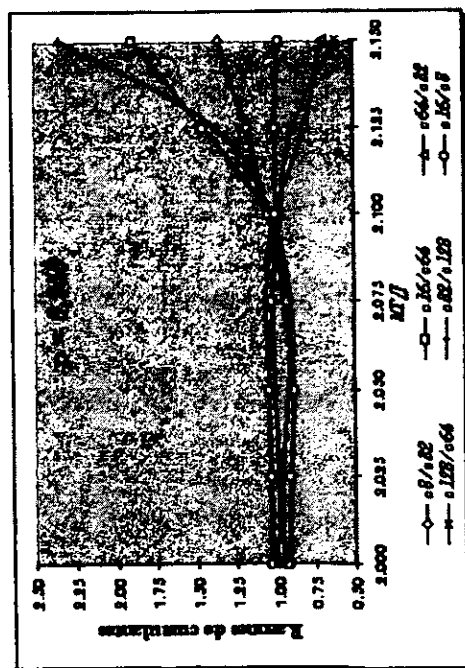
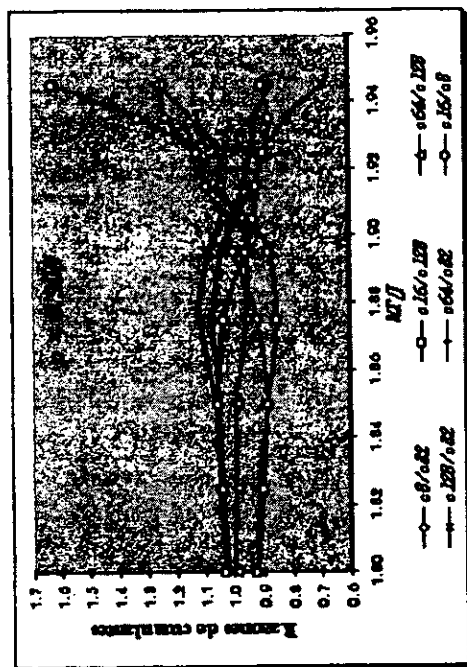
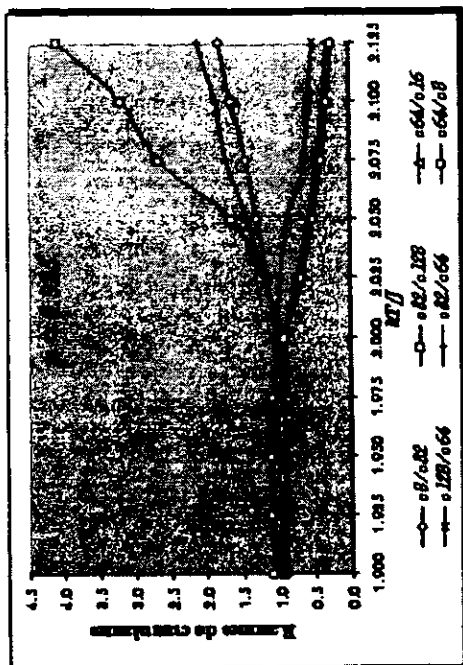


Fig. 7.7.- Continuación.



4.- Escalamiento para tamaño finito.

► Parámetro de orden

La relación de escalamiento para tamaño finito de la malla para el parámetro de orden se lee como

$$M_{\text{má}} = L^{-\beta/\nu} X^0(L^{1/\nu}),$$

en tanto que la correspondiente al escalamiento de la susceptibilidad es

$$\chi T = L^{1/\nu} Y^0(L^{1/\nu})$$

con X^0 y Y^0 funciones de escala que tienen un comportamiento asintótico determinado por la forma de la hipótesis de escalamiento termodinámica ($L \rightarrow \infty$), de ahí que el comportamiento asintótico de la función de escala X^0 está dado por

$$X^0(x) \approx Bx^\beta,$$

relación que se satisface si $x \gg 1$ y $T \cong T_c$.

En la tabla 7.8 se muestra el escalamiento del parámetro de orden que resulta de la dinámica tradicional para el modelo de Ising, realizando el ajuste para $p = 0.950$ y tres distintos valores de β , incluyendo el correspondiente al sistema sin diluir. Los mismos resultados se muestran gráficamente en la figura 7.8.

Tabla. 7.8.- Función de escala X^0 para el parámetro de orden en el modelo de Ising bidimensional. El valor de ν se supuso, en todos los casos, igual al del sistema sin diluir: $\nu = 1.0$.

ν	l/β	$\nu = 1.0$	$\nu = 1.1$	$\nu = 1.15$	$\nu = 1.2$
$p = 0.950$		$\beta = 0.125$	$\beta = 0.150$	$\beta = 0.170$	$\beta = 0.180$
$l = 8$	0.74	0.893267138	0.940905069	0.884027151	
	0.54	0.853704819	0.899232892	0.844874066	
	0.34	0.777839541	0.819321718	0.769793541	
	0.14	0.718021764	0.756313861	0.710594522	
$l = 16$	1.48	0.985382469	1.056095238	0.971815953	
	1.08	0.930082241	0.996826569	0.917277086	
	0.68	0.844088425	0.904661686	0.832467212	
	0.28	0.754047403	0.808159163	0.743665854	
$l = 32$	2.96	1.100862042	1.200496549	1.081949486	
	2.16	1.03131114	1.124650881	1.013593453	
	1.36	0.930355031	1.014557648	0.914371746	
	0.56	0.768423005	0.837969819	0.755221676	
$l = 64$	5.92	1.238198556	1.373866594	1.2127153	
	4.32	1.172047285	1.300467202	1.147925482	
	2.72	1.061973943	1.178333247	1.040117551	
	1.12	0.844447711	0.936972907	0.827068207	
$l = 128$	11.84	1.349060499	1.523019328	1.31672579	
	8.64	1.264863398	1.427965168	1.234546751	
	5.44	1.137349079	1.284008116	1.110088736	
	2.24	0.875621283	0.98853101	0.854634115	

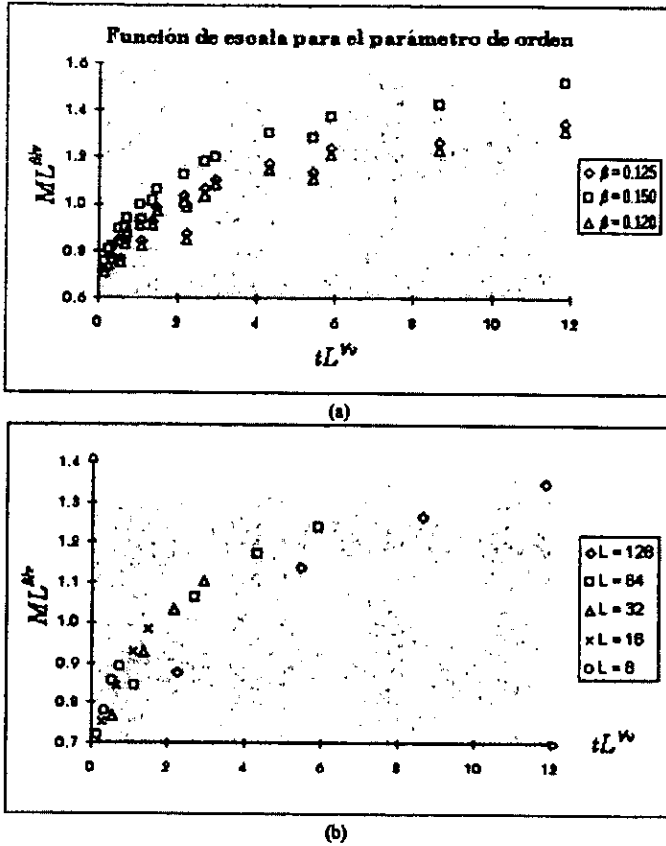


Fig. 7.8.- Función de escala para el parámetro de orden del modelo de Ising 2d y dinámica de Glauber. Resultados para una concentración $p = 0.950$ (a) Se muestra el ajuste para 3 valores de β , incluyendo $\beta = 1/8$. (b) Para el ajuste $\beta = 1/8$, se muestra la función de escala: los datos para distintos tamaños L caen sobre una misma curva.

➤ Susceptibilidad.

El análisis del escalamiento para la susceptibilidad sigue las mismas líneas que el del parámetro de orden, y se muestra en la tabla 7.9. En la figura 7.9 se muestra la función de escala para la susceptibilidad magnética a una concentración $p = 0.950$ y con los valores de los exponentes iguales a los del sistema sin diluir: $\gamma = 7/4$, $\nu = 1$.

Tabla. 7.9.- Función de escala χ^0 para la susceptibilidad en el modelo de Ising 2d. El valor de ν se supuso, en todos los casos, igual al del sistema sin diluir: $\nu = 1.0$.

ν	$\chi^0 \chi_1$
$p = 0.950$	
0.08	0.107045405
0.26	0.103697178
0.48	0.102569566
0.72	0.10593782
0.92	0.103090052
0.92	0.098598611
0.24	0.10604726
1.04	0.095559214
1.04	0.081514699
0.48	0.098889719
2.08	0.078060171
3.68	0.055487965
0.98	0.088618171
4.16	0.058508982
7.36	0.031897167

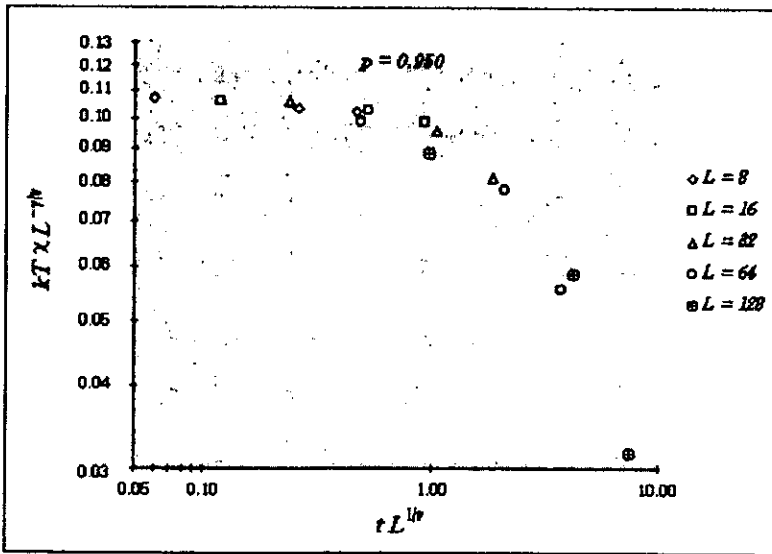


Fig. 7.9.- Función de escala para la susceptibilidad en el modelo de Ising 2d y dinámica de Glauber.

5.- Diagrama de fases T vs. p .

A partir de las intersecciones de las razones de cumulantes, es posible estimar la localización de la temperatura crítica para una concentración dada de espines. El diagrama T vs. p que así se obtiene se muestra en la tabla y figura 7.10.

Tabla 7.10.- Diagrama de fase T_c vs. p para el modelo de Ising diluido con dinámica convencional.

p	$T_c(p)$
0.800	1.510
0.850	1.715
0.875	1.810
0.900	1.908
0.925	2.003
0.950	2.093
1.000	2.269

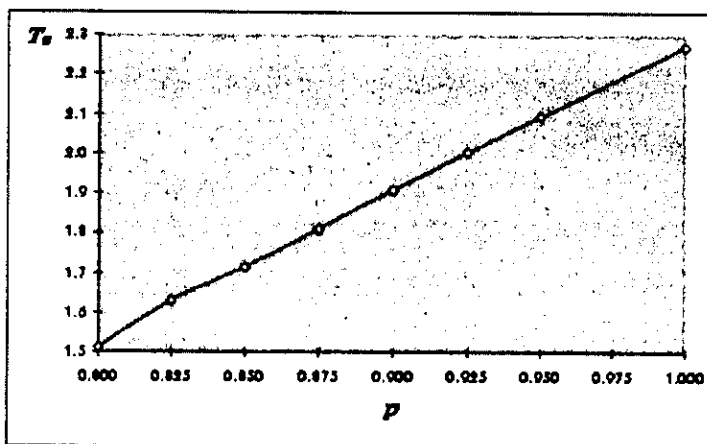


Fig. 7.10.- Diagrama T_c vs. p para el modelo de Ising $2d$. Resultados de dinámica convencional para el modelo de Ising.

(b).- Resultados para dinámica de cúmulos.

1.- Código en FORTRAN para el algoritmo con dinámica de cúmulos.

```

PARAMETER(L=40, L2=L*L, Q=2, EINI=-2.1, EFIN=-0.40,
MAGI=0.00, MAGF=1.00, NT=200, NPROB=100)
DIMENSION LIST(0:L2), IS(L2)
REAL CORR(L), CR(L), DCR(L)
DATA T0, IBM, MCSTEP, NOEQ, PROB, MAX, NCORR
/1.72, 1, 101000, 1000, 0.85, 2147483647, 10000/
REAL MG, MAV, SUSC, CUMULANTE, TEM(NT)

```



```

REAL PMAG(NT), PE(NT), PCE(NT), PSUSC(NT), PCUM(NT)
DOUBLE PRECISION MAGk, Ek, CEK, SUSCK, CUMk, Ec, MAGc, FBk,
ZT(NT)
INTEGER H(Q,Q), PH(Q,Q), R
IMP=50000
CONC=L2-INT(PROB*L2+0.5)
OPEN(UNIT = 20, FILE = 'sw', STATUS = 'old')
WRITE(20,*) ('SALIDA DEL PROGRAMA SWN.F ')
WRITE(20,*) ('LONGITUD LINEAL DE LA MALLA'),L
WRITE(20,*) 'SE HAN REALIZADO CONFIGURACIONES HACIA EL
EQUILIBRIO',NOEQ
WRITE(20,*) ('          PASOSMC          TEMP          MAGNETIZACION
SUSC.          CUMULANTE          ENERGIA          CE')
WRITE(20,*) 'P = ',1-CONC/L2
WRITE(20,*)
WRITE(21,*) 'MCS = ',MCSTEP-NOEQ
WRITE(21,*) 'EQ = ',NOEQ
WRITE(21,*) 'P = ',1-CONC/L2
WRITE(21,*) 'NPROB = ',NPROB
WRITE(21,*) 'L = ',L
WRITE(21,*) ('          P. DE O.          ENERGIA          SUSC
+          CAL ESP          CUMULANTE')
WRITE(21,*) (' KT/J ')
WRITE(21,*)
OPEN(UNIT = 22, FILE = 'corr', STATUS = 'old')
WRITE(22,*) (' SALIDA DEL PROGRAMA SWN.F ')
WRITE(22,*) 'P = ',1-CONC/L2
WRITE(22,*) 'MCS(EFF) = ',MCSTEP-NOEQ
WRITE(22,*) 'EQ = ',NOEQ
WRITE(22,*) 'NPROB = ',NPROB
WRITE(22,*) 'NCORR = ',NCORR
WRITE(22,*) 'L = ',L
WRITE(22,*) 'T = ',T0
WRITE(22,*) ('          R          CORR(R)          DELTA CORR')
WRITE(22,*)
WRITE(12,*) 'HISTOGRAMAS DE F. S. PARA EL MODELO DE ISING  PROG
SW.F'
WRITE(12,*) 'T0, MCS, P, L, NOEQ, NOPROB',T0, MCSTEP, PROB, +
L, NOEQ, NPROB
WRITE(12,*) '          ENERGIA          MAGNETIZACION H(E,M)'
WRITE(12,*)
LIST(0)=0
RAND = 37
DO 16 K = 1,NT
PE(K)=0
PCE(K)=0
PSUSC(K)=0
PCUM(K)=0
16 PMAG(K)=0.
DO 14 K = 1,L
CR(K)=0

```

```

DCR(K)=0
14 CORR(K)=0
do 29 K = 1,Q
do 29 I = 1,Q
    PH(K,I) = 0
29 continue
IPR=(1.0-2.0*EXP(-2.0/T0))*2147483647.0    !#=2EXP(31)
DO 15 R = 1,NPROB
DO 1 I = 1,L2
1 IS(I)= 1
EMPTY = 0
DO WHILE(EMPTY.LT.CONC)
    I = INT(RAN(RAND)*L2)
    IF(IS(I).NE.0.AND.I.NE.0)THEN
        IS(I) = 0
        EMPTY=EMPTY+1
    END IF
END DO
MG = 0.
MAV = 0.
SUSC = 0.
CUMULANTE = 0.
ENAV = 0.
CE = 0.
do 28 K = 1,Q
do 28 I = 1,Q
    H(K,I) = 0
28 continue
DO 2 MC = 1,MCSTEP
LIST(1)=1
DO 3 I = 2,L2
IF(IS(I-1).NE.IS(I))GOTO 4
IBM = (1-2*RAN(RAND))*MAX
IF(IBM.GT.IPR)GOTO 4
LIST(I) = LIST(I-1)
GOTO 5
4 LIST(I) = I
5 IF(I.LE.L)GOTO 3
MB = I-L
IF(IS(MB).NE.IS(I))GOTO 3
IBM = (1-2*RAN(RAND))*MAX
IF(IBM.GE.IPR)GOTO 3
6 MB = LIST(MB)
IF(MB.NE.LIST(MB))GOTO 6
MA = LIST(I)
ISMALL=MINO(MA,MB)
LIST(MAX0(MA,MB)) = ISMALL
LIST(I) = ISMALL
3 CONTINUE
INC = 0
DO 7 I = 1,L2

```

```

IF(IS(I).NE.0)THEN
IF(I.EQ.LIST(I))THEN
  INC = INC + 1
  IS(I) = INC
ELSE
  MA = LIST(I)
8  MA = LIST(MA)
  IF(MA.NE.LIST(MA))GOTO 8
  IS(I) = IS(MA)
END IF
END IF
7  CONTINUE
DO 9 I = 1, INC
IBM = REAL((1-2*RAN(RAND)))*MAX
9  LIST(I) = ISIGN(1, IBM)
MAG = 0
ENE = 0
DO 10 I = 2, L2
IS(I) = LIST(IS(I))
MAG = MAG + IS(I)
ENE = ENE + IS(I)*IS(I-1)
10 IF(I.GT.L)ENE = ENE + IS(I)*IS(I-L)
IF(MC.GT.NOEQ)THEN
IF(MC.ge.MCSTEP-NCORR)THEN
DO 13 P = 1, L
DO 12 I = 1, L2-P
12 CORR(P) = CORR(P) + IS(I+P)*IS(I)
13 CONTINUE
END IF
  MG = ABS(REAL(MAG)/L2)
  EG = -REAL(ENE)/L2
  MAV = MAV + MG
  SUSC = SUSC + MG*MG
  CUMULANTE = CUMULANTE + MG**4
  ENAV = ENAV + EG
  CE = CE + EG*EG
  IF((EINI .LE. EG) .AND. (EG .LE. EFIN)) THEN
    M = INT(Q*(EG - EINI)/(EFIN - EINI))
    N = INT(Q*(MG - MAGI)/(MAGF - MAGI))
    H(M,N) = H(M,N) + 1
  ELSE
    WRITE(8,*)EG, MG
  END IF
  IF(MOD(MC, IMP).EQ.0)THEN
    N_ACT = MC-NOEQ
    WRITE(20,50)N_ACT, TO, MAV/N_ACT, (SUSC/N_ACT-(MAV/
N_ACT)**2)*L2, 1-REAL(CUMULANTE*N_ACT)/(3*(SUSC**2)),
ENAV/N_ACT, (CE/N_ACT-(ENAV/N_ACT)**2)*L2
    END IF
  END IF
2  CONTINUE      !CICLO MCS

```

```

DO 34 P = 1,L
CT = CORR(P)/(NCORR*(L2-P))
CR(P) = CR(P) + CT
DCR(P) = DCR(P) + CT*CT
34  CORR(P)=0
50  FORMAT(1X,I,F,F,F,F,F,F)

```

C CALCULO DE PROMEDIOS DE VARIABLES TERMODINAMICAS PARA OTRAS TEMPERATURAS.

```

DO 22 K = 1,NT
TEM(K) = Temperatura(K,T0,NT)
ZT(K) = 0
MAGk = 0.
Ek = 0.
CEk = 0.
SUSCK = 0.
CUMk = 0.
DO 47 E = 1,Q
DO 47 MAG = 1,Q
  IF(H(E,MAG) .ne. 0) THEN
    Ec = (EINI + ((EFIN - EINI)*float(E))/Q)*L2
    MAGc = (MAGI + ((MAGF - MAGI)*float(MAG))/Q)*L2
    FBk = exp(Ec*(1/T0 - 1/TEM(K)))
    ZT(K) = ZT(K) + H(E,MAG)*FBk
    Ek = Ek + H(E,MAG)*Ec*FBk/L2
    CEk = CEk + H(E,MAG)*Ec**2*FBk/L2**2
    MAGk = MAGk + H(E,MAG)*MAGc*FBk/L2
    SUSCK = SUSCK + H(E,MAG)*MAGc**2*FBk/L2**2
    CUMk = CUMk + H(E,MAG)*(MAGc/L2)**4*FBk
  IF(k.eq.1)then
    PH(E,MAG) = PH(E,MAG)+H(E,MAG)
  if(r.eq.NPROB)write(12,33)ec,magc,real(PH(E,MAG))/NPROB
  ENDIF
  ENDIF
47  CONTINUE
33  FORMAT(1X,F10.1,F12.1,F12.3)
    PMAG(K) = PMAG(K)+MAGk/ZT(K)
    PE(K) = PE(K)+Ek/ZT(K)
    PCE(K) = PCE(K)+(CEk/ZT(K) - (Ek/ZT(K))**2)*L2
    PSUSCK(K) = PSUSCK(K)+(SUSCK/ZT(K) - (MAGk/ZT(K))**2)*L2
    PCUM(K) = PCUM(K)+1-(CUMk/SUSCK)*(ZT(K)/(3*SUSCK))
107  FORMAT(1X,F6.3,F13.6,F13.6,F13.6,F12.6,F12.6)
22  CONTINUE
15  CONTINUE      !CICLO PROB
DO 35 P=1,L
35  WRITE(22,*)P,CR(P)/NPROB,sqrt(DCR(P)/NPROB-
(CR(P)/NPROB)**2)

```

```

DO 23 K = 1, NT
23 WRITE(21, 107) TEM(K), PMAG(K)/NPROB, PE(K)/NPROB, PSUSC(K)/
  NPROB, PCE(K)/NPROB, PCUM(K)/NPROB
END

```

2.- Estimación de los errores estadísticos introducidos por las variables de desorden configuracional.

En la simulación de sistemas diluidos, existen al menos dos fuentes de errores estadísticos: uno de ellos relacionado con el número de configuraciones estadísticamente independientes que se muestrean en el espacio de configuraciones del sistema para estimar a las cantidades de interés, y el otro está asociado a las distintas realizaciones de desorden geométrico con las cuales se lleva a efecto la simulación. Cada uno de estos errores está asociado a los dos promedios que se efectúan en este caso: promedio sobre las variables de espín y sobre las variables de desorden, respectivamente. La primera fuente de error se cuantifica directamente con el tiempo de correlación, y lleva consigo toda la teoría de la dinámica del sistema en la vecindad del punto crítico, en tanto que la segunda, más asociado al problema de percolación, es la que se considera en este apartado.

La realización de distintas configuraciones geométricas de dilución en una simulación puede llevarse a efecto de varias formas, las consideradas en este trabajo consistieron en dos: en una de ellas, a partir de una malla cuadrada de dimensión fija, se han realizado mediciones de las cantidades termodinámicas para submallas de una dimensión menor en distintas partes de la malla original⁺; en tanto que la otra consistió en la simulación de sistemas con un tamaño definido inicialmente en los cuales se miden las cantidades de interés a lo largo de toda la malla, algunas veces con condiciones de frontera de tornillo, y en otras periódicas.

Para cada realización de desorden geométrico se determina un valor de la cantidad de interés, y de varias realizaciones de desorden se puede estimar el error asociado con un cierto número de configuraciones de desorden dado. En la tabla 7.11 se muestra un ejemplo representativo de los valores así obtenidos para una concentración y temperatura dadas.

3.- Cantidades termodinámicas.

Con los resultados obtenidos con la simulación anterior, se procedió a realizar un estudio más exhaustivo en la región crítica, esta vez mediante una técnica de actualización por cúmulos. En las tablas y figuras siguientes se muestran algunos de los resultados obtenidos para esta simulación. Al igual que en el caso anterior, se recurre al cálculo del cumulado de Binder para encontrar la temperatura crítica para una concentración dada. Adicionalmente, en este caso se ha realizado un análisis de los resultados de la simulación en términos de histogramas, de ahí el gran número de temperaturas mostradas.

⁺ Este tipo de cálculos se ha realizado exclusivamente para la simulación del modelo de Ising con dinámica tradicional debido a que puesto que en este caso las condiciones en la frontera son libres, los resultados son inferiores a los que se logran con condiciones tipo tornillo ó periódicas. Las condiciones no son libres en el sentido usual de que los espines vecinos a los de la frontera se anulan, más bien se trata de un sistema muy grande en el cual se realizan promedios sobre subsistemas de dimensiones menores.

Tabla 7.11.- Estimación del error debido a las variables de desorden geométrico. Los resultados mostrados corresponden a una concentración de sitios ocupados de $p = 0.875$ y una temperatura de $kT/J = 1.7$. Se muestra el comportamiento de varias cantidades termodinámicas para el modelo de Ising con dinámica de cúmulos y 10 realizaciones de desorden. E_q es el número de configuraciones MC desechadas para termalización.

$kT/J = 1.7$	$p = 0.875$	$mcs = 200.000$	$E_q = 20.000$			
Mig.	p. de o.	-Energía	Susc.	Susc. estg.	Cal. esp.	Conn.
0.00215883	0.69934264	1.29187372	0.04412934	13.83427297	2.26294732	0.664557
0.00209825	0.69832936	1.29690977	0.0407805	15.63276156	2.26454157	0.664288
0.00223594	0.70175788	1.29612023	0.04542442	11.4202594	2.25633522	0.664855
0.00257103	0.7010155	1.29518796	0.0549955	10.39414434	2.22840773	0.665009
0.00300654	0.70254871	1.29208792	0.06743822	10.2694504	2.31114851	0.665034
0.00244698	0.70086142	1.29598151	0.05247466	10.96499934	2.23722679	0.664938
0.00202635	0.69537697	1.28826027	0.03893331	10.50272129	2.32117643	0.664955
0.00226306	0.68884175	1.29005513	0.04595897	15.96542105	2.28827129	0.664102
0.00203235	0.68835895	1.29126116	0.0390574	19.80048615	2.37090335	0.663496
0.00201165	0.7027939	1.29649465	0.03819174	9.91097243	2.22449121	0.66508
Promedio						
0.002285098	0.697922708	1.293423232	0.046738406	12.86954889	2.276544942	0.6646314
Desviación estándar						
0.000297961	0.005105193	0.002922008	0.008758809	3.148956795	0.044204639	0.000494721
Error (%)						
13.03929279	0.731484016	0.225912732	18.74006768	24.4682764	1.941742444	0.074435329

► Parámetro de orden

Tabla 7.12.- Parámetro de orden como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L para distintas concentraciones de dilución de la malla, p es la fracción de sitios ocupados. Resultados para la dinámica de cúmulos en el modelo de Ising 2d.

1453	0.521567	0.518336	0.512596	0.513797	0.519521	0.494817	0.481200
1454	0.520404	0.517005	0.511082	0.512204	0.517795	0.493600	0.480204
1455	0.519239	0.515671	0.509564	0.510605	0.516052	0.492355	0.479182
1456	0.518073	0.514335	0.508042	0.509000	0.514294	0.491080	0.478134
1458	0.516905	0.512996	0.506517	0.507389	0.512519	0.489775	0.477059
1459	0.515736	0.511655	0.504988	0.505773	0.510730	0.488440	0.475957
1460	0.514565	0.510311	0.503456	0.504151	0.508925	0.487075	0.474827
1461	0.513392	0.508964	0.501920	0.502524	0.507105	0.485678	0.473667
1462	0.512218	0.507616	0.500381	0.500892	0.505270	0.484251	0.472478
1463	0.511042	0.506265	0.498838	0.499254	0.503422	0.482793	0.471259
1465	0.509865	0.504912	0.497293	0.497612	0.501561	0.481303	0.470009
1466	0.508687	0.503557	0.495744	0.495966	0.499687	0.479781	0.468727
1467	0.507507	0.502200	0.494193	0.494314	0.497800	0.478227	0.467414
1468	0.506326	0.500840	0.492638	0.492659	0.495900	0.476642	0.466067
1469	0.505144	0.499479	0.491081	0.490999	0.493989	0.475024	0.464687
1470	0.503960	0.498116	0.489521	0.489335	0.492066	0.473375	0.463273
1472	0.502776	0.496751	0.487959	0.487667	0.490133	0.471693	0.461824
1473	0.501590	0.495384	0.486394	0.485995	0.488190	0.469981	0.460340
1474	0.500403	0.494015	0.484827	0.484320	0.486236	0.468236	0.458820
1475	0.499215	0.492645	0.483257	0.482641	0.484272	0.466461	0.457263
1476	0.498026	0.491273	0.481685	0.480958	0.482299	0.464654	0.455668
1478	0.496836	0.489899	0.480112	0.479272	0.480318	0.462817	0.454036
1479	0.495645	0.488524	0.478536	0.477584	0.478328	0.460950	0.452367
1480	0.494453	0.487148	0.476958	0.475892	0.476330	0.459053	0.450658
1481	0.493260	0.485770	0.475379	0.474198	0.474325	0.457128	0.448910
1482	0.492066	0.484391	0.473798	0.472501	0.472312	0.455173	0.447122
1483	0.490872	0.483010	0.472215	0.470801	0.470293	0.453191	0.445294
1485	0.489677	0.481628	0.470631	0.469099	0.468267	0.451182	0.443426
1486	0.488480	0.480246	0.469045	0.467395	0.466235	0.449147	0.441517
1487	0.487284	0.478862	0.467458	0.465688	0.464197	0.447086	0.439568
1488	0.486086	0.477478	0.465870	0.463980	0.462155	0.445001	0.437578
1489	0.484888	0.476092	0.464281	0.462270	0.460107	0.442892	0.435546
1490	0.483690	0.474705	0.462691	0.460558	0.458055	0.440761	0.433474
1492	0.482491	0.473318	0.461100	0.458845	0.455998	0.438609	0.431361
1493	0.481291	0.471930	0.459509	0.457130	0.453938	0.436436	0.429208
1494	0.480091	0.470541	0.457916	0.455414	0.451874	0.434244	0.427014
1495	0.478891	0.469152	0.456323	0.453697	0.449807	0.432033	0.424780
1496	0.477690	0.467762	0.454730	0.451978	0.447737	0.429806	0.422506
1497	0.476489	0.466372	0.453136	0.450260	0.445664	0.427563	0.420195

Fig. 7.1.1.-Resultados MC con dinámica de cúmulos para el modelo de Ising: Parámetro de orden.

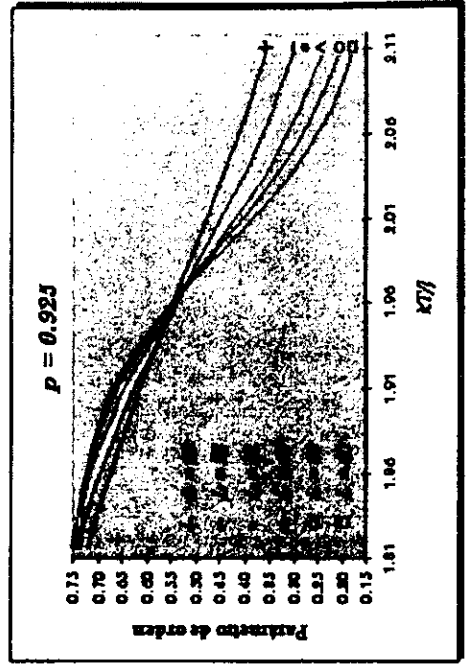
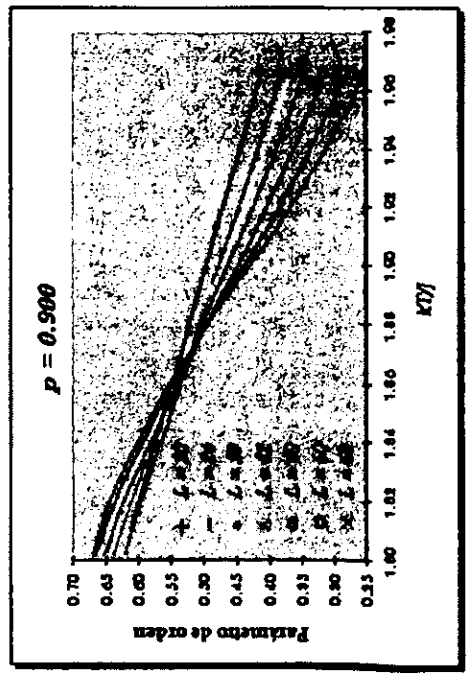
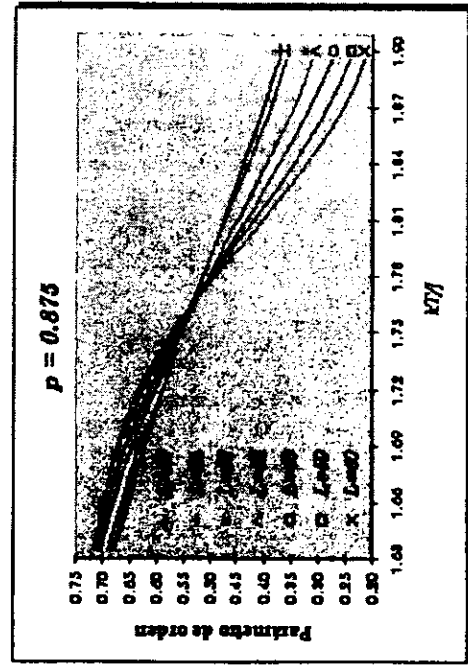
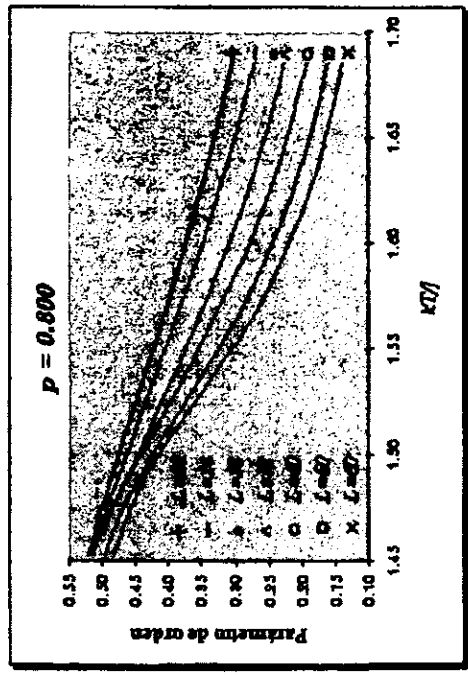
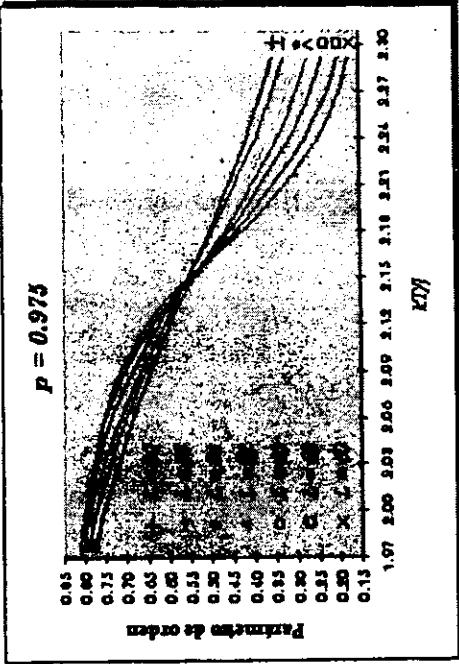
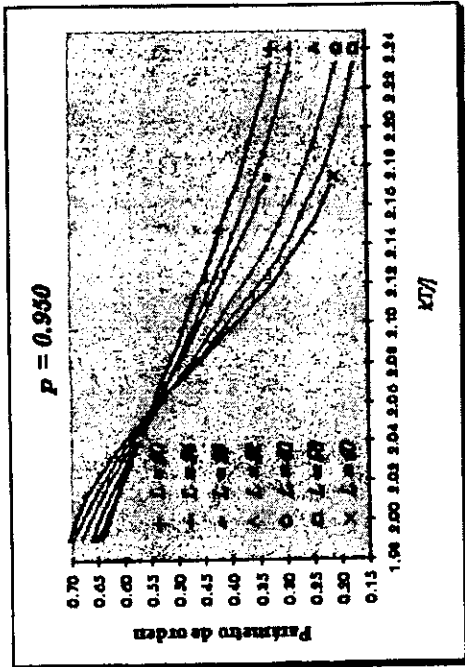


Fig. 7.11.-Continuación.



➤ Energía

Tabla 7.13.- Energía como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L para distintas concentraciones de dilución de la malla. p es la fracción de sitios ocupados. Resultados para la dinámica de cúmulos en el modelo de Ising 2d.

$p = 0.500$							
1453	-1.054464	-1.066043	-1.068083	-1.076411	-1.084899	-1.087008	-1.082706
1454	-1.053797	-1.065362	-1.067384	-1.075722	-1.084254	-1.086586	-1.082468
1455	-1.053130	-1.064680	-1.066684	-1.075031	-1.083603	-1.086153	-1.082222
1456	-1.052461	-1.063996	-1.065982	-1.074338	-1.082946	-1.085712	-1.081968
1458	-1.051791	-1.063312	-1.065279	-1.073644	-1.082285	-1.085261	-1.081708
1459	-1.051120	-1.062626	-1.064574	-1.072947	-1.081618	-1.084799	-1.081439
1460	-1.050449	-1.061939	-1.063868	-1.072250	-1.080946	-1.084328	-1.081163
1461	-1.049776	-1.061250	-1.063160	-1.071550	-1.080270	-1.083846	-1.080878
1462	-1.049102	-1.060561	-1.062451	-1.070848	-1.079589	-1.083355	-1.080586
1463	-1.048427	-1.059870	-1.061741	-1.070145	-1.078903	-1.082853	-1.080284
1465	-1.047751	-1.059179	-1.061029	-1.069440	-1.078213	-1.082341	-1.079974
1466	-1.047074	-1.058486	-1.060315	-1.068734	-1.077519	-1.081818	-1.079655
1467	-1.046397	-1.057792	-1.059601	-1.068026	-1.076821	-1.081285	-1.079327
1468	-1.045718	-1.057097	-1.058885	-1.067316	-1.076119	-1.080742	-1.078989
1469	-1.045038	-1.056401	-1.058168	-1.066605	-1.075413	-1.080188	-1.078642
1470	-1.044357	-1.055704	-1.057449	-1.065892	-1.074704	-1.079624	-1.078285
1472	-1.043675	-1.055005	-1.056730	-1.065178	-1.073990	-1.079050	-1.077918
1473	-1.042993	-1.054306	-1.056009	-1.064463	-1.073275	-1.078465	-1.077541
1474	-1.042309	-1.053606	-1.055287	-1.063746	-1.072555	-1.077870	-1.077153
1475	-1.041625	-1.052904	-1.054564	-1.063028	-1.071832	-1.077265	-1.076754
1476	-1.040939	-1.052202	-1.053839	-1.062308	-1.071106	-1.076650	-1.076345
1478	-1.040253	-1.051498	-1.053114	-1.061587	-1.070378	-1.076025	-1.075925
1479	-1.039566	-1.050794	-1.052387	-1.060865	-1.069646	-1.075390	-1.075493
1480	-1.038877	-1.050088	-1.051659	-1.060141	-1.068912	-1.074746	-1.075050
1481	-1.038189	-1.049382	-1.050931	-1.059416	-1.068176	-1.074093	-1.074595
1482	-1.037499	-1.048675	-1.050200	-1.058690	-1.067437	-1.073430	-1.074129
1483	-1.036808	-1.047966	-1.049470	-1.057962	-1.066696	-1.072759	-1.073651
1485	-1.036116	-1.047257	-1.048737	-1.057234	-1.065952	-1.072079	-1.073161
1486	-1.035424	-1.046547	-1.048004	-1.056504	-1.065207	-1.071391	-1.072659
1487	-1.034731	-1.045836	-1.047270	-1.055773	-1.064459	-1.070694	-1.072144
1488	-1.034037	-1.045124	-1.046535	-1.055041	-1.063710	-1.069990	-1.071617
1489	-1.033342	-1.044411	-1.045799	-1.054308	-1.062958	-1.069278	-1.071078
1490	-1.032647	-1.043697	-1.045062	-1.053573	-1.062205	-1.068559	-1.070526
1492	-1.031950	-1.042983	-1.044324	-1.052838	-1.061450	-1.067834	-1.069962
1493	-1.031254	-1.042268	-1.043585	-1.052102	-1.060693	-1.067102	-1.069385
1494	-1.030556	-1.041551	-1.042845	-1.051364	-1.059935	-1.066363	-1.068796
1495	-1.029857	-1.040834	-1.042105	-1.050626	-1.059175	-1.065619	-1.068194
1498	-1.029157	-1.040117	-1.041363	-1.049886	-1.058414	-1.064870	-1.067580
1497	-1.028457	-1.039398	-1.040622	-1.049146	-1.057651	-1.064115	-1.066954
1499	-1.027756	-1.038679	-1.039878	-1.048405	-1.056887	-1.063356	-1.066316
1500	-1.027054	-1.037959	-1.039135	-1.047662	-1.056122	-1.062592	-1.065665

Fig. 7.12.- Resultados MC con dinámica de cúmulos de Ising: Energía por espín.

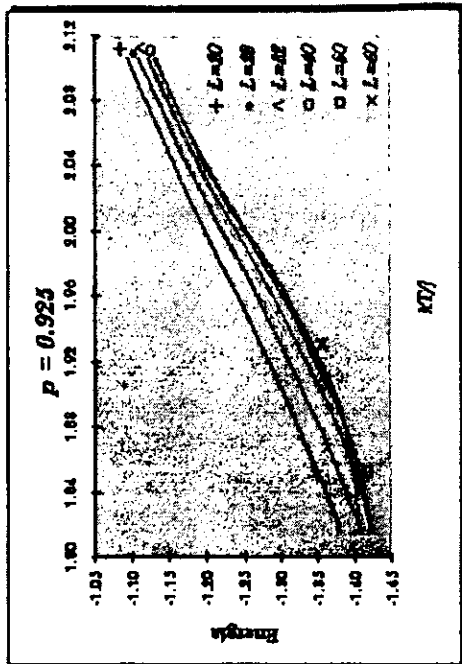
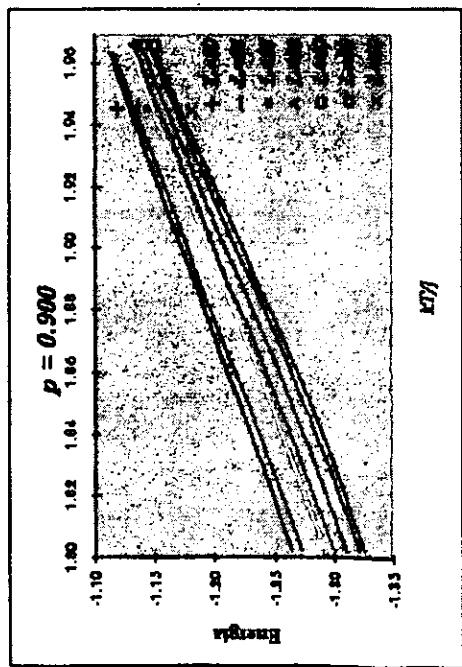
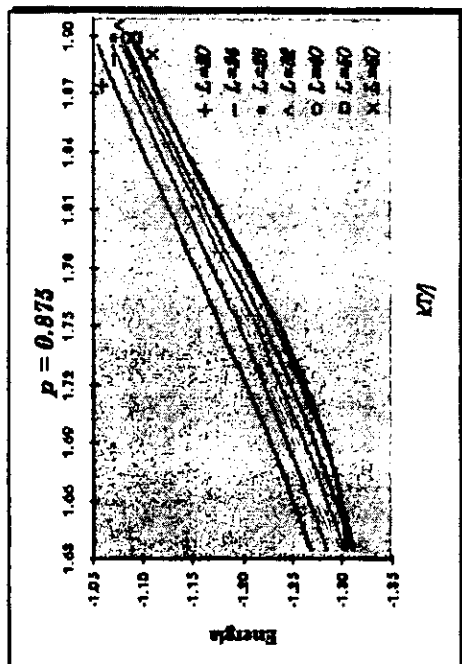
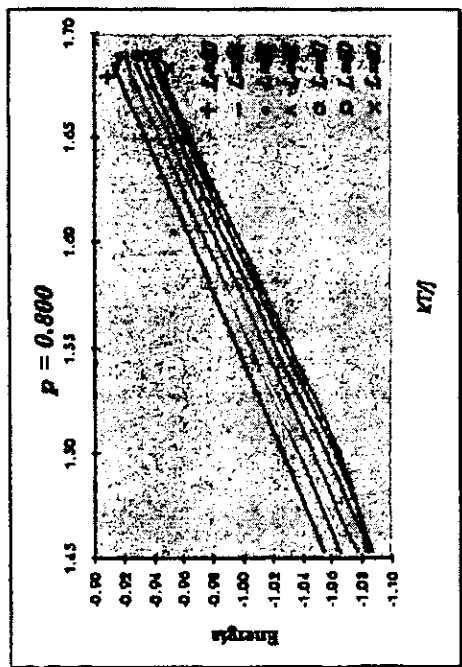
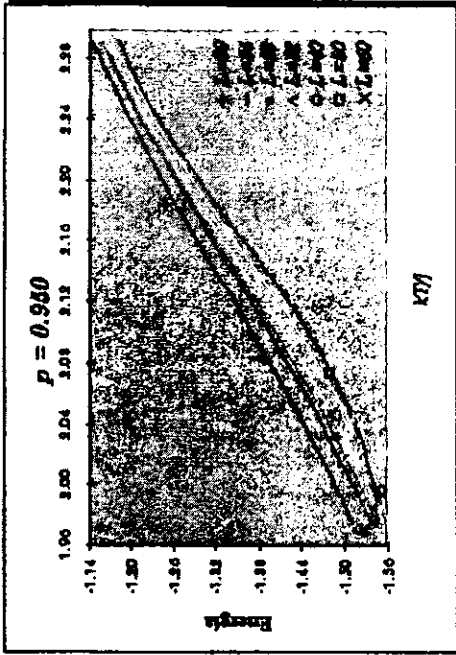
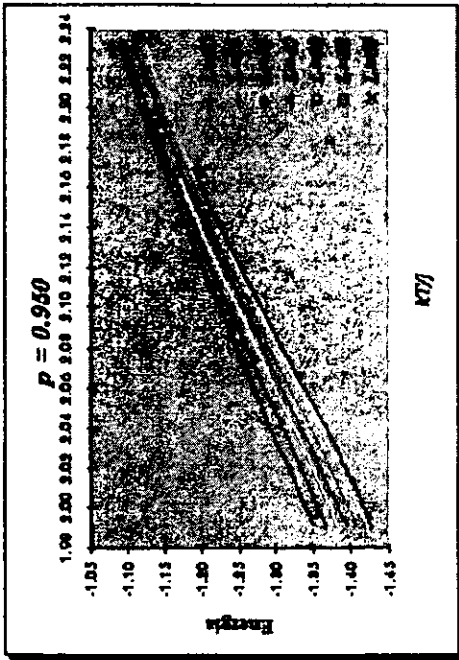


Fig. 7.12.- Continuación.



➤ Susceptibilidad alternada

Tabla 7.14.- Susceptibilidad alternada como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L para distintas concentraciones de dilución de la malla. p es la fracción de sitios ocupados. Resultados para la dinámica de cúmulos en el modelo de Ising.

1453	11.223118	15.437572	19.903460	23.902578	33.183651	44.550987	56.823345
1454	11.259399	15.500653	19.999741	24.043869	33.493378	44.988125	57.430439
1455	11.295387	15.563193	20.095106	24.183977	33.801456	45.429543	58.044640
1458	11.331073	15.625175	20.189518	24.322844	34.107651	45.874989	58.665783
1459	11.366446	15.686587	20.282948	24.460432	34.411777	46.324234	59.293732
1459	11.401514	15.747431	20.375385	24.596703	34.713654	46.777100	59.928345
1460	11.436262	15.807703	20.466818	24.731630	35.013130	47.233349	60.569565
1461	11.470707	15.867388	20.557253	24.865227	35.310135	47.692841	61.217388
1462	11.504821	15.926474	20.646633	24.997377	35.604321	48.155075	61.871300
1463	11.538617	15.984946	20.734957	25.128096	35.895645	48.619862	62.531322
1465	11.572078	16.042814	20.822205	25.257334	36.183910	49.086826	63.197193
1466	11.605213	16.100042	20.908354	25.385063	36.468967	49.553580	63.868649
1467	11.638015	16.156652	20.993408	25.511257	36.750687	50.025795	64.545540
1468	11.670481	16.212627	21.077343	25.635897	37.028961	50.497032	65.227600
1469	11.702598	16.267942	21.160120	25.758911	37.303558	50.968769	65.914383
1470	11.734379	16.322611	21.241760	25.880318	37.574471	51.440670	66.605820
1472	11.765808	16.376625	21.322233	26.000059	37.841496	51.912128	67.301407
1473	11.796883	16.429941	21.401495	26.118095	38.104485	52.382565	68.000717
1474	11.827609	16.482607	21.479586	26.234451	38.363476	52.851669	68.703651
1475	11.857975	16.534578	21.556456	26.349060	38.618237	53.318668	69.409615
1476	11.887987	16.585855	21.632103	26.461905	38.868698	53.783081	70.118210
1478	11.917627	16.636433	21.706499	26.572935	39.114773	54.244190	70.828911
1479	11.946904	16.686314	21.779648	26.682156	39.356361	54.701504	71.541306
1480	11.975819	16.735476	21.851528	26.789549	39.593414	55.154312	72.254822
1481	12.004351	16.783901	21.922113	26.895037	39.825760	55.601917	72.968750
1482	12.032516	16.831623	21.991440	26.998695	40.053490	56.043907	73.682884
1483	12.060298	16.878609	22.059448	27.100418	40.276405	56.479424	74.396156
1485	12.087707	16.924850	22.126137	27.200203	40.494480	56.907875	75.108017
1486	12.114729	16.970354	22.191517	27.298054	40.707653	57.328712	75.817795
1487	12.141369	17.015104	22.255545	27.393927	40.915855	57.741180	76.524506
1488	12.167620	17.059092	22.318232	27.487804	41.119041	58.144814	77.227371
1489	12.193478	17.102331	22.379572	27.579670	41.317207	58.538979	77.925529
1490	12.218946	17.144789	22.439539	27.669518	41.510239	58.923092	78.617828
1492	12.244026	17.186487	22.498133	27.757326	41.698158	59.296738	79.303352
1493	12.268699	17.227396	22.555336	27.843044	41.880848	59.659313	79.980721
1494	12.292980	17.267530	22.611156	27.926725	42.058372	60.010536	80.649139
1495	12.316859	17.306885	22.665581	28.008299	42.230644	60.349869	81.307300
1496	12.340336	17.345444	22.718609	28.087788	42.397640	60.677055	81.953148
1497	12.363409	17.383204	22.770210	28.165155	42.559322	60.991676	82.585930

Fig. 7.13.- Resultados MC con dinámica de cúmulos de vórtices para el modelo de Ising: Susceptibilidad magnética.

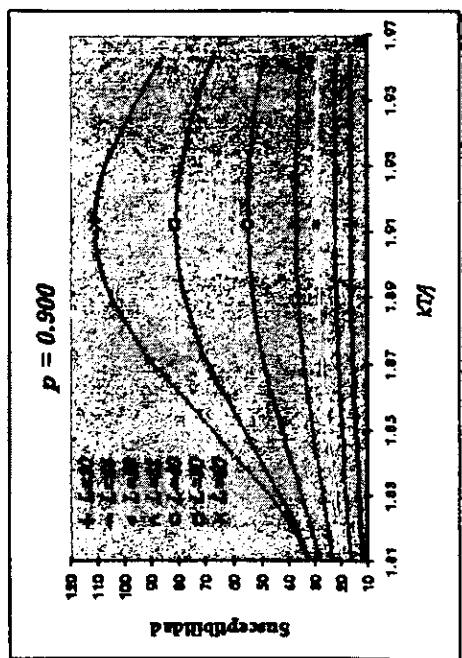
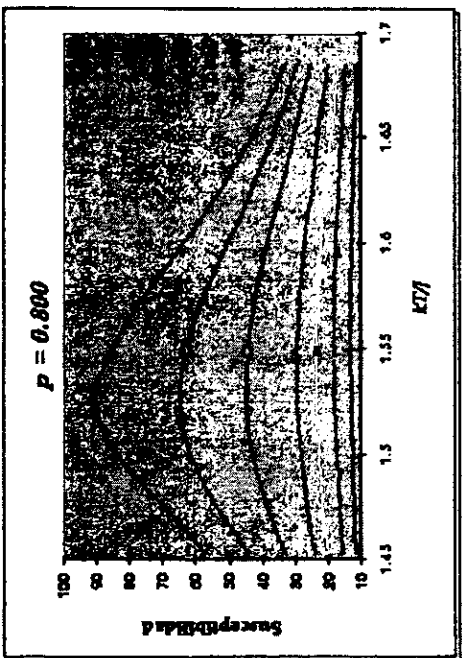
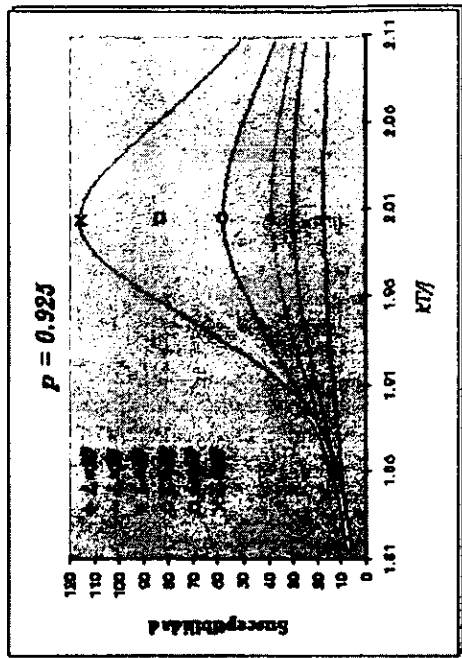
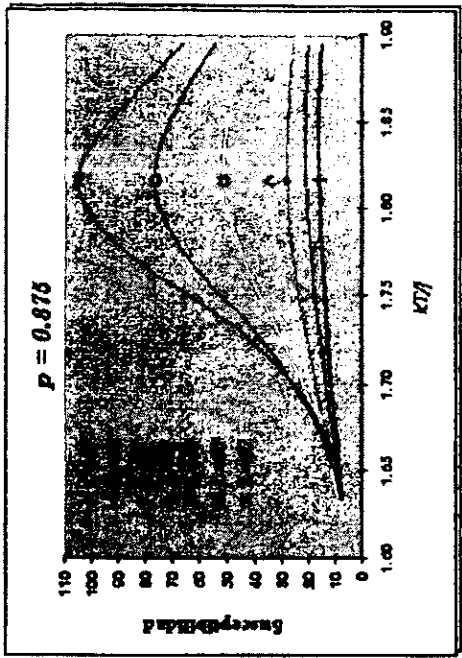
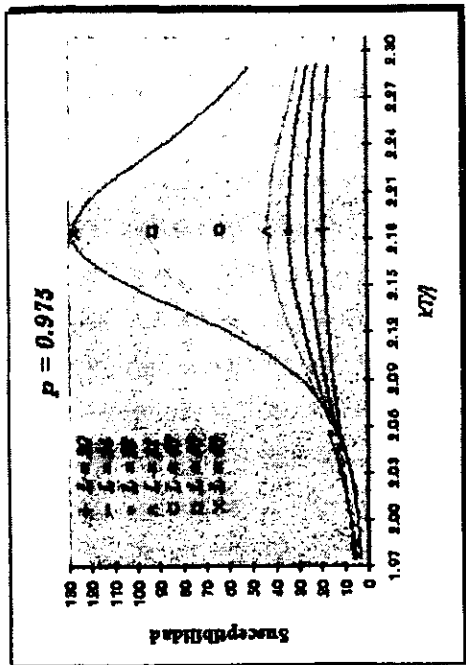
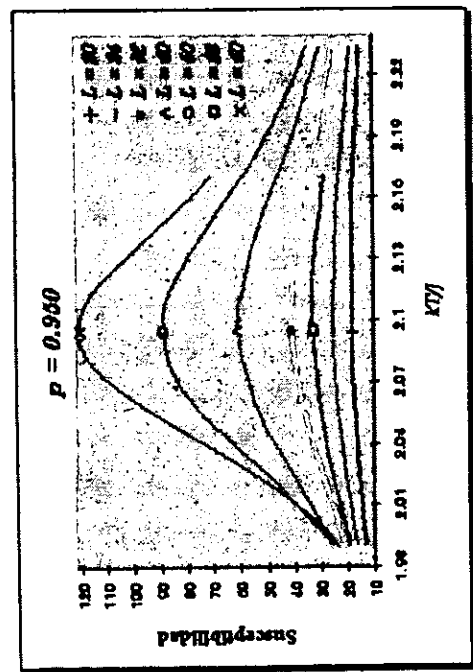


Fig. 7.18.-Continuación.



➤ Calor específico

Tabla 7.15.- Calor específico como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L , para distintas concentraciones de dilución de la malla, p es la fracción de sitios ocupados. Resultados para la dinámica de cúmulos en el modelo de Ising.

L	$p=0.15$	$p=0.2$	$p=0.25$	$p=0.3$	$p=0.35$	$p=0.4$	$p=0.45$
1453	1.201862	1.227578	1.259492	1.241303	1.159600	0.753455	0.424831
1454	1.205734	1.231811	1.264315	1.246795	1.171574	0.771843	0.438133
1455	1.209599	1.236031	1.269111	1.252230	1.183330	0.790523	0.451838
1456	1.213456	1.240239	1.273879	1.257611	1.194860	0.809481	0.465950
1458	1.217307	1.244434	1.278618	1.262939	1.206157	0.828703	0.480476
1459	1.221150	1.248615	1.283328	1.268216	1.217219	0.848175	0.495424
1460	1.224985	1.252784	1.288011	1.273442	1.228042	0.867881	0.510799
1461	1.228814	1.256940	1.292669	1.278622	1.238628	0.887809	0.526613
1462	1.232633	1.261082	1.297296	1.283753	1.248969	0.907929	0.542826
1463	1.236445	1.265210	1.301897	1.288839	1.259068	0.928225	0.559555
1465	1.240248	1.269323	1.306471	1.293880	1.268924	0.948672	0.576695
1466	1.244043	1.273424	1.311017	1.298877	1.278538	0.969244	0.594284
1467	1.247828	1.277508	1.315536	1.303833	1.287913	0.989916	0.612325
1468	1.251605	1.281579	1.320028	1.308747	1.297050	1.010659	0.630821
1469	1.255372	1.285634	1.324492	1.313620	1.305950	1.031438	0.649767
1470	1.259130	1.289675	1.328930	1.318454	1.314621	1.052227	0.669167
1472	1.262879	1.293700	1.333340	1.323249	1.323065	1.072987	0.689016
1473	1.266617	1.297708	1.337722	1.328006	1.331285	1.093681	0.709307
1474	1.270346	1.301702	1.342077	1.332726	1.339289	1.114282	0.730044
1475	1.274064	1.305679	1.346406	1.337409	1.347081	1.134745	0.751213
1476	1.277772	1.309640	1.350706	1.342057	1.354666	1.155035	0.772808
1478	1.281469	1.313585	1.354979	1.346668	1.362050	1.175109	0.794818
1479	1.285156	1.317513	1.359224	1.351244	1.369241	1.194932	0.817232
1480	1.288831	1.321423	1.363442	1.355786	1.376244	1.214465	0.840036
1481	1.292495	1.325317	1.367631	1.360293	1.383065	1.233665	0.863210
1482	1.296149	1.329194	1.371794	1.364767	1.389713	1.252506	0.886748
1483	1.299790	1.333053	1.375928	1.369207	1.396191	1.270940	0.910618
1485	1.303420	1.336893	1.380034	1.373614	1.402508	1.288938	0.934799
1486	1.307038	1.340717	1.384113	1.377988	1.408670	1.306469	0.959271
1487	1.310643	1.344523	1.388162	1.382329	1.414683	1.323501	0.983999
1488	1.314237	1.348310	1.392184	1.386638	1.420552	1.340007	1.008953
1489	1.317818	1.352078	1.396177	1.390913	1.426286	1.355966	1.034103
1490	1.321387	1.355828	1.400142	1.395158	1.431889	1.371356	1.059404
1492	1.324943	1.359559	1.404078	1.399369	1.437366	1.386161	1.084822
1493	1.328485	1.363270	1.407985	1.403548	1.442722	1.400366	1.110301
1494	1.332014	1.366964	1.411864	1.407696	1.447966	1.413971	1.135810
1495	1.335531	1.370637	1.415714	1.411811	1.453100	1.426964	1.161284
1496	1.339034	1.374291	1.419535	1.415896	1.458129	1.439349	1.186674
1497	1.342524	1.377925	1.423327	1.419947	1.463057	1.451127	1.211915
1499	1.346000	1.381539	1.427089	1.423967	1.467890	1.462307	1.236952

Fig. 7.14.-Resultados MC para el modelo de Ising con dinámicas de cúmulos: Calor específico.

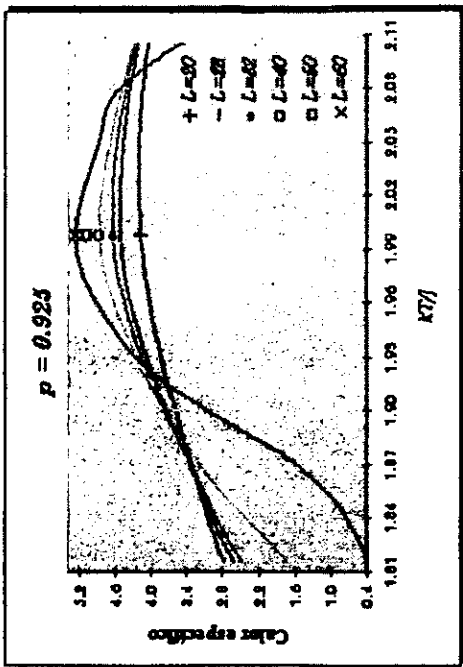
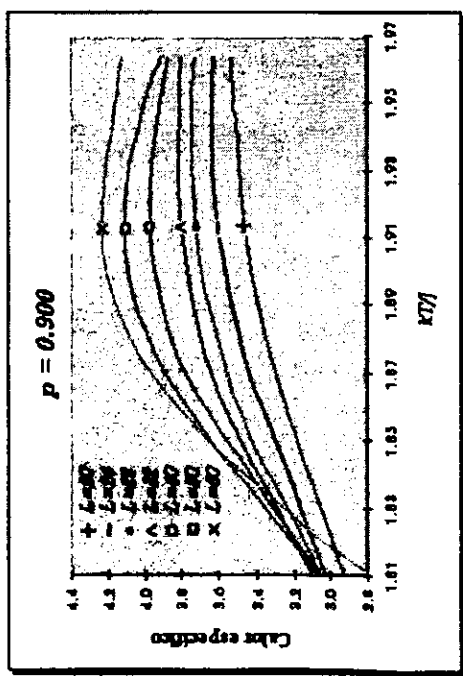
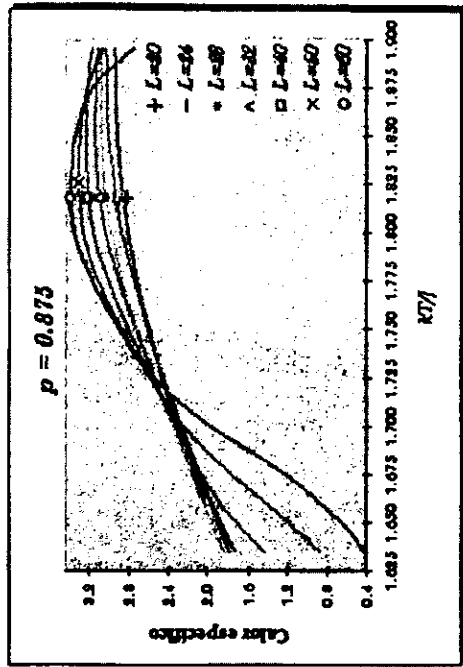
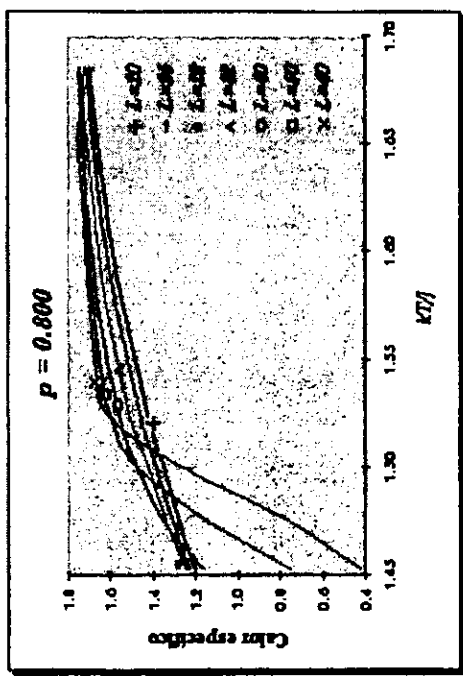
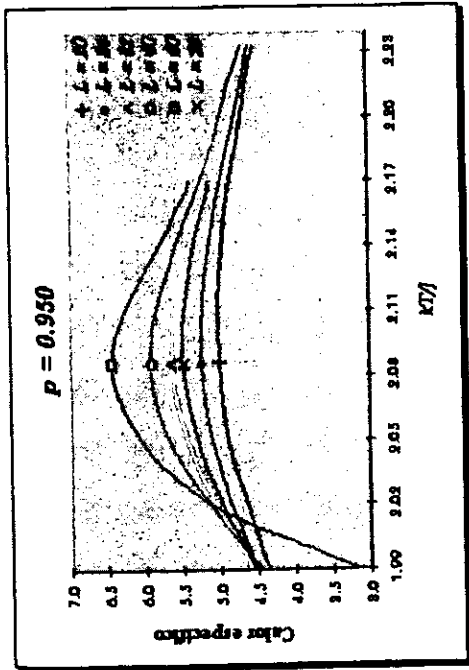
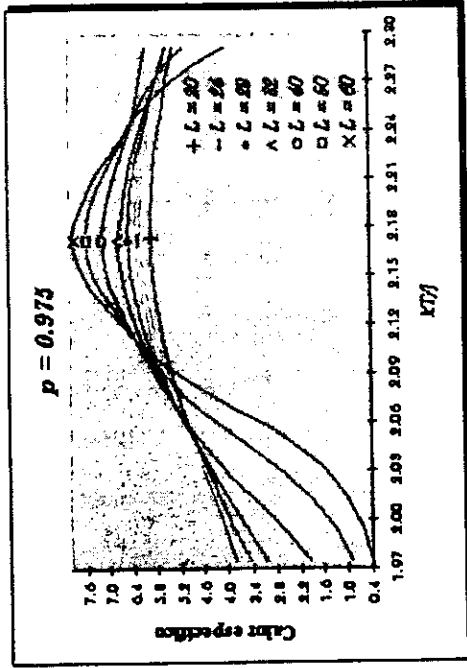


Fig. 7.14.- Continuación.



►Cumulante de orden 4.

Tabla 7.16.-Cumulante como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L para distintas concentraciones de dilución de la malla, p es la fracción de sitios ocupados. Resultados para la dinámica de cúmulos en el modelo de Ising.

1453	0.582710	0.587031	0.588197	0.594968	0.606237	0.604863	0.608461
1454	0.582040	0.586275	0.587332	0.594088	0.605273	0.604105	0.607706
1455	0.581366	0.585513	0.586459	0.593200	0.604292	0.603323	0.606931
1456	0.580687	0.584745	0.585579	0.592303	0.603298	0.602518	0.606136
1458	0.580005	0.583972	0.584693	0.591397	0.602288	0.601689	0.605321
1459	0.579319	0.583194	0.583799	0.590482	0.601263	0.600836	0.604485
1460	0.578629	0.582410	0.582897	0.589559	0.600224	0.599958	0.603628
1461	0.577935	0.581620	0.581988	0.588626	0.599170	0.599054	0.602748
1462	0.577237	0.580826	0.581072	0.587684	0.598100	0.598124	0.601845
1463	0.576535	0.580025	0.580148	0.586734	0.597016	0.597169	0.600918
1465	0.575829	0.579219	0.579217	0.585775	0.595918	0.596186	0.599968
1466	0.575119	0.578408	0.578278	0.584807	0.594805	0.595177	0.598992
1467	0.574405	0.577591	0.577332	0.583830	0.593677	0.594140	0.597991
1468	0.573688	0.576768	0.576379	0.582844	0.592535	0.593075	0.596962
1469	0.572966	0.575941	0.575418	0.581850	0.591378	0.591982	0.595907
1470	0.572241	0.575107	0.574450	0.580846	0.590206	0.590861	0.594824
1472	0.571512	0.574268	0.573474	0.579833	0.589021	0.589711	0.593712
1473	0.570778	0.573424	0.572491	0.578812	0.587821	0.588532	0.592570
1474	0.570041	0.572574	0.571501	0.577782	0.586607	0.587324	0.591398
1475	0.569300	0.571718	0.570503	0.576743	0.585379	0.586087	0.590195
1476	0.568555	0.570857	0.569498	0.575695	0.584137	0.584820	0.588960
1478	0.567806	0.569991	0.568485	0.574638	0.582880	0.583524	0.587691
1479	0.567053	0.569119	0.567465	0.573572	0.581610	0.582198	0.586389
1480	0.566297	0.568241	0.566437	0.572497	0.580326	0.580843	0.585053
1481	0.565536	0.567358	0.565402	0.571414	0.579028	0.579459	0.583681
1482	0.564771	0.566470	0.564360	0.570322	0.577716	0.578045	0.582273
1483	0.564003	0.565576	0.563310	0.569221	0.576391	0.576602	0.580829
1485	0.563231	0.564677	0.562253	0.568111	0.575052	0.575131	0.579346
1486	0.562454	0.563772	0.561188	0.566992	0.573699	0.573630	0.577825
1487	0.561674	0.562862	0.560116	0.565865	0.572333	0.572101	0.576265
1488	0.560891	0.561946	0.559037	0.564729	0.570953	0.570544	0.574665
1489	0.560103	0.561025	0.557951	0.563584	0.569560	0.568959	0.573025
1490	0.559311	0.560099	0.556857	0.562431	0.568154	0.567348	0.571343
1492	0.558516	0.559167	0.555756	0.561268	0.566734	0.565709	0.569620
1493	0.557717	0.558230	0.554648	0.560098	0.565301	0.564044	0.567855
1494	0.556914	0.557287	0.553532	0.558918	0.563855	0.562353	0.566046
1495	0.556107	0.556339	0.552409	0.557730	0.562396	0.560638	0.564195
1496	0.555296	0.555386	0.551279	0.556534	0.560923	0.558897	0.562300
1497	0.554482	0.554427	0.550142	0.555329	0.559438	0.557133	0.560362
1499	0.553664	0.553463	0.548998	0.554115	0.557939	0.555345	0.558380
1500	0.552841	0.552494	0.547846	0.552893	0.556428	0.553535	0.556354

Fig. 7.16.- Resultados MC para el modelo de Ising con dinámica de cúmulos: Cumulante.

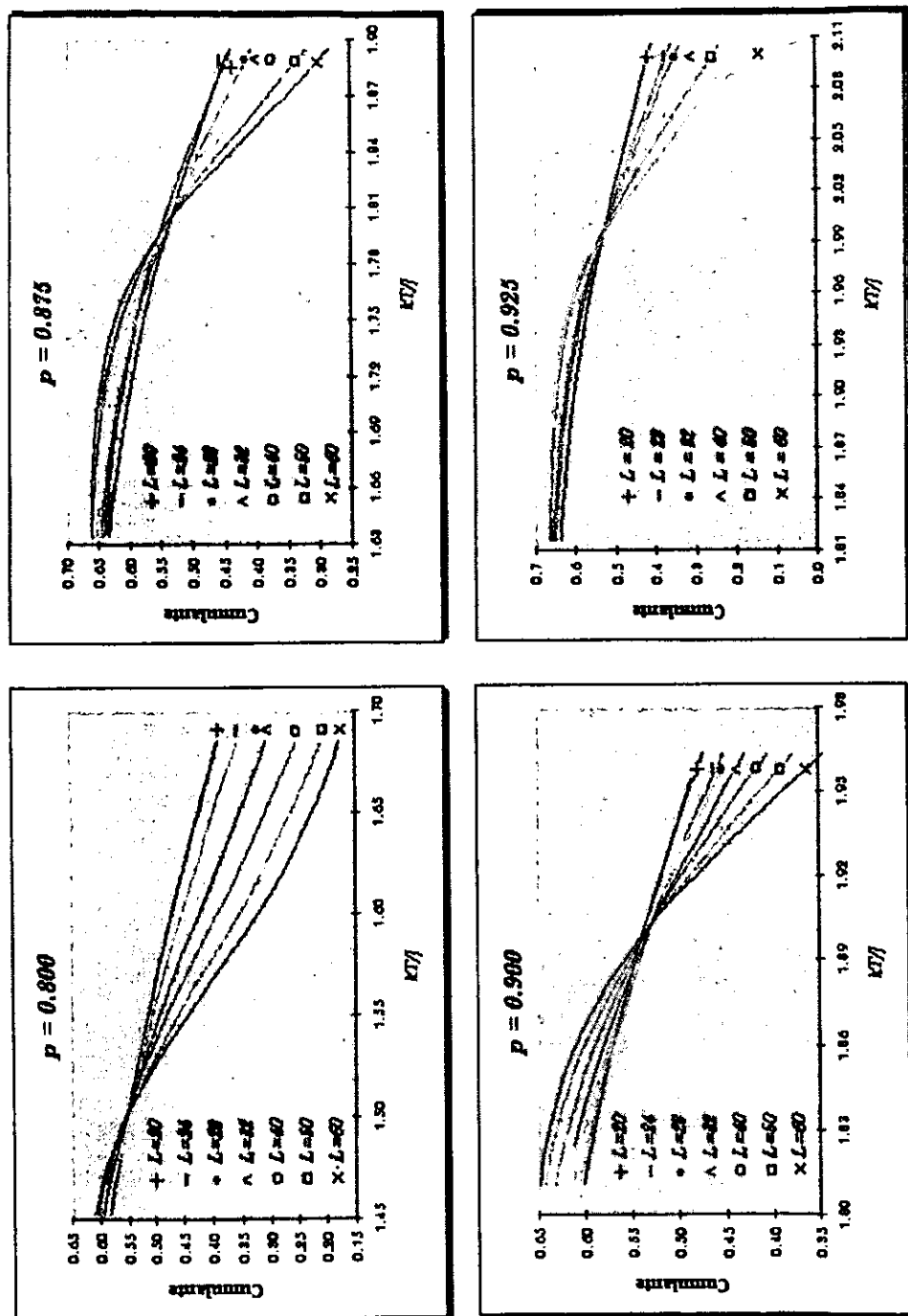
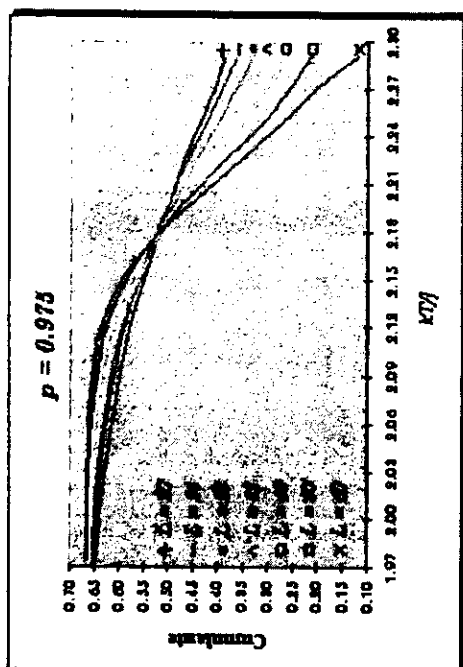
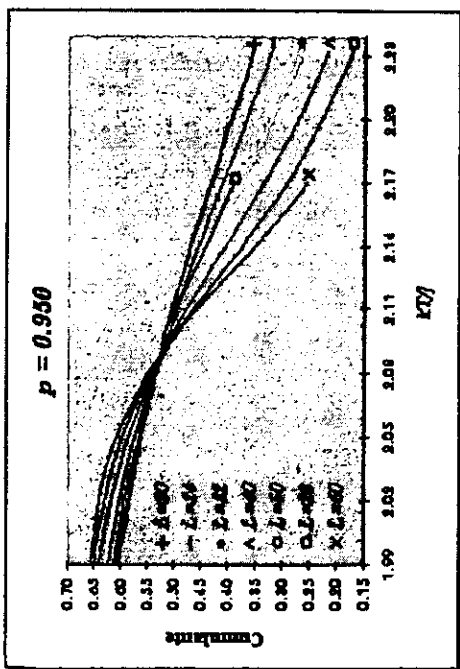


Fig. 7.15.- Continuación.



► Razones de cumulantes

Tabla 7.17.- Razones de cumulantes como función de la temperatura kT/J para distintas concentraciones de dilución de la malla. p es la fracción de sitios ocupados. Resultados para la dinámica de cúmulos en el modelo de Ising.

$p = 0.500$						
1453	0.9576785	1.0365057	1.0380172	1.0283340	1.0226785	0.9666963
1454	0.9577658	1.0365545	1.0379098	1.0285580	1.0229225	0.9664739
1455	0.9578782	1.0365799	1.0377679	1.0287556	1.0231473	0.9662696
1456	0.9580144	1.0365818	1.0375951	1.0289269	1.0233546	0.9660852
1458	0.9581776	1.0365583	1.0373859	1.0290682	1.0235443	0.9659222
1459	0.9583679	1.0365076	1.0371419	1.0291830	1.0237145	0.9657791
1460	0.9585854	1.0364314	1.0368613	1.0292693	1.0238636	0.9656560
1461	0.9588335	1.0363261	1.0365422	1.0293236	1.0239915	0.9655577
1462	0.9591124	1.0361881	1.0361844	1.0293458	1.0240963	0.9654845
1463	0.9594237	1.0360209	1.0357897	1.0293391	1.0241745	0.9654362
1465	0.9597662	1.0358224	1.0353525	1.0292964	1.0242294	0.9654132
1466	0.9601447	1.0355873	1.0348763	1.0292230	1.0242559	0.9654186
1467	0.9605579	1.0353191	1.0343573	1.0291132	1.0242553	0.9654527
1468	0.9610126	1.0350123	1.0337936	1.0289671	1.0242226	0.9655204
1469	0.9615024	1.0346667	1.0331887	1.0287860	1.0241591	0.9656171
1470	0.9620341	1.0342841	1.0325387	1.0285682	1.0240649	0.9657479
1472	0.9626081	1.0338588	1.0318436	1.0283134	1.0239362	0.9659128
1473	0.9632246	1.0333889	1.0311049	1.0280197	1.0237694	0.9661154
1474	0.9638873	1.0328761	1.0303189	1.0276867	1.0235660	0.9663560
1475	0.9645964	1.0323184	1.0294871	1.0273162	1.0233241	0.9666348
1476	0.9653542	1.0317120	1.0286076	1.0269044	1.0230417	0.9669553
1478	0.9661642	1.0310531	1.0276820	1.0264545	1.0227152	0.9673196
1479	0.9670253	1.0303451	1.0267083	1.0259628	1.0223459	0.9677279
1480	0.9679414	1.0295860	1.0256862	1.0254327	1.0219320	0.9681807
1481	0.9689128	1.0287702	1.0246191	1.0248620	1.0214678	0.9686832
1482	0.9699419	1.0278973	1.0235033	1.0242487	1.0209548	0.9692361
1483	0.9710311	1.0269690	1.0223385	1.0235962	1.0203928	0.9698379
1485	0.9721842	1.0259777	1.0211281	1.0229043	1.0197761	0.9704960
1486	0.9733985	1.0249267	1.0198701	1.0221708	1.0191061	0.9712075
1487	0.9746801	1.0238122	1.0185641	1.0213974	1.0183789	0.9719764
1488	0.9760313	1.0226338	1.0172101	1.0205836	1.0175943	0.9728050
1489	0.9774495	1.0213894	1.0158114	1.0197293	1.0167517	0.9736940
1490	0.9789408	1.0200750	1.0143695	1.0188397	1.0158455	0.9746457
1482	0.9805063	1.0186939	1.0128788	1.0179089	1.0148806	0.9756610
1483	0.9821469	1.0172420	1.0113445	1.0169405	1.0138494	0.9767423
1484	0.9838670	1.0157172	1.0097663	1.0159358	1.0127532	0.9778923
1485	0.9856645	1.0141209	1.0081477	1.0148966	1.0115916	0.9791101
1486	0.9875440	1.0124490	1.0064848	1.0138188	1.0103606	0.9804001
1487	0.9895068	1.0107047	1.0047810	1.0127076	1.0090631	0.9817618
1488	0.9915541	1.0088841	1.0030361	1.0115611	1.0076970	0.9831978
1489	0.9936857	1.0069865	1.0012553	1.0103843	1.0062598	0.9847076

Fig. 7.16.- Resultados MC para el modelo de Ising y dinámicas de cúmulos: razones de cúmulos.

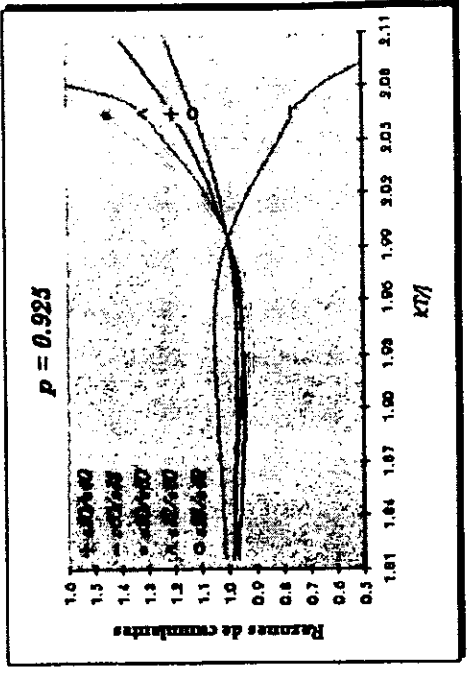
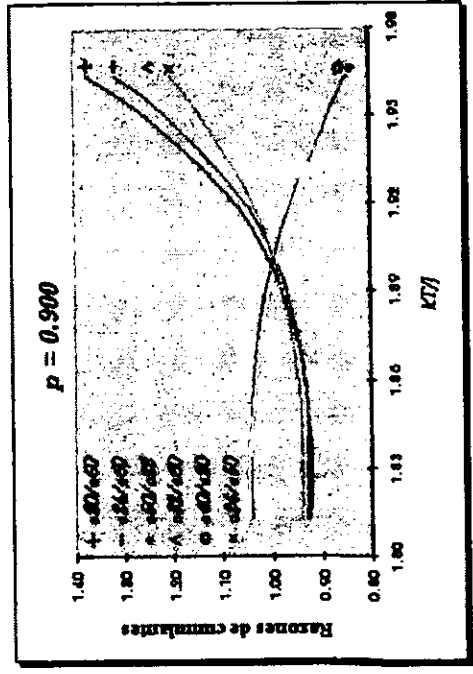
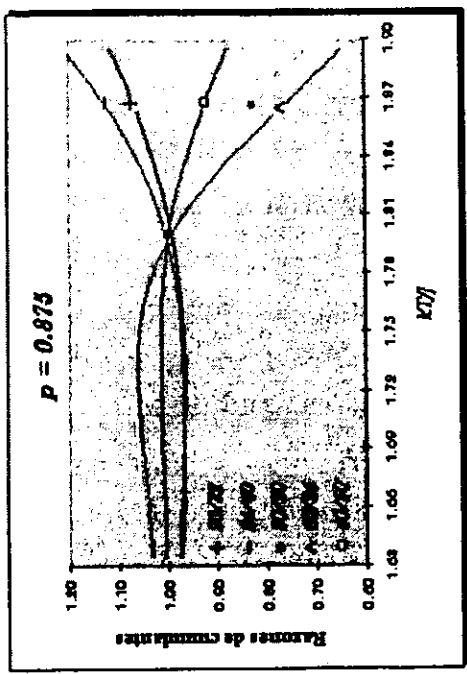
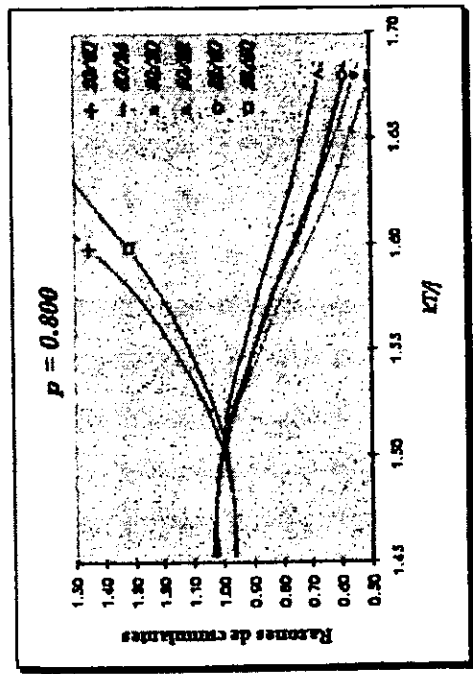
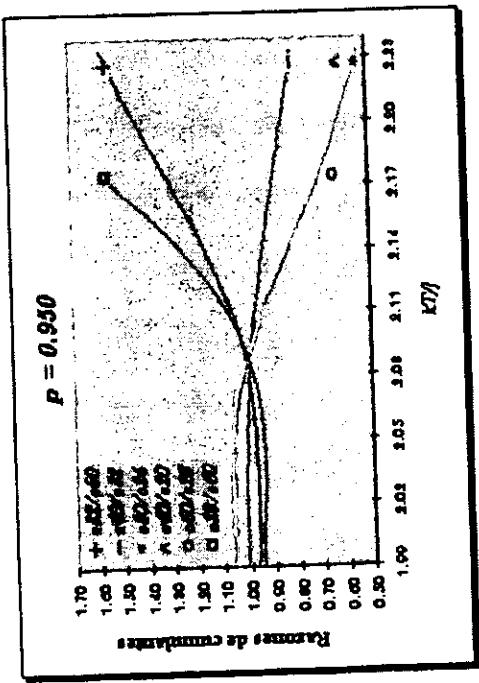
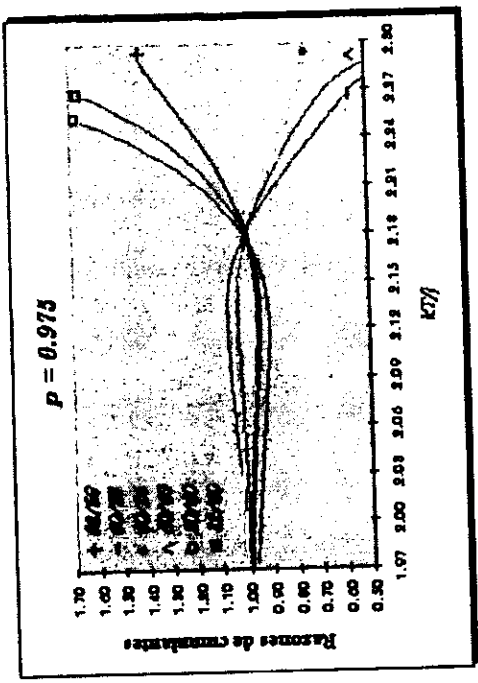


Fig. 7.16.- Continuación.



4.- Escalamiento a tamaño finito.

► Parámetro de orden.

El análisis de escalamiento a tamaño finito para el modelo de Ising 2d y dinámica de cúmulos para el parámetro de orden se muestra en la figura 7.17.

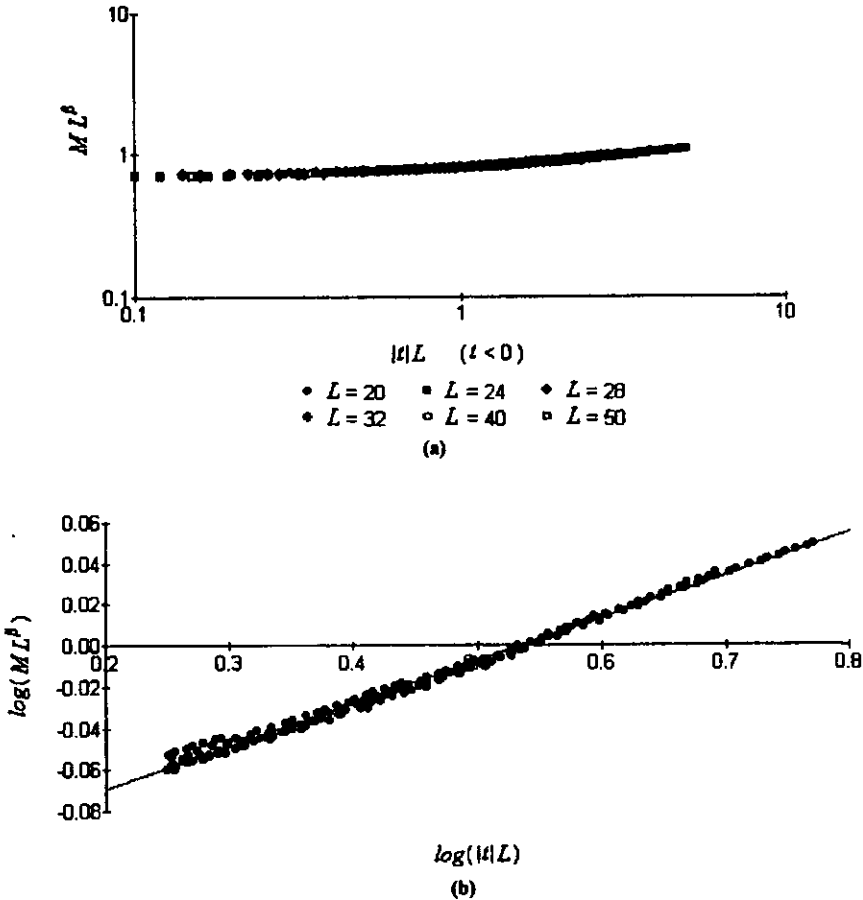


Fig. 7.17.- (a).- Función de escalamiento para el parámetro de orden en el modelo de Ising 2d con dinámica de cúmulos. Los valores de los exponentes críticos ajustados son: $\nu = 1$, $\beta = 1/8$. (b).- Ajuste de recta para valores grandes del argumento. El valor de la concentración de espines es $p = 0.900$.

>Susceptibilidad alternada.

En cuanto al escalamiento de la susceptibilidad, los resultados se muestran en la figura 7.18.

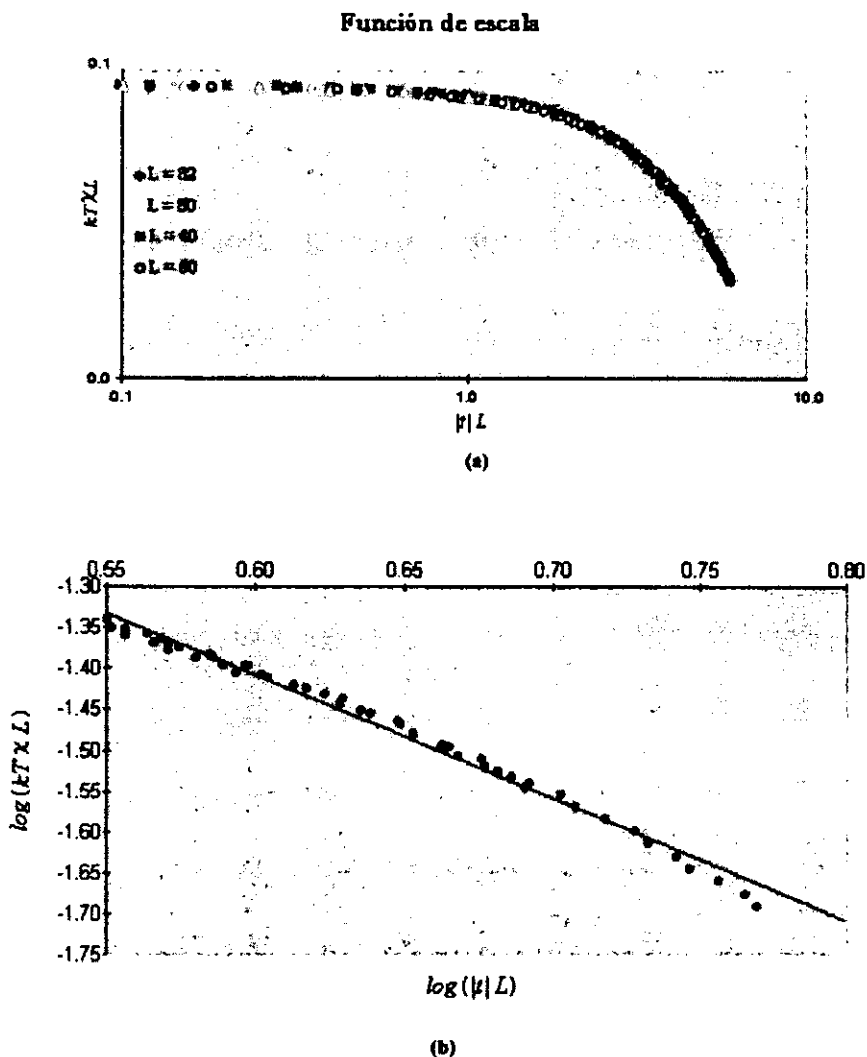


Fig. 7.18.- (a).- Función de escala para la susceptibilidad en el modelo de Ising 2d con dinámica de cúmulos. Los valores de los exponentes críticos ajustados son: $\nu = 1$, $\gamma = 7/4$. (b).- Ajuste de recta para valores grandes del argumento. El valor de la concentración de espines es $p = 0.900$.

5.- Diagrama de fase T_c vs. p .

De manera semejante al caso de la simulación con el algoritmo de Metropolis, la intersección de las razones de cumulantes permite una estimación de la temperatura crítica para cada valor de la concentración de espines p [7.2]. Los resultados de tales estimaciones se muestran en la tabla 7.18 para la simulación MC con dinámica de cúmulos.

Tabla 7.18.- Diagrama de fase T_c vs. p para el modelo de Ising diluido con dinámica de cúmulos. Se incluye una estimación del error estadístico asociado a la determinación del diagrama, así como una comparación con resultados publicados en la literatura: ~ [7.7] * [7.8] ^ [7.9] ^ [7.10] # [7.11]

0.593	aprox 0	
0.600	0.412 "	
0.650	0.807 "	
0.666	0.929 ^	
0.666	0.909 *	
0.700	1.049 "	
0.700	1.05-1.08 '	
0.700	1.101 #	
0.750	1.2966 *	
0.750	1.300 ^	
0.800	1.505	0.005
0.800	1.506 "	
0.800	1.571 ^	
0.800	1.498 #	
0.850	1.708 "	
0.875	1.805	0.005
0.889	1.893 ^	
0.889	1.861 *	
0.900	1.899	0.009
0.900	1.901 '	
0.900	1.902 "	
0.900	1.903 #	
0.925	1.995	0.008
0.950	2.085	0.008
0.950	2.143 ^	

La consistencia entre estos valores y los que se obtienen mediante la simulación MC con el algoritmo de Metropolis es notable, la diferencia entre estas dos mediciones permite una estimación del error estadístico asociado a los valores de $T_c(p)$ así obtenidos, los cuales se incluyen en la Tabla 7.18. Los mismos resultados se muestran de manera gráfica en la figura 7.19. En la tabla se incluyen también, a modo de comparación, los valores de T_c reportados en la literatura para otros valores de p y calculados mediante técnicas varias.

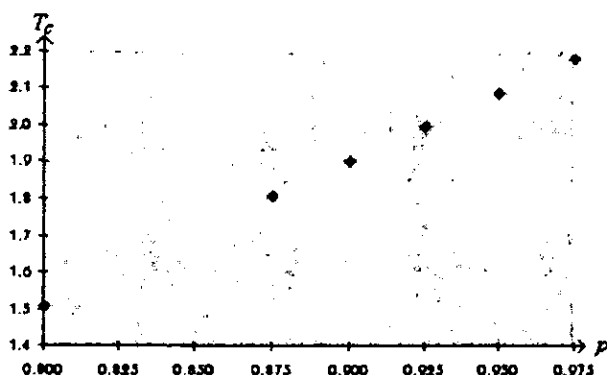


Fig. 7.19.- Diagrama T_c vs. p para el modelo de Ising 2d diluido. Resultados para la simulación con dinámica de cúmulos.

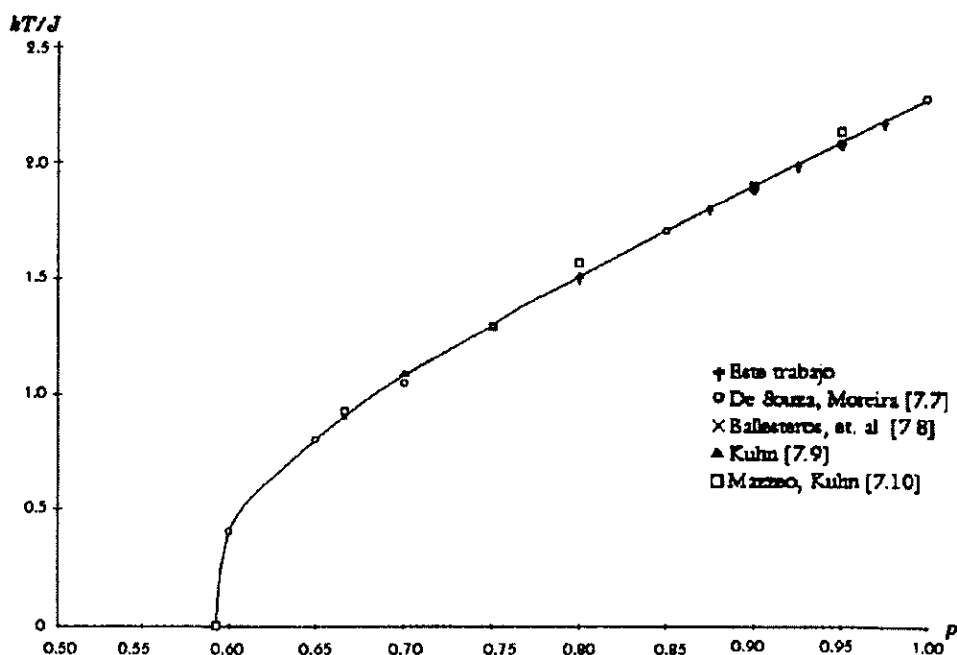


Fig. 7.20.- Diagrama de fases: comparación con otros estudios.

Los métodos empleados en las investigaciones reportadas en la fig. 7.20 son varios: en la ref. [7.7] se emplea un método de grupo de renormalización - montecarlo (MCRG), en [7.8] se hace uso de una técnica MC de cumulantes (variante de un solo cúmulo de Wolff), en tanto que en [7.9] se investiga una técnica que combina la aproximación de gran ensamble con renormalización fenomenológica. Finalmente,

en [7.10] se aplica un mapeo del modelo hacia un sistema en equilibrio termodinámico y se investiga mediante técnicas de matriz de transferencia, invariancia conforme y renormalización fenomenológica. Esta serie de investigaciones permiten la construcción completa del diagrama de fase para el modelo en estudio, y muestran la precisión lograda en su determinación, así como la consistencia entre las distintas técnicas empleadas.

7.3. - Modelo XY (interacciones ferromagnéticas).

(a) Resultados para dinámica tradicional.

1.- Código en FORTRAN para el algoritmo con dinámica tradicional.

```

PROGRAM XY FOR
PARAMETER(To = 1.32,L = 128,Noeq = 10000,deltaT = 0.02)
PARAMETER(N_TEMP = 26,PASOSMC = 110000,IMP = 10000)
DOUBLE PRECISION  MagTx,MagTy,MagT,ET,suscx,suscy,suscT,ce
DOUBLE PRECISION  phil, phir, phiu, phid
DOUBLE PRECISION  deltaE, razon, T
DOUBLE PRECISION  XY(L,L),DOSPI
DOUBLE PRECISION  Mo, Mx, My, E
DOUBLE PRECISION  deltaphi, deltaphimax
INTEGER n_acept,n_ajuste,SEED,N
INTEGER x, y
INTEGER xp, yp
INTEGER xm, ym
OPEN(UNIT = 10, FILE = "XY", STATUS = 'NEW')
WRITE(10,*) ' SALIDA DEL PROGRAMA XY.F '
WRITE(10,*) 'longitud lineal de la malla: ', L
WRITE(10,*) 'Numero de pasos MC por spin',PASOSMC-Noeq
WRITE(10,*) 'Se han realizado configuraciones hacia el
+ equilibrio = ',Noeq
WRITE(10,*) 'mcs kT/J M(X) M(Y) M ENERGIA SUSC(X) SUSC(Y)
+ CAL. ESP.'
DOSPI = 6.2831853071
SEED = 3543
deltaphimax = 0.5
Mo = L*L
n_ajuste = 5
n_acept = 0
NORM = PASOSMC - Noeq
DO 30 k = 1,N_TEMP
  seed = int(10000*ran(seed) + 1)
  T = To - deltaT*k
  MagTx = 0.0
  MagTy = 0.0
  MagT = 0.0
  ET = 0.0
  suscx = 0.0
  suscy = 0.0
  suscT = 0.0

```

```

ce = 0.0
DO 45 j = 1,L
DO 45 i = 1,L
  XY(i,j) = 0.0
CONTINUE
DO 60 n = 1,PASOSMC
DO 75 y = 1,L
  yp = y + 1
  ym = y - 1
  IF(y .EQ. 1) ym = L
  IF(y .EQ. L) yp = 1
DO 90 x = 1,L
  xp = x + 1
  xm = x - 1
  IF(x .EQ. 1) xm = L
  IF(x .EQ. L) xp = L
  deltaphi = (1 - 2*ran(seed))*deltaphimax
  phil = XY(x,y) - XY(xm,y)
  phir = XY(x,y) - XY(xp,y)
  phiu = XY(x,y) - XY(x,ym)
  phid = XY(x,y) - XY(x,yp)
  deltaE =
+ cos(DMOD(phil,DOSPI))-cos(DMOD(phil+deltaphi,DOSPI))+
+ cos(DMOD(phir,DOSPI))-cos(DMOD(phir+deltaphi,DOSPI))+
+ cos(DMOD(phiu,DOSPI))-cos(DMOD(phiu+deltaphi,DOSPI))+
+ cos(DMOD(phid,DOSPI))-cos(DMOD(phid+deltaphi,DOSPI))
  IF (deltaE .LE. 0) THEN          !ACEPTA EL MOVIMIENTO.
    XY(x,y) = XY(x,y) + deltaphi
    n_acept = n_acept + 1
  ELSE IF(exp(-deltaE/T) .GT. ran(seed)) THEN
    ! ACEPTA EL MOVIMIENTO CON PROBABILIDAD EXP(-ΔE/T)
    XY(x,y) = XY(x,y) + deltaphi
    n_acept = n_acept + 1
  END IF
90   CONTINUE          !ciclo en x
75   CONTINUE          !ciclo en y
!***** CONTROL DE LA RAZÓN DE ACEPTADOS *****
  IF(mod(n,n_ajuste) .EQ. 0) THEN
    razon = real(n_acept)/real(n_ajuste*Mo)
    IF(razon .GT. 0.5) THEN
      deltaphimax = deltaphimax*1.05
    ELSE
      deltaphimax = deltaphimax*0.95
    END IF
  END IF
  n_acept = 0
END IF
IF(n .GT. Noeq) THEN
  E = 0.0
  Mx = 0.0
  My = 0.0

```

```

DO 105 j = 1,L
DO 105 i = 1,L
Mx = Mx + sin(DMOD(XY(i,j),DOSPI))
My = My + cos(DMOD(XY(i,j),DOSPI))
IF((i .NE. 1) .AND. (j .NE. 1)) THEN
+   E = E + cos(DMOD(XY(i,j) - XY(i-1,j),DOSPI)) +
+     cos(DMOD(XY(i,j) - XY(i,j-1),DOSPI))
ELSE IF((i .EQ. 1) .AND. (j .NE. 1)) THEN
+   E = E + cos(DMOD(XY(i,j) - XY(L,j),DOSPI)) +
+     cos(DMOD(XY(i,j) - XY(i,j-1),DOSPI))
ELSE IF((i .NE. 1) .AND. (j .EQ. 1)) THEN
+   E = E + cos(DMOD(XY(i,j) - XY(i-1,j),DOSPI)) +
+     cos(DMOD(XY(i,j) - XY(i,L),DOSPI))
ELSE
+   E = E + cos(DMOD(XY(i,j) - XY(L,j),DOSPI)) +
+     cos(DMOD(XY(i,j) - XY(i,L),DOSPI))
END IF
105 CONTINUE
E = E/Mo
Mx = Mx/Mo
My = My/Mo
MagTx = MagTx + abs(Mx)
MagTy = MagTy + abs(My)
ET = ET + E
suscx = suscx + Mx*Mx
suscY = suscY + My*My
ce = ce + E*E
IF(MOD(N,IMP).EQ.0) THEN
NORM = N-noeq
WRITE(10,100)NORM, T, MagTx/NORM, MagTy/NORM,
+ sqrt(MagTx/NORM*MagTx/NORM + MagTy/NORM*MagTy/NORM),
+ ET/NORM, (suscx/NORM)*Mo, (suscY/NORM)*Mo,
+ sqrt((suscx*Mo/NORM)**2 + (suscY*Mo/NORM)**2),
+ (ce/NORM - ET/NORM*ET/NORM)*Mo
ENDIF
100 FORMAT(1X,I5,F10.4,F9.4,F9.4,F9.4,F12.4,F9.3,F12.3,F13.3,F13.3)
END IF
60 CONTINUE !ciclo en PASOSMC.
30 CONTINUE !ciclo en T
END

```

2.-Relajación al equilibrio.

En las tablas 7.19 a 7.21 se muestra el comportamiento de distintas cantidades termodinámicas de interés como función del tiempo [†] para el modelo XY usando el algoritmo de Metropolis.

[†] En este contexto, el tiempo es aquel introducido por la dinámica estocástica asociada a la simulación MC.

Tabla 7.19.- Relajación hacia el equilibrio de la magnetización (rms) en el modelo XY para dos temperaturas. Resultados de la simulación MC con el algoritmo de Metropolis.

$KT/J = 1.04$		MAG.			
tiempo	L = 15	L = 30	L = 60	L = 128	
10000	0.4336	0.3321	0.2546	0.1141	
20000	0.4221	0.3036	0.2469	0.1352	
30000	0.4180	0.3110	0.2800	0.1439	
40000	0.4134	0.3176	0.2769	0.1554	
50000	0.4068	0.3254	0.2730	0.1525	
60000	0.3982	0.3359	0.2866	0.1417	
70000	0.3973	0.3337	0.2777	0.1362	
80000	0.3940	0.3309	0.2799	0.1319	
90000	0.3959	0.3366	0.2740	0.1272	
100000	0.3964	0.3220	0.2810	0.1250	

$KT/J = 0.94$		MAG.			
tiempo	L = 128	L = 60	L = 30	L = 15	
10000	0.4420	0.5463	0.5882	0.6286	
20000	0.4817	0.5495	0.5726	0.6431	
30000	0.4752	0.5320	0.5675	0.6339	
40000	0.4852	0.5345	0.5740	0.6342	
50000	0.4868	0.5375	0.5707	0.6315	
60000	0.4841	0.5276	0.5689	0.6275	
70000	0.4881	0.5159	0.5690	0.6268	
80000	0.4914	0.5084	0.5687	0.6265	
90000	0.4861	0.5116	0.5672	0.6263	
100000	0.4772	0.5130	0.5674	0.6267	

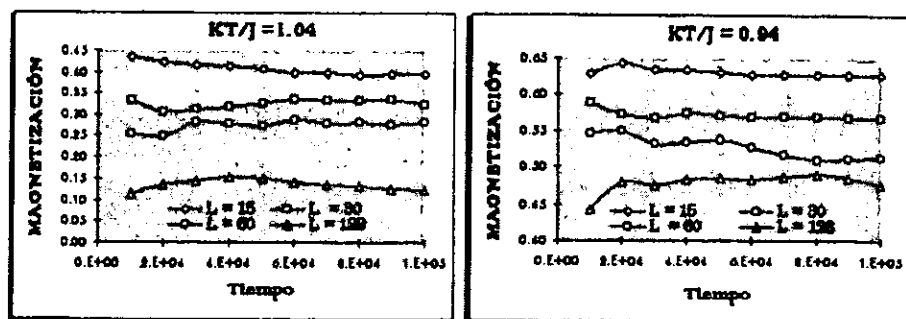


Fig. 7.21.- Relajación al equilibrio de la magnetización rms en el modelo XY.

Tabla 7.20.- Relajación hacia el equilibrio de la energía en el modelo XY para dos temperaturas. Resultados de la simulación MC con el algoritmo de Metropolis.

$kT/J = 1.04$		Energía			
tiempo	L = 15	L = 30	L = 60	L = 128	
10000	1.2950	1.2637	1.2601	1.2602	
20000	1.2888	1.2681	1.2593	1.2602	
30000	1.2870	1.2654	1.2625	1.2606	
40000	1.2872	1.2666	1.2625	1.2609	
50000	1.2866	1.2680	1.2619	1.2611	
60000	1.2861	1.2683	1.2633	1.2610	
70000	1.2860	1.2691	1.2633	1.2611	
80000	1.2858	1.2691	1.2633	1.2609	
90000	1.2864	1.2697	1.2628	1.2607	
100000	1.2863	1.2694	1.2632	1.2608	

$kT/J = 0.94$		Energía			
tiempo	L = 128	L = 60	L = 30	L = 15	
10000	1.3955	1.3965	1.3972	1.4066	
20000	1.3961	1.3972	1.3989	1.4077	
30000	1.3958	1.3970	1.3990	1.4081	
40000	1.3961	1.3969	1.3996	1.4069	
50000	1.3961	1.3969	1.3996	1.4067	
60000	1.3959	1.3970	1.3996	1.4071	
70000	1.3961	1.3970	1.3994	1.4068	
80000	1.3962	1.3970	1.3994	1.4067	
90000	1.3962	1.3972	1.3992	1.4068	
100000	1.3959	1.3972	1.3993	1.4072	

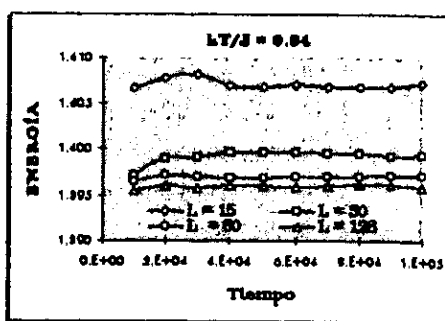
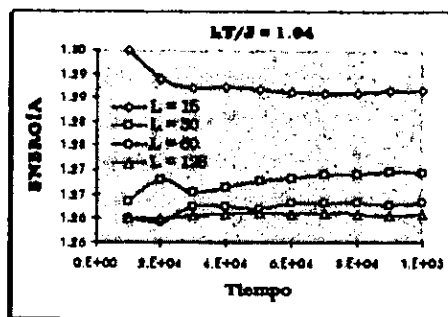


Fig. 7.22.- Relajación hacia el equilibrio de la energía por espín para el modelo XY.

Tabla 7.21.- Relajación hacia el equilibrio de la susceptibilidad magnética en el modelo XY para dos temperaturas. Resultados de la simulación MC con el algoritmo de Metropolis.

$kT/J = 1.04$	Suscept. magnética			
	tiempo	$L = 15$	$L = 30$	$L = 60$
10000	63.56	140.60	235.41	245.04
20000	61.63	149.05	221.93	316.89
30000	60.97	141.96	278.65	347.42
40000	60.98	146.18	272.09	395.76
50000	60.55	150.19	268.57	388.82
60000	60.19	152.29	293.69	345.16
70000	60.13	153.69	282.76	328.75
80000	60.03	153.01	288.44	309.97
90000	60.17	154.65	275.75	290.92
100000	60.19	151.62	286.02	281.27

$kT/J = 0.94$	Suscept. Magnética			
	tiempo	$L = 128$	$L = 60$	$L = 30$
10000	2427.91	1031.88	255.60	80.34
20000	3339.51	1000.69	264.29	82.89
30000	3410.48	909.77	257.79	80.02
40000	3651.97	935.38	265.64	79.92
50000	3719.62	945.95	259.95	78.88
60000	3663.48	903.88	257.85	78.26
70000	3739.47	861.67	256.40	78.16
80000	3697.13	832.35	256.44	78.20
90000	3556.07	847.26	255.04	78.26

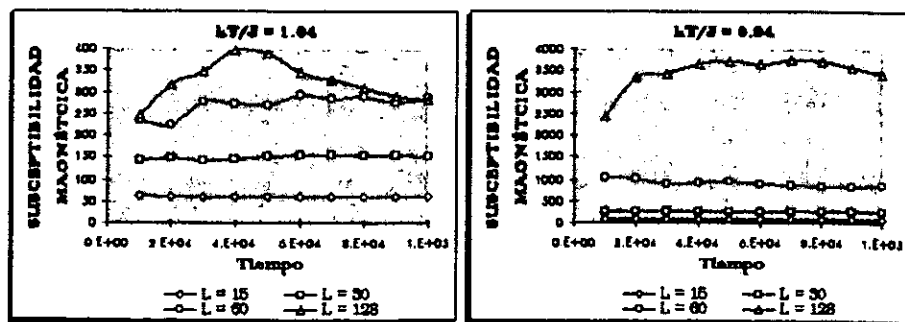


Fig. 7.23.- Relajación hacia el equilibrio de la susceptibilidad magnética para el modelo XY.

3.- C cantidades termodinámicas.

> Magnetización (r. m. s.)

Tabla 7.22.- Magnetización (*rms*) como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L para el modelo XY con dinámica difusiva.

kT/J	$L = 128$	$L = 60$	$L = 30$	$L = 15$
1.30	0.0284	0.0634	0.1242	0.2566
1.28	0.0303	0.0646	0.1337	0.2684
1.26	0.0328	0.0680	0.1399	0.2764
1.24	0.0340	0.0773	0.1514	0.3009
1.22	0.0378	0.0792	0.1606	0.3141
1.20	0.0408	0.0871	0.1774	0.3455
1.18	0.0432	0.0955	0.1969	0.3705
1.16	0.0516	0.1033	0.2123	0.3967
1.14	0.0539	0.1129	0.2341	0.4235
1.12	0.0605	0.1406	0.2603	0.4496
1.10	0.0774	0.1587	0.3154	0.4766
1.08	0.0873	0.1832	0.3530	0.4982
1.06	0.1016	0.2165	0.3901	0.5189
1.04	0.1272	0.2810	0.4206	0.5446
1.02	0.1805	0.3292	0.4614	0.5610
1.00	0.2350	0.4026	0.4875	0.5871
0.98	0.3720	0.4688	0.5326	0.5986
0.96	0.4376	0.5128	0.5552	0.6095
0.94	0.4861	0.5130	0.5674	0.6267
0.92	0.5012	0.5386	0.5901	0.6409
0.90	0.5384	0.5501	0.6022	0.6548
0.88	0.5203	0.5605	0.6003	0.6616
0.86	0.5616	0.5889	0.6205	0.6685
0.84	0.5317	0.5980	0.6393	0.6771
0.82	0.5584	0.6210	0.6413	0.6820
0.80	0.6178	0.6150	0.6522	0.6915

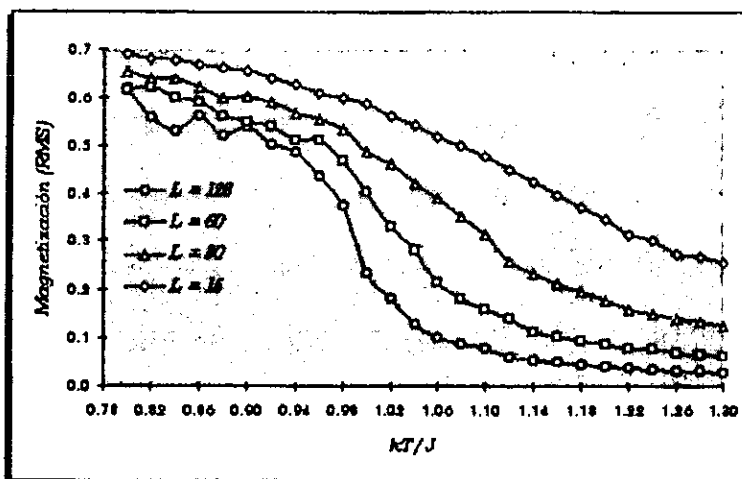


Fig. 7.24.- Magnetización (rms) como función de la temperatura y la longitud de la malla para el modelo XY con dinámica de Glauber.

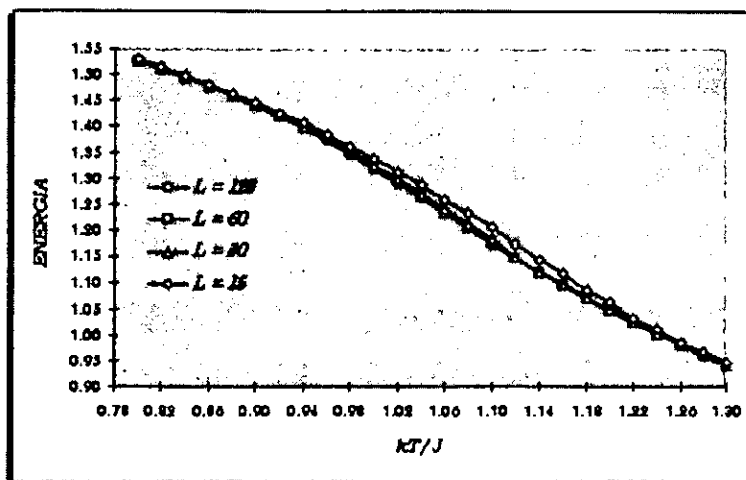


Fig. 7.25.- Energía por espín como función de la temperatura y la longitud de la malla para el modelo XY con dinámica de Glauber.

▷ Energía.

Tabla 7.23.- Energía por espin como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L para el modelo XY con dinámica difusiva.

kT/J	$L = 128$	$L = 60$	$L = 30$	$L = 15$
1.30	0.9399	0.9399	0.9405	0.9458
1.28	0.9596	0.9597	0.9603	0.9677
1.26	0.9803	0.9802	0.9807	0.9849
1.24	1.0016	1.0019	1.0025	1.0094
1.22	1.0236	1.0235	1.0244	1.0324
1.20	1.0467	1.0465	1.0474	1.0625
1.18	1.0703	1.0705	1.0730	1.0880
1.16	1.0958	1.0953	1.0974	1.1179
1.14	1.1212	1.1216	1.1225	1.1453
1.12	1.1480	1.1471	1.1510	1.1748
1.10	1.1752	1.1759	1.1816	1.2053
1.08	1.2037	1.2033	1.2108	1.2324
1.06	1.2314	1.2323	1.2415	1.2588
1.04	1.2607	1.2632	1.2694	1.2863
1.02	1.2901	1.2924	1.2995	1.3115
1.00	1.3180	1.3220	1.3258	1.3386
0.98	1.3474	1.3502	1.3534	1.3611
0.96	1.3725	1.3749	1.3776	1.3839
0.94	1.3962	1.3972	1.3993	1.4072
0.92	1.4184	1.4193	1.4203	1.4248
0.90	1.4385	1.4388	1.4409	1.4448
0.88	1.4575	1.4581	1.4595	1.4628
0.86	1.4762	1.4764	1.4771	1.4807
0.84	1.4937	1.4938	1.4941	1.4972
0.82	1.5104	1.5107	1.5115	1.5153
0.80	1.5268	1.5272	1.5277	1.5282

➤ Susceptibilidad magnética.

Tabla 7.24.- Susceptibilidad magnética como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L , para el modelo XY con dinámica difusiva.

kT/J	$L = 128$	$L = 60$	$L = 30$	$L = 15$
1.30	14.94	16.17	15.21	15.50
1.28	16.84	16.83	17.51	16.88
1.26	19.69	18.49	19.17	17.94
1.24	21.01	23.42	22.64	20.84
1.22	25.81	24.60	25.29	22.56
1.20	29.83	30.24	30.31	26.76
1.18	34.12	36.15	36.97	30.15
1.16	47.44	42.48	42.78	34.16
1.14	52.11	50.71	51.97	38.15
1.12	66.69	76.86	63.33	42.63
1.10	111.24	98.03	86.95	47.41
1.08	132.95	129.73	105.79	51.40
1.06	195.71	175.78	130.55	55.38
1.04	290.92	286.02	151.62	60.19
1.02	583.46	376.83	176.13	63.68
1.00	958.94	536.28	194.23	68.70
0.98	2069.97	710.79	221.05	71.52
0.96	2628.46	783.94	240.71	74.83
0.94	3556.07	857.57	255.30	78.41
0.92	3454.94	904.81	273.11	81.07
0.90	4568.38	965.96	286.19	83.85
0.88	3742.16	1027.34	294.57	85.88
0.86	4441.60	1101.06	306.40	87.98
0.84	4460.93	1106.50	315.58	90.67
0.82	4592.19	1218.39	326.24	92.77
0.80	5711.70	1215.23	335.78	94.15

➤ Calor específico.

Tabla 7.25.- Calor específico como función de la temperatura kT/J y el tamaño de la malla L para el modelo XY con dinámica difusiva.

kT/J	$L = 128$	$L = 60$	$L = 30$	$L = 15$
1.30	1.631	1.641	1.642	1.740
1.28	1.647	1.655	1.654	1.777
1.26	1.635	1.663	1.632	1.780
1.24	1.658	1.635	1.643	1.845
1.22	1.670	1.694	1.680	1.855
1.20	1.666	1.702	1.700	1.871
1.18	1.702	1.691	1.736	1.883
1.16	1.719	1.707	1.729	1.891
1.14	1.672	1.706	1.711	1.880
1.12	1.674	1.733	1.788	1.817
1.10	1.679	1.689	1.766	1.773
1.08	1.616	1.717	1.760	1.679
1.06	1.589	1.651	1.722	1.551
1.04	1.535	1.659	1.653	1.452
1.02	1.525	1.552	1.475	1.321
1.00	1.442	1.404	1.329	1.188
0.98	1.262	1.207	1.199	1.100
0.96	1.129	1.116	1.072	1.027
0.94	0.994	0.969	0.953	0.891
0.92	0.888	0.859	0.870	0.839
0.90	0.799	0.786	0.779	0.743
0.88	0.743	0.718	0.705	0.699
0.86	0.664	0.657	0.653	0.645
0.84	0.604	0.605	0.599	0.600
0.82	0.569	0.559	0.555	0.535
0.80	0.514	0.512	0.519	0.496

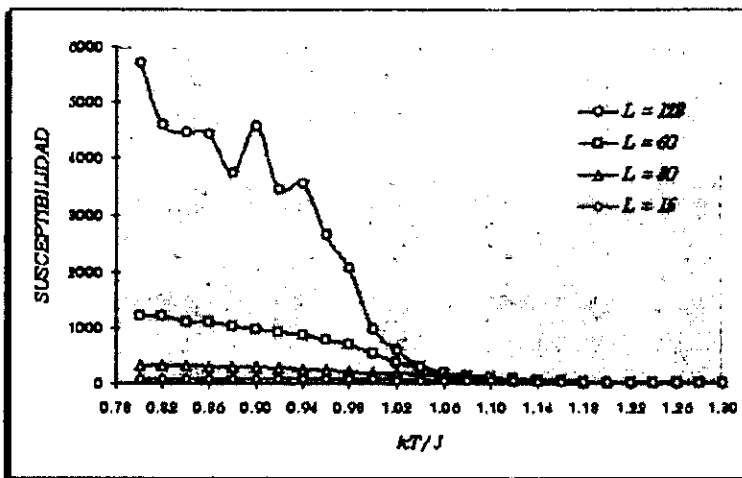


Fig. 7.26.- Susceptibilidad magnética como función de la temperatura y la longitud de la malla para el modelo XY con dinámica de Glauber.

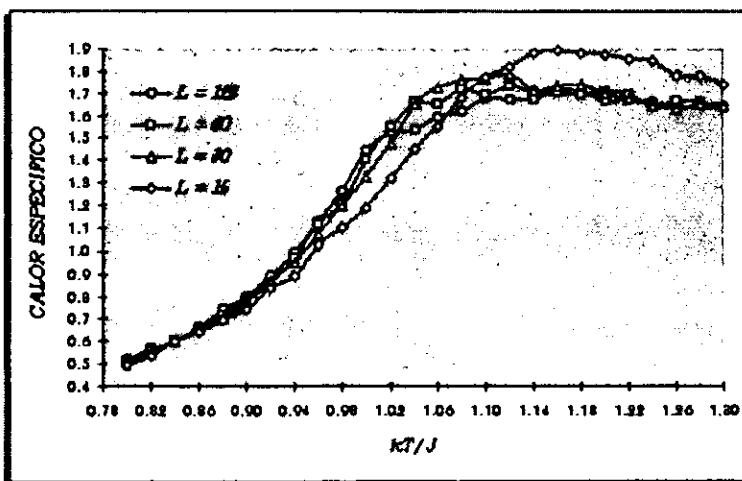


Fig. 7.27.- Calor específico como función de la temperatura y la longitud de la malla para el modelo XY con dinámica de Glauber.

4.- Ajuste de datos a la forma KT.

En la tabla 7.26 se muestran las distintas cantidades termodinámicas medidas con una estimación de su desviación estándar. Estos datos son importantes en la estimación de algunos de los exponentes críticos, particularmente el asociado a la divergencia de la susceptibilidad.

Tabla 7.26.- Cantidades termodinámicas en el modelo XY con estimación de la desviación estándar. El tamaño de la malla es $L = 128$.

1.30	0.0203	0.0034	0.0205	0.0035	0.0235	0.0045	0.9402	0.0022
1.35	0.0217	0.0035	0.0215	0.0036	0.0306	0.0061	0.9595	0.0022
1.38	0.0236	0.0038	0.0231	0.0039	0.0330	0.0055	0.9505	0.0023
1.34	0.0244	0.0040	0.0255	0.0043	0.0552	0.0080	1.0015	0.0023
1.32	0.0251	0.0042	0.0266	0.0045	0.0365	0.0080	1.0236	0.0023
1.30	0.0259	0.0045	0.0293	0.0050	0.0422	0.0080	1.0468	0.0023
1.18	0.0317	0.0052	0.0225	0.0045	0.0426	0.0071	1.0790	0.0023
1.16	0.0334	0.0057	0.0337	0.0057	0.0429	0.0081	1.0087	0.0023
1.14	0.0400	0.0066	0.0405	0.0065	0.0569	0.0082	1.1209	0.0023
1.12	0.0441	0.0070	0.0423	0.0065	0.0611	0.0086	1.1470	0.0023
1.10	0.0540	0.0084	0.0487	0.0072	0.0727	0.0110	1.1798	0.0023
1.08	0.0670	0.0098	0.0655	0.0085	0.0937	0.0132	1.2056	0.0023
1.06	0.0819	0.0102	0.0787	0.0100	0.1122	0.0145	1.2328	0.0023
1.04	0.0901	0.0106	0.0929	0.0117	0.1227	0.0189	1.2603	0.0021
1.02	0.1719	0.0107	0.1517	0.0113	0.2292	0.0155	1.2910	0.0023
1.00	0.1102	0.0098	0.1361	0.0114	0.1751	0.0180	1.3175	0.0020
0.96	0.3013	0.0125	0.1914	0.0119	0.2571	0.0169	1.3476	0.0019
0.96	0.1799	0.0150	0.4101	0.0103	0.4473	0.0154	1.3730	0.0018
0.94	0.2458	0.0105	0.3064	0.0090	0.4654	0.0133	1.3988	0.0017
0.92	0.2284	0.0115	0.4177	0.0097	0.4761	0.0141	1.4181	0.0016
0.90	0.2242	0.0125	0.4242	0.0100	0.5189	0.0159	1.4331	0.0016
0.88	0.4001	0.0120	0.3473	0.0112	0.5295	0.0164	1.4575	0.0015
0.86	0.2370	0.0132	0.4997	0.0094	0.5530	0.0142	1.4761	0.0014
0.84	0.2991	0.0141	0.5005	0.0105	0.5830	0.0162	1.4936	0.0014
0.82	0.1637	0.0130	0.3853	0.0070	0.6078	0.0100	1.5105	0.0013
0.80	0.2468	0.0134	0.5650	0.0073	0.6164	0.0130	1.5200	0.0012

Tabla 7.26.- Continuación.

1.30	11	3	11	3	15	5
1.28	12	4	12	4	17	5
1.26	14	4	14	4	20	6
1.24	15	5	17	5	23	7
1.22	16	5	18	5	24	7
1.20	23	7	23	7	32	10
1.18	26	8	21	7	34	10
1.16	32	9	30	9	44	13
1.14	42	12	42	12	60	17
1.12	50	14	48	12	65	19
1.10	78	21	60	15	99	26
1.08	113	28	103	23	153	36
1.06	187	32	144	31	213	45
1.04	171	38	209	43	270	57
1.02	654	64	503	60	825	87
1.00	322	40	458	57	540	89
0.98	1986	117	825	80	1259	141
0.96	714	87	2839	138	2928	153
0.94	1436	85	2934	105	3267	157
0.92	1358	88	3193	123	3499	167
0.90	1786	118	3324	146	3750	183
0.88	2984	143	2401	129	3791	192
0.86	1811	102	4298	145	4494	169
0.84	1853	134	4266	164	4851	204
0.82	590	71	5649	133	5680	140
0.80	1308	103	5297	133	5458	154

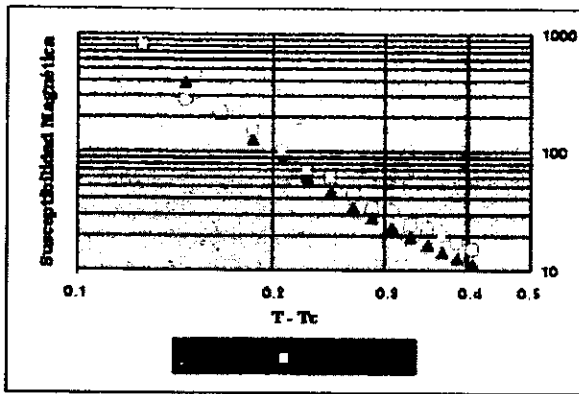
Los resultados anteriores permiten una estimación del exponente asociado a la divergencia de la susceptibilidad magnética mediante un ajuste de mínimos cuadrados a la forma KT , a saber

$$\chi = a_x e^{b_x T^v}$$

los resultados para este ajuste se muestran en la tabla 7.27 y de manera gráfica en la figura 7.28. En el ajuste se supuso conocido el valor de $T_c = 0.894$, valor estimado en otras simulaciones. [7.3-6, 6.27-28]

Tabla 7.27.- Valores de los parámetros ajustados a la forma KT .

a	0.5993
b	1.4625
v	0.7724

Fig. 7.28.- Ajuste de los valores de la susceptibilidad a la forma $K(T - T_c)$.

CONCLUSIONES.

El método Monte Carlo ha ido superando sistemáticamente las limitaciones que anteriormente lo hacían de limitado interés en el estudio de sistemas modelo complejos: el desarrollo de la tecnología del cómputo a niveles hardware y software, así como de algoritmos cada vez más eficientes, hacen del método MC un método competitivo en el estudio de fenómenos complejos en la naturaleza. El estudio del modelo de Ising diluido presentado en esta tesis arroja resultados que son consistentes con los resultados de la solución exacta del sistema sin diluir en el límite de dilución ligera. La construcción del diagrama de fases para este modelo se ha realizado mediante el cálculo del cumulante de orden cuatro, útil en la determinación de la temperatura crítica, en tanto que el tiempo efectivo de cómputo se ha reducido gracias a la técnica de pesos estadísticos con histogramas. En lo que respecta a la simulación del modelo XY, modelo que no se ha resuelto de manera cerrada, los resultados muestran que aún una simulación usando el método de Metropolis permite visualizar el comportamiento crítico del sistema; en particular, los resultados muestran una clara tendencia divergente de las fluctuaciones de la magnetización, así como una tendencia de la magnetización misma a reducir su valor absoluto conforme se aumenta el tamaño de la malla. Mediante el ajuste de los datos a la forma propuesta por Kosterlitz y Thouless, es posible una estimación del exponente crítico asociado a la divergencia de la susceptibilidad magnética, las diferencias con respecto a los valores estimados con otras aproximaciones tales como grupo de renormalización y otros se pueden reducir mediante el aumento en el tamaño del sistema. En cuanto al análisis de resultados mediante la técnica de histogramas, su empleo en la simulación del modelo de Ising diluido ha permitido extraer una mayor cantidad de información de la simulación, haciendo posible aumentar el muestreo de configuraciones de dilución en el doble promedio requerido para los sistema diluidos.

Las simulaciones realizadas sientan las bases para la investigación de un modelo teórico ⁴ que pudiese ser relevante en la superconductividad de alta temperatura de transición, modelo en el que existe una dilución mutua entre los dos modelos estudiados en este trabajo, y donde el parámetro asociado a la dilución es la concentración x de átomos de impureza, e. g. Sr en el compuesto $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, siendo esta dilución tal que existe un cambio de anisotropía de tipo Ising antiferromagnético a tipo XY ferromagnético. Uno de los objetivos del estudio MC de este modelo es la construcción del diagrama de fase T_c vs. x , en tanto que un paso intermedio lo constituye la simulación del modelo XY diluido, en particular el estudio de su diagrama de fase, simulación actualmente en curso y para la cual se aplican las técnicas de dinámica de tiempos cortos, ⁵ que tienen la ventaja de no padecer el frenado crítico (en inglés "critical slowing down").

⁴ Robledo, A., Varea, C. *Physica C*166, pp 334 (1990); Robledo, A. *Physica C*220, pp 271 (1993).

⁵ B. Zheng, M. Schulz, S. Trimper. *Phys. Rev. E*59, R1351 (1999); B. Zheng, *Int. J. Mod. Phys. B*12, 1419 (1998); B. Zheng, *Com. Phys. Comm.* 121-122, 338 (1999).

BIBLIOGRAFIA.

- [1.1].- *The new physics*, Ed. Paul Davies, Cambridge University Press, Cap. 8, 1989.
- [1.2].- R. L. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*. John Wiley & Sons, Inc., 2a edición, 1998.
- [1.3].- R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*. Butterworth Heinemann, 2a edición, 1996.
- [2.1].- D. Stauffer, *Phys. Rep.* **54**, 1 (1979).
- [2.2].- V. K. S. Shante, S. Kirkpatrick, *Adv. Phys.* **20**, 325 (1971).
- [2.3].- J. Hoshen, D. Stauffer, G. H. Bishop, R. J. Harrison, G. P. Quinn, *J. Phys.* **A12** (1979).
- [2.4].- H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. Clarendon, Oxford, 1971.
- [2.5].- *Phase Transitions and Critical Phenomena*. Vol. 1 al 6, editores C. Domb, M. S. Green, Academic, London (1972-1976).
- [2.6].- J. W. Essam, K. M. Gwilym, *J. Phys.* **C4**, L228 (1971) y **C9**, 365 (1976).
- [2.7].- Aharony, A. *Percolation, Directions in condensed matter physics*. World Scientific, Singapore, 1986.
- [2.8].- Mandelbrot, (1982). Citado en referencia [2.7]
- [2.9].- D. Stauffer, *Zeitschrift für Physik* **B37**, 89 (1980); Kapitulnik, Frid y Deutscher, *J. de Physique, Lettres*, **45**, L367 (1984).
- [3.1].- R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*. Pergamon Press. 2a edición, 1996.
- [3.2].- S. R. Eilroth, *The Physics and Chemistry of Solids*. John Wiley & Sons, Inc., 1997.
- [3.3].- M. Plischke, B. Bergersen, *Equilibrium Statistical Physics*. World Scientific, 2a edición.
- [3.4].- L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [3.5].- Ver referencia [3.3].
- [4.1].- N. B. Mermin, H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1133 (1966); N. B. Mermin, *Phys. Rev.* **176**, 250 (1968).
- [4.2].- J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, *J. Phys.* **C6**, 1181 (1973).
- [4.3].- H. E. Stanley, T. A. Kaplan, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 913 (1966).
- [4.4].- F. Wegner, *Z. Phys.* **206**, 465 (1967).
- [4.5].- V. L. Berezinskii, *Sov. Phys.-J. E. T. P.* **32**, 493 (1970).
- [4.6].- F. Spitzer, *Principles of Random Walk*. Princeton, Van Nostrand (1964).
- [4.7].- J. M. Kosterlitz, *J. Phys.* **C7**, 1046 (1974).
- [4.8].- P. W. Anderson, G. Yugal, *J. Phys.* **C4**, 607 (1971).
- [4.9].- P. W. Anderson, G. Yugal, D. R. Hamman, *Phys. Rev.* **B1**, 4464 (1970).
- [5.1].- R. B. Stinchcombe, *Dilute Magnetism, Phase Transitions and Critical Phenomena*. Vol. 7. Londres, Academic Press, 1983.
- [5.2].- S. Kirkpatrick, *Ill-condensed Matter*, Amsterdam, North Holland, 1979.
- [5.3].- V. K. S. Shante, S. Kirkpatrick, *Advanc. Phys.* **20**, 325 (1971).
- [5.4].- J. W. Essam, *Phase Transitions and Critical Phenomena*. Vol. 2, editores C. Domb, M. S. Green, Academic, Londres (1972).
- [5.5].- R. J. Birgeneau, R. A. Cowley, G. Shirane, H. J. Guggenheim, *Phys. Rev. Lett.* **37**, 940 (1976). R. J. Birgeneau, R. A. Cowley, G. Shirane, J. A. Tarvin, H. J. Guggenheim, *Phys. Rev.* **B 21**, 317 (1980).
- [5.6].- R. A. Cowley, G. Shirane, R. J. Birgeneau, H. J. Guggenheim, *Phys. Rev.* **B 15**, 4292 (1977). R. A. Cowley, G. Shirane, R. J. Birgeneau, E. C. Svensson, *Phys. Rev. Lett.* **39**, 894 (1977).

- [5.7].- A. B. Harris, *J. Phys. C* **7**, 1671 (1974).
- [5.8].- J. C. Le Guillou, Zinn-Justin, *Phys. Rev. B* **21**, 3976 (1989).
- [5.9].- R. B. Griffiths, J. L. Lebowitz, *J. Math. Phys.* **9**, 1284 (1968).
- [5.10].- R. B. Griffiths, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 17 (1969).
- [5.11].- A. B. Harris, *Phys. Rev. B* **12**, 203 (1975).
- [5.12].- A. P. Young, *J. Phys. C* **9**, 1103 (1976).
- [5.13].- T. Osawa, K. Sawada, *Prog. Theoret. Phys.* **49**, 83 (1973).
- [5.14].- H. Au-Yang, M. E. Fisher, A. E. Ferdinand, *Phys. Rev. B* **13**, 1283 (1976).
- [5.15].- L. Longa, J. Konior, *Acta Phys. Polonica A* **59**, 223 (1981).
- [5.16].- T. K. Bergstresser, *J. Phys. C* **10**, 3831 (1977).
- [5.17].- R. B. Griffiths, *J. Math. Phys.* **8**, 478, 484 (1967).
- [5.18].- E. Domany, *J. Phys. C* **11**, L337 (1978).
- [5.19].- H. Nishimori, *J. Phys. C* **12**, L641 (1979).
- [5.20].- M. E. Fisher, *Proceedings of the 1970 Varenna Summer School on Critical Phenomena*, Ed. M. S. Green, Londres, Academic Press 1971.
- [5.21].- W. Wildpaner, H. Rauch, K. Binder, *J. Phys. Chem. Solids* **34**, 925 (1973).
- [5.22].- W. Y. Ching, D. L. Huber, *Phys. Rev. B* **13**, 2962 (1976).
- [5.23].- E. Stoll, T. Schneider, *AIP Conf. Proc.* **29**, 490 (1976). E. Stoll, T. Schneider, *J. Phys. A* **9**, L67 (1976).
- [5.24].- A. Sur, J. L. Lebowitz, J. Marro, M. H. Kalos, S. Kirkpatrick, *J. Stat. Phys.* **15**, 345 (1976).
- [5.25].- D. P. Landau, *Physica B* **86-88**, 731 (1977).
- [5.26].- D. Stauffer, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 394 (1975).
- [5.27].- C. Domb, *Advanc. Phys. C* **7**, 2677 (1960).
- [5.28].- R. J. Elliot, *J. Phys. Chem. Solids* **16**, 165 (1960).
- [5.29].- D. J. Morgan, G. S. Rushbrooke, *Mol. Phys. C* **10**, 291 (1961).
- [5.30].- R. J. Elliot, B. R. Heap, *Proc. Roy. Soc. A* **265**, 264 (1962).
- [5.31].- B. R. Heap, *Proc. Phys. Soc.* **82**, 252 (1963).
- [5.32].- R. E. Behringer, *J. Chem. Phys.* **26**, 1504 (1957).
- [5.33].- D. C. Rapaport, *J. Phys. C* **5**, 1830, 2813 (1972).
- [5.34].- G. S. Rushbrooke, G. A. Baker, P. W. Wood, *Phase Transitions and Critical Phenomena*. Vol. **3**, editores C. Domb, M. S. Green, Academic, Londres (1974).
- [5.35].- A. Pékalsi, T. Oguchi, *Prog. Theoret. Phys.* **54**, 1021 (1975).
- [5.36].- J. S. Reeve, D. D. Betts, *J. Phys. C* **8**, 2642 (1975).
- [5.37].- J. S. Reeve, D. D. Betts, J. Rogiers, *J. Phys. C* **10**, 1941 (1977).
- [6.1].- K. Binder, *Monte Carlo Investigations of Phase Transitions and Critical Phenomena*, En *Phase Transitions and Critical Phenomena*. Vol. **5B**, editores C. Domb, M. S. Green, Academic, Londres pp. 1-100 (1976).
- [6.2].- L. D. Fosdick, *Methods Comp. Phys.* **1**, 245 (1963). H. Kahn, En "Symposium on Monte Carlo Methods", Ed. A. Meyer, Nueva York, Wiley, 1956.
- [6.3].- N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [6.4].- W. Feller, *Probability Theory and its Applications*, Nueva York, Wiley, 1950.
- [6.5].- E. Stoll, K. Binder, T. Schneider, *Phys. Rev. B* **6**, 2777 (1972), **B 8**, 3266 (1973).
- [6.6].- L. D. Fosdick, *Methods Comput. Phys.* **1**, 245 (1963). K. Binder, *Physica* **62**, 508 (1972).
- [6.7].- H. Müller-Krumbhaar, K. Binder, *J. Stat. Phys.* **8**, 1 (1973).

- [6.8].- R. J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
- [6.9].- H. Yahata, M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Japan* **27**, 1421 (1969).
- [6.10].- K. Kawasaki, *En Phase Transitions and Critical Phenomena*. Vol. **2**, editores C. Domb, M. S. Green, Academic, Londres (1973).
- [6.11].- M. Suzuki, *Int. J. Magnetism* **1**, 123 (1971).
- [6.12].- L. Van Hove, *Phys. Rev.* **93**, 1374 (1954).
- [6.13].- W. Marshall, R. D. Lowde, *Rep. Prog. Phys.* **31**, 705 (1968).
- [6.14].- K. Binder, H. Rauch, V. Wildpaner, *J. Phys. Chem. Solids* **31**, 391 (1970).
- [6.15].- G. A. Baker, *Phys. Rev.* **124**, 768 (1961).
- [6.16].- K. Binder, D. Stauffer, *J. Stat. Phys.* **6**, 49 (1972).
- [6.17].- K. Binder, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **43**, 33 (1992).
- [6.18].- M. E. Fisher, *Proceedings of the International School of Physics 'Enrico Fermi'*, Curso **51**, Critical Phenomena, Londres, Academic Press 1971.
- [6.19].- M. E. Fisher, A. E. Ferdinand, *Phys. Rev.* **185**, 832 (1969).
- [6.20].- H. Muller-Krumbhaar, K. Binder, *Z. Phys.* **254**, 269 (1972).
- [6.21].- J.-S. Wang, R. H. Swendsen, *Physica A* **167**, 565 (1990).
- [6.22].- R. H. Swendsen, J.-S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
- [6.23].- P. W. Kasteleyn, C. M. Fortuin, *Physica* **57**, 536 (1972).
- [6.24].- R. G. Edwards, A. D. Sokal, *Phys. Rev D* **38**, 2009 (1988).
- [6.25].- M. D. De Meo, D. W. Heermann, K. Binder, *J. Stat. Phys.* **60**, 585 (1990).
- [6.26].- J. Hoshen, R. Kopelman, *Phys. Rev B* **14**, 3438 (1976).
- [6.27].- U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361 (1989).
- [6.28].- U. Wolff, *Phys. Lett. B* **228**, 379 (1989).
- [6.29].- M. Sweeny, *Phys. Rev. B* **27**, 4445 (1983).
- [6.30].- F. Niedermayer, *Phys. Lett. B* **237**, 473 (1990).
- [6.31].- U. Wolff, *Nucl. Phys. B* **322**, 759 (1989). Véase también [6.27].
- [6.32].- R. G. Edwards, J. Goodman, A. D. Sokal, *Nucl. Phys. B* **354**, 289 (1991).
- [6.33].- J. Goodman, A. D. Sokal, *Phys. Rev. D* **40**, 2035 (1989).
- [6.34].- M. Creutz, *Phys. Rev. D* **36**, 515 (1987).
- [6.35].- K. E. Schmidt, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2175 (1983).
- [6.36].- A. M. Ferrenberg, R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988); *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1195 (1989).
- [7.1].- D. P. Landau, *Phys. Rev.* **B7**, 2997 (1976).
- [7.2].- K. Binder, D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, Springer Series in Solid-State Sciences. (1988)
- [7.3].- J. F. Fernández, M. F. Ferreira, J. Stankiewicz, *Phys. Rev. B* **34**, 292 (1986).
- [7.4].- R. Gupta, J. DeLapp, G. Batrouini, G. C. Fox, C. F. Baillie, J. Apostolakis, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1996 (1988).
- [7.5].- C. F. Baillie, R. Gupta, *Nucl. Phys. (Proc. Suppl.) B* **20**, 669 (1991).
- [7.6].- R. Gupta, C. F. Baillie, *Phys. Rev. B* **45**, 2883 (1992).
- [7.7].- A. J. F. de Souza, F. G. Brady Moreira, *Europhys. Lett.* **17**, 491 (1992).
- [7.8].- H. G. Ballesteros, et. al. , *J. Phys. A* **30**, 8379 (1997).
- [7.9].- R. Kuhn, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2269 (1994).
- [7.10].- Giorgio Mazzeo, Reimer Kuhn, *Phys. Rev. E* **60**, 3823 (1999).