

Caracterización de Redes de Ising $\pm J$ mediante desarrollo de algoritmos basados en Topología

Tesis que para obtener el grado de
Maestría en Ciencias
(Física)

PRESENTA

María Concepción Salas Solís
Universidad Autónoma de San Luis Potosí.
Facultad de Ciencias.

Noviembre de 1999.

A MIS PADRES

Agradecimientos

A DIOS

A mi familia, por el apoyo que siempre y día a día me han brindado.

Al Dr. Faustino Aguilera Granja por la dirección de este trabajo, por aguantarme durante todo este tiempo y por el apoyo incondicional que siempre me ha brindado.

Al Dr. Eugenio Vogel por la co-asesoría en este trabajo, por el apoyo brindado, por recibirme en su casa y por permitirme aprender de él.

A Jaime por haberme ayudado desde el inicio de este trabajo y por brindarme su amistad.

A la Familia Contreras Mualin por haberme recibido en su casa durante mis dos estancias en Temuco y por haberme hecho parte de su familia.

A la Familia Illesca Avila por haberme recibido en su hogar y en su corazón.

A la Familia Vogel Osorio por compartir agradables momentos conmigo.

A cada uno de los que conforman el personal del Departamento de Ciencias Físicas de la UFRO por haberme acogido tan bien.

A mis Amigos: Milton, Héctor, Julián, Oscar, Marco, Aquiles, Adriana, y por supuesto al Gordo, por haberme aguantado y apoyado siempre.

A Elsa por ayudarme en todo lo que necesité.

A todos mis compañeros por tratarme excelente.

Al CONACyT por el apoyo económico brindado y por el apoyo a través del contrato 25851-E.

Al Fondo de Apoyo a la Investigación de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí por el apoyo a través del contrato C99-FAI-09-4.50.

Al proyecto de colaboración Instituto de Física UASLP-UFRO apoyado a través del convenio CONACyT-CONICyT con número E120-905.

A la Universidad Autónoma de Nuevo León por el apoyo brindado a través del departamento de becas de posgrado a ex-alumnos.

A la Academia Mexicana de Ciencias a través del TWAS-98.

Al Grupo de Física de Estado Sólido de la Universidad de la Frontera en Temuco, Chile.

Al Fondo de Apoyo al Posgrado del Instituto de Física de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

Resumen

En este trabajo se desarrolló un algoritmo capaz de calcular la energía del estado base y otras propiedades termodinámicas tales como: la degeneración de este mismo estado, el segmento de frustración promedio y el parámetro h , para una red de Ising $\pm J$ en dos dimensiones con frustración, considerando solo frustración en plaquetas, y condiciones de borde periódicas. El estudio se realizó en redes de distintos tamaños (4×4), (5×5) y (6×6), se encontró que los efectos de tamaño finito originan dispersión en algunas de las propiedades que se estudian, sin embargo, dichos efectos se pierden rápidamente al crecer las redes que se utilizan. Los resultados de este trabajo confirman que de no considerar frustración en bandas se subestima la energía, la degeneración y el tamaño promedio del segmento de frustración. Al comparar nuestros resultados con otros cálculos que incluyen la frustración en bandas encontramos un acuerdo razonable en las distintas propiedades termodinámicas aquí calculadas. Finalmente, es importante mencionar que se compararon nuestros resultados con unos obtenidos por un cálculo con algoritmo genético y nuestros resultados aunque no iguales están dentro de los rangos obtenidos por éste.

Índice General

1	Introducción	2
2	Teoría	4
2.1	Aproximación Hamiltoniana	4
2.2	Aproximación Topológica	6
3	Algoritmo	11
3.1	Descripción del Algoritmo	11
3.2	Desarrollo de un ejemplo	17
4	Resultados	26
4.1	Resultados	26
4.2	Comparación con cálculos que consideran frustración en bandas	31
4.3	Comparación con resultados del Algoritmo Genético.	34
5	Conclusiones	36
	Bibliografía	38
A	Subrutina Diluída	39

Capítulo 1

Introducción

El creciente interés durante las décadas del 70 y 80 por el estudio de materiales magnéticos diluidos en matrices paramagnéticas llevó al descubrimiento de un nuevo tipo de sistema magnético, al que se denominó “*vidrio de espín*”. Este problema que pertenece a la física de sistemas estructuralmente desordenados da origen a una serie de preguntas que son difíciles de responder usando la física de los sistemas magnéticos cristalinos, la cual está bien caracterizada por un parámetro de orden y una transición bien definida[1].

Aunque resulta difícil definir un “*vidrio de espín*”, este puede ser descrito como un sistema magnético en el que están presentes la frustración de las interacciones magnéticas, aleatoriedad de las posiciones espaciales, memoria de sitio, además el estado fundamental se presenta dividido en conjuntos desconexos y existen muchos estados metaestables sin el usual orden de largo alcance con un máximo en la susceptibilidad magnética por debajo de una temperatura característica denominada temperatura de congelamiento T_f que funcionan como trampas[2].

Experimentalmente los vidrios de espín clásicos (como los descritos anteriormente) son matrices de metales nobles (Au, Ag, Cu, Pt) con muy bajas concentraciones de materiales ferromagnéticos o antiferromagnéticos como Fe o Mn, las interacciones entre los átomos magnéticos en esta matriz son fuertemente oscilatorias del tipo RKKY [3] y las posiciones de los átomos magnéticos son aleatorias, lo cual proporciona por lo menos las componentes necesarias para la existencia de los vidrios de espín[2].

En la actualidad puede uno hablar de vidrios de espín sin la necesidad de recurrir a la imagen clásica de sistemas diluidos como es el caso de aleaciones ternarias como ZrCuFe, EuSrS, CoMnPt, CoFePt y MnFePt; en las cuales se presentan distintas fases magnéticas que compiten en un rango de concentraciones finitas y que ante la imposibilidad de satisfacer las distintas fases en forma simultánea acaba por desarrollar una fase frustrada que corresponde a la fase de un vidrio de espín[2, 4].

Desde el punto de vista teórico los modelos de redes de espín con interacciones aleatorias según una distribución predeterminada han permitido un entendimiento al menos en forma parcial de algunos aspectos de los vidrios de espín, sin embargo han también originado controversias en cuanto a la interpretación de resultados y aplicabilidad de los mismos con respecto a la representatividad de los sistemas reales mediante modelos físicos sencillos, los cuales se han venido superando afortunadamente con el paso del tiempo, una descripción

detallada se puede encontrar en el artículo de revisión de Binder y Young[2]. Una de las versiones más populares y sencillas de los modelos de Ising para estudiar los vidrios de espín es la de enlaces mixtos $\pm J$ ó modelo de Sherrington y Kirkpatrick [5], la cual consiste en un sistema con interacciones a primeros vecinos en igual proporción de enlaces ferromagnéticos y antiferromagnéticos distribuidos al azar en una red. Pese al fracaso relativo de este modelo, ya que en el límite termodinámico al recorrer los infinitos estados del nivel fundamental, se pierde toda correlación de sitio; han surgido de él dos problemas de gran interés. Por un lado, mediante una extensión de este sistema se pueden modelar memorias asociativas[6]. Por otro lado, el efecto de frustración manifestado por Toulouse (frustración en plaquetas) se presenta de forma natural en estos sistemas[7]. En algunos estudios mas recientes se ha encontrado que este efecto no es el único que contribuye al cálculo de la energía y la degeneración de estos sistemas, sino que es necesario, especialmente para redes pequeñas, incorporar los elementos de frustración que aportan las condiciones de borde (frustración en bandas)[8], el cual se desprecia en este trabajo por hacer mas complicado el algoritmo para el cálculo de la energía del estado base.

Aquí se trabajará con un modelo de Ising para redes cuadradas con igual concentración de enlaces ferromagnéticos y antiferromagnéticos, en dos dimensiones y con la misma magnitud de interacción; se consideran condiciones periódicas de borde y el efecto de frustración de Toulouse, sin considerar la ya mencionada frustración en bandas. Presentamos los resultados obtenidos por el algoritmo que desarrollamos para la energía mínima, la degeneración y el parámetro de orden h sobre 500 muestras en redes (4×4) , (5×5) y algunas pocas muestras para redes (6×6) y comparamos con cálculos exactos obtenidos en otros trabajos[8].

Capítulo 2

Teoría

Vamos a considerar una red bidimensional con $N = (LX \times LY)$ espines, donde nos referiremos a N como el tamaño de la red, y observamos que en nuestro caso por manejar redes cuadradas $LX = LY$. Los espines están puestos sobre los vértices de tal red. Un enlace esta definido como la línea recta que une dos espines adyacentes (se considera solo interacción a primeros vecinos). Un enlace puede ser Ferromagnético (F) o Antiferromagnético (AF) mientras la magnitud de la interacción en ambos casos es igual a 1 pero de signo contrario. El número total de enlaces se representa por B y es igual a $2N$ en el caso de una red cuadrada bidimensional con N sitios. Aquí nos restringimos al caso de N enlaces Ferro y N enlaces Antiferro. Los resultados que se presentarán mas adelante toman en cuenta condiciones periódicas de borde. El alcance de los cálculos fué decidido por las limitaciones del tiempo de cómputo para resultados exactos.

2.1 Aproximación Hamiltoniana

El Hamiltoniano para un sistema de N espines puede escribirse de la forma:

$$H = \sum'_{ij} J_{i,j} S_i S_j, \quad (2.1)$$

donde $J_{i,j}$ corresponde a la interacción entre los vecinos i -ésimo (cuya componente z del espín es S_i) y el j -ésimo, pudiendo ser $+1$ ó -1 . La sumatoria prima se refiere a considerar cada enlace una sola vez, evitando además, al término con $i = j$.

Para una red de N espines, el sistema posee 2^N estados definiéndose un espacio de Hilbert de 2^N dimensiones, habrá $2N$ enlaces y N plaquetas. Por otra parte dado que el Hamiltoniano de Ising es invariante ante la inversión de todos los espines, $S_i \rightarrow -S_i$ para todo i , es entonces suficiente trabajar sólo con la mitad del espacio de Hilbert, esto es, con 2^{N-1} estados.

La distribución de enlaces entre los distintos sitios de la red, es asignada aleatoriamente al comienzo de cada cálculo, sin que ésta se altere bajo ninguna circunstancia durante su ejecución. En consecuencia, se define una “muestra”, como una distribución de enlaces aleatorios entre los distintos sitios de una red cuadrada bidimensional, en la cual se aplican condiciones de borde periódicas.

A continuación definimos los parámetros más utilizados en este tipo de sistemas, para los cuales se buscan definiciones intensivas de magnitudes relevantes, ya que esto facilita las comparaciones. Para el cálculo de cualquiera de estos es necesario encontrar la energía del estado base E_g , la degeneración de este nivel W y sus estados.

Aplicando el Hamiltoniano de Ising y recorriendo la red de modo que cada sitio de espín interactúa con sus vecinos más cercanos, se obtiene:

$$-J \left\{ \sum_{i<j}^N 'S_i S_j \right\} |E'\rangle + J \left\{ \sum_{i<j}^N S_i S_j \right\} |E'\rangle = E|E'\rangle, \quad (2.2)$$

ó bien

$$E = -J(\eta_1 - \eta_2) S^2 + J(\eta'_1 - \eta'_2) S^2, \quad (2.3)$$

donde en la ecuación (2.2) la sumatoria primada se refiere a sumar sobre todos los enlaces ferromagnéticos, la sumatoria no primada se refiere a sumar sobre todos los enlaces antiferromagnéticos y $|E'\rangle$ es uno de los W estados fundamentales; mientras en la ecuación (2.3) η_1 es el número de enlaces ferromagnéticos ($-J$), con parejas de espines paralelos y η_2 el número de estos mismos pero con parejas de espines antiparalelos. Del mismo modo se definen η'_1 , η'_2 , pero considerando enlaces antiferromagnéticos ($+J$). Reordenando la ecuación anterior, se tiene:

$$E = \left\{ -B + 2(\eta_2 + \eta'_1) \right\} JS^2. \quad (2.4)$$

La energía del nivel fundamental E_g , corresponde a la mínima posible, y ocurre cuando $(\eta_2 + \eta'_1)$ es mínimo, considerando además que JS^2 es igual a una unidad de energía, entonces:

$$E_g = -B + 2(\eta_2 + \eta'_1)_{min} \quad (2.5)$$

Definimos la energía del estado base por enlace:

$$\epsilon_g = \frac{E_g}{B} = \frac{E_g}{2N}. \quad (2.6)$$

La entropía remanente (σ) es la forma más conveniente de ver la degeneración del estado base (W). Estas dos cantidades están relacionadas por

$$\sigma = \frac{\ln(W)}{N}. \quad (2.7)$$

La magnetización por espín μ se define como:

$$\mu = \frac{\sum_{\alpha} \sum_i^N S_i^{\alpha}}{NW}, \quad (2.8)$$

donde S_i^{α} representa el valor del espín en el sitio i para uno de los estados α pertenecientes al ensamble microcanónico a saber del estado base. De esta manera μ toma valores entre -1 y $+1$.

Las Correlaciones C_ν para cualquier vecino de orden ν pueden ser definidas de la siguiente manera:

$$C_\nu = \frac{\sum_\alpha \sum_i^N \sum_{j(\nu)} S_i^\alpha S_{j(\nu)}^\alpha}{n_\nu NW}, \quad (2.9)$$

donde n_ν es el número de vecinos de orden ν , mientras que la suma sobre $j(\nu)$ incluye todos estos.

La correlación de sitio puede ser estudiada por medio del parámetro q definido por Edwards y Anderson[9]. Este parámetro se calcula por medio de la siguiente expresión:

$$q = \frac{2 \sum_{\alpha \leq \beta} \sum_i^N S_i^\alpha S_i^\beta}{NW(W+1)}, \quad (2.10)$$

donde α y β representan los estados inicial y final. Cada par de estados se cuenta una sola vez y el caso $\alpha = \beta$ esta permitido. De tal manera que el número total de pares es $\frac{W(W+1)}{2}$, el cual aparece como un factor de normalización. El parámetro q está entonces restringido al intervalo $[-1, 1]$.

Existe otro parámetro de sitio p [8], el cual es más drástico que q y disminuye mucho más rápido que q conforme N se incrementa. Este se define de la siguiente manera:

$$p = \frac{1}{N} \sum_i^N \left\{ \left| \sum_\alpha S_i^\alpha \right| \text{div} W \right\}, \quad (2.11)$$

donde $| \cdot |$ significa valor absoluto y div representa una división entera, entonces el resultado dentro de $\{ \}$ solo puede ser 0 ó 1.

Definimos ahora la fracción de enlaces que nunca son frustrados indicada por h de la siguiente manera:

$$h = \frac{1}{B} \sum_{ij} ' \left\{ \sum_\alpha \frac{|S_i^\alpha S_j^\alpha - J_{ij}|}{2} \text{div} W \right\}, \quad (2.12)$$

donde la primera suma se extiende sobre los B pares de primeros vecinos (i, j) y hacemos uso de la división entera introducida en la Eq. (2.7). Teóricamente el rango para h es $[0, 1]$, cabe hacer notar que tanto p como h son parámetros recientes propuestos por el Prof. Vogel[8, 10, 11].

2.2 Aproximación Topológica

Las propiedades topológicas de estas redes proveen otra manera alternativa para encontrar los estados bases del sistema descrito anteriormente. Se ha definido como plaqueta al circuito mínimo cerrado que forman los enlaces en una celda cuadrada en este caso. Si una plaqueta contiene un número impar de enlaces antiferromagnéticos no puede satisfacer los requerimientos de todos los sitios de espín, entonces se dice que tal plaqueta es curva o frustrada

(C), en cualquier otro caso la plaqueta se denomina plana[12]. El número total de plaquetas curvas en una muestra será denotado por P_C . Ha sido propuesto que la densidad de estados, y muy particularmente, las propiedades del nivel fundamental estarían enteramente determinadas por el número y la distribución de plaquetas curvas[7]. Esencialmente por la unión de estas en pares. Esto se lleva a cabo por medio de segmentos de frustración que van de el centro de una plaqueta curva al centro de otra, frustrando los enlaces que son cruzados por el segmento de frustración. Sin embargo se ha encontrado que es necesario, especialmente para redes pequeñas, incorporar los elementos de frustración que aportan las condiciones de borde, es decir las bandas. Definiremos como bandas los perímetros que se establecen sobre una misma dirección y que se cierran mediante las condiciones de borde. Una banda será torcida o frustrada si contiene un número impar de enlaces antiferromagnéticos, en caso contrario la banda será derecha[8]. Las bandas son en realidad plaquetas generalizadas, pero puesto que tienen un número de elementos (enlaces) que varía al considerar diferentes valores de N y a que dependen de las condiciones de borde, conviene manejarlas separadas de las plaquetas. De lo anterior se sigue que el número total de segmentos de frustración es $\frac{P_C}{2}$. La longitud de un segmento es el número de enlaces frustrados que están asociados a este. La suma de todos los segmentos de frustración es llamada *longitud de frustración* Λ_F . En el caso del estado base esta longitud es mínima y es denotada por Λ_{Fg} . La degeneración del estado base es el número de diferentes maneras en las cuales un conjunto de segmentos de frustración puede ser dibujado llevando Λ_{Fg} a su mínimo valor posible[13].

Para familiarizarse con las definiciones veamos la Fig. 2.1, en la cual tenemos 3 muestras. Las barras dobles corresponden a enlaces antiferromagnéticos, en tanto las barras simples corresponden a ferromagnéticos. En la figura se ilustran las plaquetas curvas mediante una letra C al centro de ellas según corresponda. En la Fig. 2.1 a), correspondiente a un arreglo (4×4), resultan frustrados 2 enlaces. Notamos que al unir en pares las plaquetas curvas mediante segmentos de frustración de elongación mínima, cruzamos precisamente por sobre los enlaces frustrados. Esta es una forma práctica de presentar el enunciado de Toulouse[7].

Si ponemos en práctica esta misma técnica para la muestra de la Fig. 2.1 b), también (4×4), nos encontramos con la sorpresa de que los enlaces frustrados no ocurren sobre el camino geométrico de elongación mínima entre plaquetas. La presencia de bandas torcidas, indicadas mediante una letra t en la figura, imponen condiciones que obligan a las longitudes de frustración a recorrer la red satisfaciendo todas las condiciones topológicas originadas tanto en bandas como en plaquetas. Si se revisa la primera red se encontrará que en este caso coinciden las condiciones requeridas por bandas y plaquetas, de forma que el mínimo camino geométrico es idéntico al mínimo camino topológico. La relevancia de las bandas, queda dramáticamente representada en la Fig. 2.1 c), correspondiente a una muestra de arreglo (2×2), en la que no se presentan plaquetas curvas. No obstante, debido a los requerimientos de frustración aportados por las bandas, surgen longitudes de frustración en forma de circuito cerrado. En este caso la frustración de bandas supera a la de plaquetas. Usualmente ambas coexistirán y a medida que crezca el número de espines en la red, irá aumentando el rol de las plaquetas (número proporcional a N) por sobre el de las bandas (número proporcional a \sqrt{N}). Las consideraciones anteriores dieron pauta a que se reformulara el enunciado de Toulouse con el objetivo de generalizarlo. *Tanto la energía como la degeneración del nivel fundamental quedan determinados por la topología de la red, la que se expresa mediante las paridades*

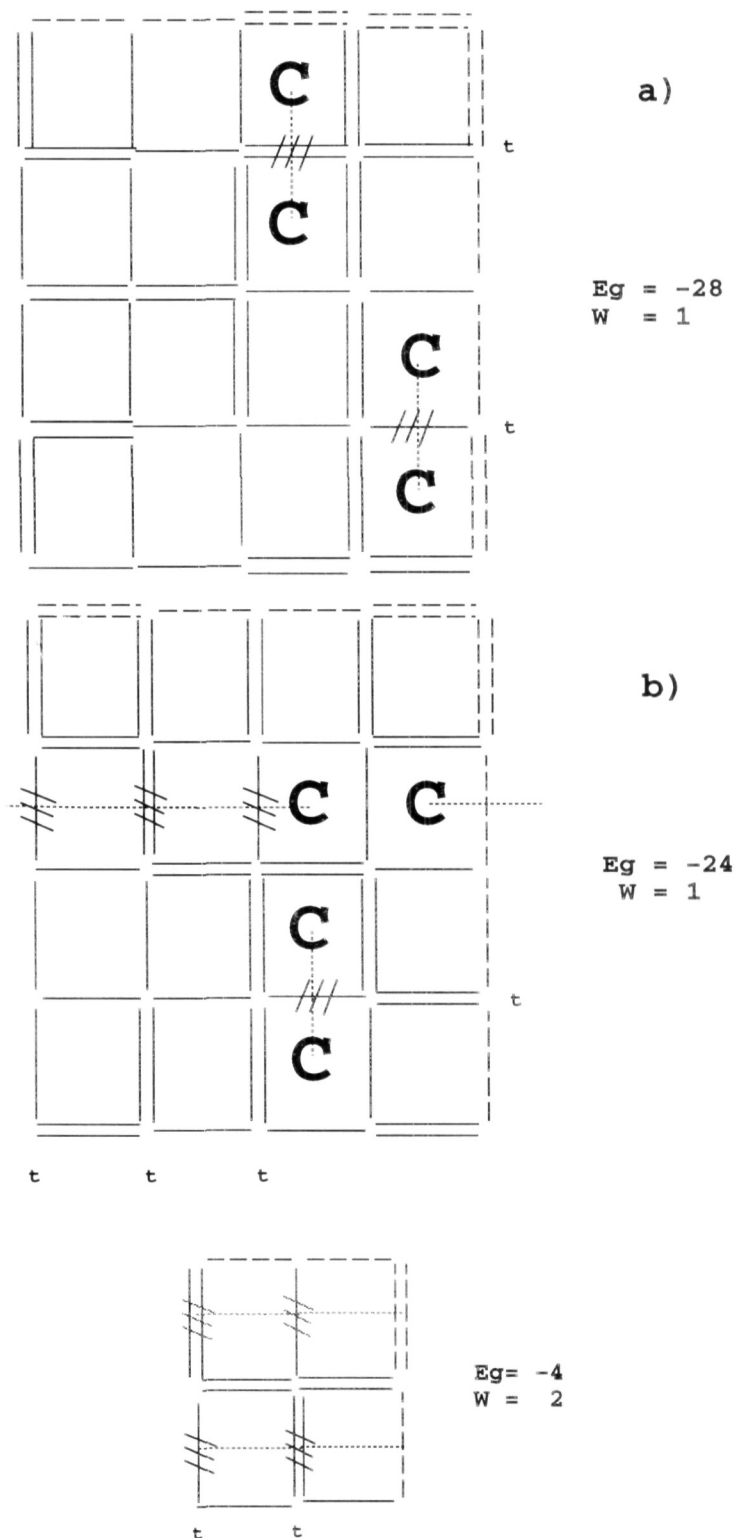


Figura 2.1: Tenemos dos diferentes distribuciones de enlaces para redes (4×4) y una para (2×2) , mostrando las plaquetas curvas marcadas por C . Las barras simples representan enlaces (F) y las dobles enlaces (AF). Los enlaces frustrados se muestran marcados por líneas diagonales. Los segmentos de frustración están mostrados por líneas rectas continuas punteadas. Las condiciones periódicas están mostradas explícitamente por las líneas segmentadas, E_g nos da la energía mínima de cada muestra y W la degeneración. En el caso de la red (2×2) el color claro en las lineas diagonales y en las continuas punteadas nos indican el otro estado base.

en bandas y plaquetas. Una plaqueta plana puede frustrar 0,2 ó sus 4 enlaces, en tanto una plaqueta curva puede frustrar 1 ó 3 de sus enlaces. Una banda derecha puede frustrar un número par de sus enlaces, en tanto una banda torcida puede frustrar un número impar de ellos. Las plaquetas curvas se unen en pares, mediante trayectorias de elongación mínima que van pasando sobre enlaces frustrados, respetando las paridades de bandas y plaquetas. Cuando no hay plaquetas curvas en número suficiente para satisfacer la frustración requerida por las bandas torcidas, se originan trayectorias de frustración cerradas. La energía del nivel fundamental queda dada por $-2(N-\Lambda_f)$, donde Λ_f corresponde a la longitud de frustración total mínima, que se obtiene contando todos los enlaces frustrados en la red. La cantidad de maneras independientes de trazar Λ_f da la degeneración del nivel fundamental.

En términos generales, la topología asociada a bandas alarga las longitudes de frustración, eleva la energía y aumenta las degeneraciones por nivel[8]. En particular, tanto la energía del nivel fundamental E_g , como su degeneración W , resultan mayores que las que se obtienen sin considerar los elementos frustrantes aportados por las bandas. Como es el caso del presente trabajo.

Podemos definir el segmento de frustración promedio $\langle \lambda_{Fg} \rangle$ para el estado base de una muestra dada como:

$$\langle \lambda_{Fg} \rangle = \frac{2\Lambda_{Fg}}{P_C}, \quad (2.13)$$

donde el símbolo $\langle \rangle$ es el promedio sobre la muestra particular. La energía E_g correspondiente al estado base puede ser expresada entonces como se menciona anteriormente en el enunciado de Toulouse:

$$E_g = -B + 2\Lambda_{Fg}. \quad (2.14)$$

La energía por enlace se escribe simplemente como

$$\epsilon_g = -1 + \frac{2\Lambda_{Fg}}{B}, \quad (2.15)$$

o en la forma:

$$\epsilon_g = -1 + \frac{P_C \langle \lambda_{Fg} \rangle}{B}, \quad (2.16)$$

donde el balance entre el número de plaquetas curvas y el segmento de frustración promedio puede ser apreciado.

Es importante definir ahora lo que es una *red diluída* ya que es parte de la topología de la red que nos permite encontrar el parámetro h [8]. Recordamos que el parámetro h es la fracción de enlaces que nunca son frustrados, la red diluída viene a ser la red que queda de la red original si quitamos todos los enlaces que son frustrados. En la fig. 2.2 podemos observar las redes diluídas correspondientes a las redes mostradas en la fig. 2.1.

Entonces fácilmente podemos encontrar el parámetro h [8], este vendrá dado por el número total de enlaces que ya habíamos denotado por B menos el número de enlaces que tenemos en la red diluída, y para que sea un propiedad extensiva se divide entre B .

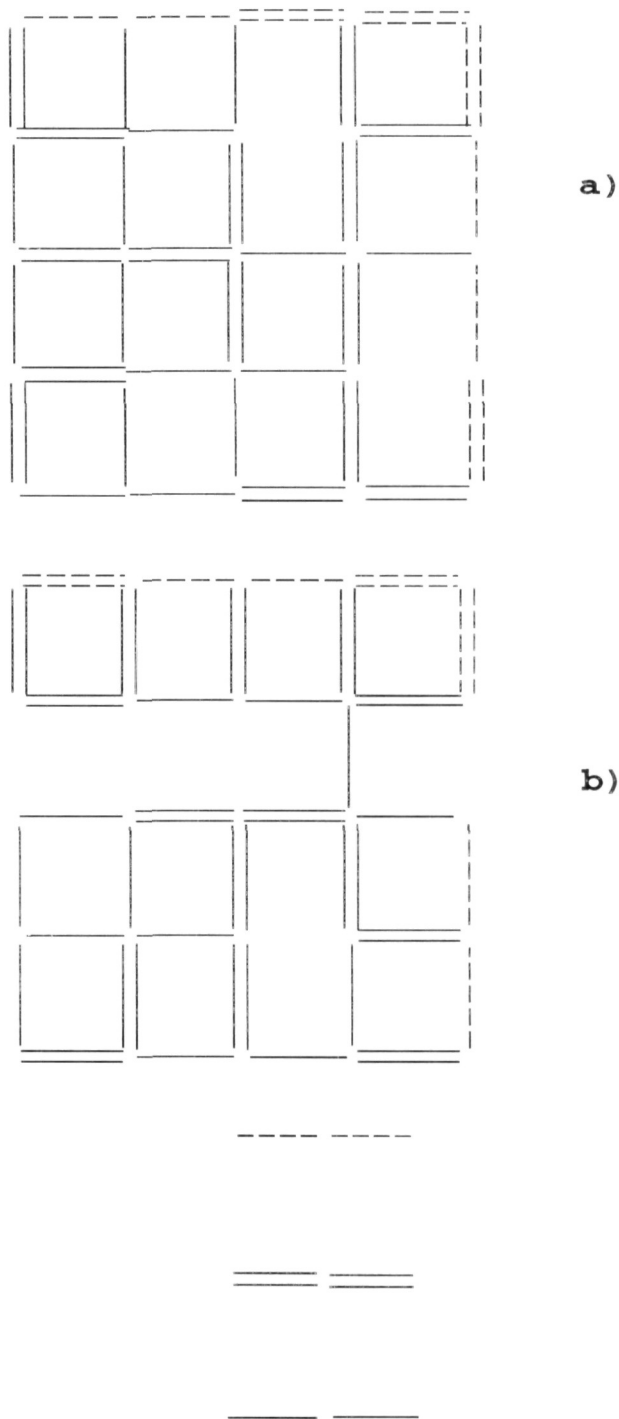


Figura 2.2: *Redes diluídas correspondientes a las redes presentadas en la Fig. 2.1, notamos que los enlaces faltantes son aquellos que fueron atravesados por los segmentos de frustración que pasan por los enlaces frustrados ya sea en plaquetas o en bandas.*

Capítulo 3

Algoritmo

3.1 Descripción del Algoritmo

Como se menciona en el capítulo anterior, nuestro trabajo consiste en calcular ciertos parámetros para redes de Ising de distintos tamaños: (4×4) , (5×5) y (6×6) , que nos permitan hacer comparaciones con los cálculos exactos publicados en la literatura[8]. En nuestro caso no tomaremos en cuenta frustración en bandas para facilitar el trabajo de la programación, no obstante sabemos cual es el efecto de ésta en las cantidades de nuestro interés como se comentó en el capítulo anterior. Los parámetros que deseamos encontrar son: energía del estado base E_g y degeneración del mismo W , ya que estos son básicos para el entendimiento del sistema, además queremos calcular el parámetro h ya que es el más fácil de obtener y nos proporciona cierta información física del sistema. Para tal proposito se realizó un algoritmo computacional en fortran77 que nos facilitara esta tarea. Este algoritmo nos permite encontrar los parámetros antes mencionados basandose en la topología de la red.

El algoritmo necesita solamente como datos de entrada los enlaces de la red que se analiza, y estos los obtendra de un archivo que contiene 500 muestras (esto es para cada tamaño de red). Como salida nos proporciona dos archivos, uno que contiene la siguiente informacion, el número de muestra, la suma de segmentos de frustración que se tienen en el estado base, la energía del estado base, la degeneración de este y el valor del parámetro h para cada una de las 500 muestras. El otro archivo contiene para cada una de las muestras los enlaces de la red diluída correspondiente.

Para la descripción del algoritmo es conveniente dividirlo:

- 1) Posicionarse dentro del archivo de entrada en la muestra deseada. Para esto se utiliza una subrutina llamada **Bypass** que hace una cuenta de los renglones que se deben de saltar para llegar a la muestra deseada y crea una variable caracter que contiene este número de renglones (en blanco). Esta variable se lee permitiendo posicionarse justamente en donde comienzan los enlaces de la muestra que se va a leer.

- 2) Lectura de los enlaces. Ya que se encuentra posicionado en la muestra, procede a leer los enlaces mediante una subrutina llamada **lectenlaces**, guardándolos mediante ciclos en

dos matrices del tipo $X(i, j)$, $Y(i, j)$.

3) Se determinan las plaquetas recorriendo circuitos mínimos. Como se comentó en el capítulo de teoría las plaquetas son los circuitos mínimos cerrados, lo que hace el algoritmo es sumar los enlaces de cada plaqueta para determinar el número de enlaces ferromagnéticos o antiferromagnéticos que contiene. De aquí se obtiene una matriz del tamaño de la red en donde cada componente de la matriz tiene un número $-4, -2, 0, 2, 4$. Entendiendo que como estos números vienen de la sumas de -1 y 1 que representan los enlaces ferromagnéticos y antiferromagnéticos respectivamente, entonces, las plaquetas que tienen un $-4, 4$ ó 0 tienen un número par de enlaces ferros o antiferros (plaquetas planas), y aquellas que tienen -2 ó 2 tienen un número impar de estos (plaquetas curvas).

4) Se marcan las plaquetas curvas. De lo anterior, como sabemos que las plaquetas curvas son aquellas que tienen un número impar de enlaces antiferros, entonces, se crea una matriz en base de la anterior donde cada componente tendrá 0 si la plaqueta correspondiente es plana y 1 si es curva, considerando como curvas las que en la matriz anterior el correspondiente componente tenía valor absoluto de 2 .

5) Se calculan las distancias entre plaquetas (segmentos de frustración), recordamos que la longitud de un segmento de frustración es el número de enlaces frustrados que estan asociados a éste. Para realizar este cálculo se tiene una subrutina llamada **distancia**, esta subrutina esta basada en 4 ciclos que permiten escoger dos plaquetas curvas diferentes para encontrar la distancia entre ellas, se escogen $C_{i,j}$ y $C_{k,l}$ donde la primera nos habla de la plaqueta curva que se encuentra en la componente (i, j) de la red y de manera similar la otra se refiere a la plaqueta curva que se encuentra en la componente (k, l) si observamos la Fig. 2.1 a) podriamos hablar por ejemplo de una $C_{1,3}$ y otra $C_{2,3}$, esta distancia se encuentra haciendo comparaciones entre índices esto para saber donde se encuentran posicionadas las plaquetas en la red, de tal manera que se puedan encontrar las diferentes distancias que las unen, esto se logra con fórmulas como las siguientes:

$$distancia = abs(i - k) + abs(j - l)$$

$$distancia = abs(i - k + LX) + abs(j - l)$$

$$distancia = abs(i - k) + abs(j - l - LX)$$

$$distancia = abs(i - k + LX) + abs(j - l - LX)$$

donde recordamos que LX es la arista de la red y abs significa valor absoluto. Estas fórmulas son ejemplo de cuando los índices i y j cumplen con la condición de que $(i - k)$ es menor que 0 y $(j - l)$ es mayor que 0 . Esto se hace para las diferentes condiciones,

$$(i - k) < 0 \text{ y } (j - l) < 0$$

$$(i - k) < 0 \text{ y } (j - l) > 0$$

$$(i - k) > 0 \text{ y } (j - l) < 0$$

$$(i - k) > 0 \text{ y } (j - l) > 0$$

$$(i - k) = 0 \text{ y } (j - l) > 0$$

$$(i - k) = 0 \text{ y } (j - l) < 0$$

$$(i - k) < 0 \text{ y } (j - l) = 0$$

$$(i - k) > 0 \text{ y } (j - l) = 0$$

logrando así encontrar todas las distancias posibles entre todos los pares de plaquetas curvas posibles, de aquí se seleccionan solo las menores distancias entre las plaquetas y se guardan en una matriz ($P_C \times P_C$), recordamos que P_C es el número de plaquetas curvas que existen en la muestra.

6) Se hace la suma de distancias entre plaquetas.

a) Inicialización de la suma mínima. Se inicializa una variable entera equivalente al mayor valor que la suma de segmentos puede tomar, es decir, $\Lambda_{F_{max}} = N$.

b) Ciclos Do. Este cálculo está basado en N (tamaño de la red) ciclos anidados, esto para que puedan efectuarse cálculos para cualquier número de plaquetas curvas posibles en cada tamaño de red trabajado, los ciclos permitirán hacer todas las combinaciones entre pares de plaquetas para encontrar aquella combinación de pares cuyos segmentos de frustración (distancia entre plaquetas que forman el par) al ser sumados nos entregan la suma mas pequeña. Los ciclos nos permiten seleccionar através de los índices que los controlan nuestro primer par de plaquetas, pero este no será el de los índices precisamente, sino que se escogerá el correspondiente a la plaqueta 1 con aquella plaqueta que tiene más cerca, esto es, la distancia más corta para unir a la plaqueta 1 con otra, esto como parte de la agilización de los cálculos. Se logra esto através de una subrutina llamada **menor**.

c) Subrutina **menor**. Recordamos que nosotros vamos obtener la suma mínima de la matriz de distancias encontrada anteriormente, entonces, todo lo que trabajaremos se hará sobre esta matriz. Lo que la subrutina **menor** hace es encontrar el índice del elemento mas pequeño del primer renglón de nuestra matriz. Se posiciona en el primer elemento del primer renglón y lo guarda en una variable, mientras en un vector se guarda el índice correspondiente a la columna, esto se hace para acomodar los índices en el vector de acuerdo al elemento que contengan, de menor a mayor; lee el segundo y lo compara con el primero, si es menor guarda ahora ese valor en la variable y cambia la posición de los índices en el vector. Esto se repite hasta obtener un vector donde estan los P_C índices acomodados según su elemento de menor a mayor.

d) Variable de suma por ciclo. En cada par de ciclos, se tiene una variable de suma que nos guarda el elemento de la matriz con posición (i, j) , donde i es el índice del primero de los dos ciclos y j el índice que sale como el que tiene el menor elemento después de llamar a la subrutina **menor**.

e) Cotas. Se definen unas variables que guardan el valor de la energía y son tales que al cambiar la energía mínima éstas cambian; se colocan en cada uno de los ciclos para evitar los ciclos subsiguientes siempre que se cumpla cierta condición impuesta mediante un if. Estas variables son para mejorar el tiempo de cálculo.

f) Índices. Para el cálculo del parámetro h es sumamente importante conocer que pares de plaquetas se unen, esto nos lleva a tener que conocer los índices que nos dicen la componente de la red en la que se encuentra cada una de las plaquetas que se unen, pero como los índices de los ciclos solo concuerdan con los de la red para los dos primeros ciclos, los demás se tienen que obtener dependiendo de estos primeros de una manera sucesiva. Para esto se guardan los índices originales después de haber quitado los de los primeros dos ciclos en un vector cuyos índices son los de la siguiente matriz, esto se hace cada dos ciclos, también cada dos ciclos, al escoger los siguientes índices se busca su correspondencia con los originales y

se guardan en un vector, al final ese vector tiene de manera secuencial los pares de plaquetas que se unieron.

g) Condición para checar si en ese ciclo debe de parar. Cada dos ciclos se tiene una condición para verificar si en ese ciclo debe parar o debe continuar, esta condición consiste en preguntar si la dimensión de la matriz que se acaba de analizar es igual a dos, si es así, aquí debe de irse a la subrutina **enermin**, sino continua con los siguientes ciclos. La dimensión de la matriz esta controlado por una variable que se reduce en 2 cada dos ciclos.

h) Subrutina **enermin**. Esta subrutina nos permite encontrar la suma mínima de segmentos de frustración por medio de comparaciones, además nos permite encontrar la degeneración del estado base. Se tienen dos condiciones una en la que se pregunta si la suma que se encuentra es menor a la anterior, guardada en la variable *smin*, si es así, se inicializa un contador y se guarda en esta misma variable la nueva suma, también se guardan en dos matrices los enlaces originales para después ir quitando los enlaces que se frustran y formar así la red diluída. La segunda condición cuestiona si la suma que se obtiene es igual a la anterior, si es así, incrementa un contador, y llama a la subrutina **diluida**.

i) Subrutina **diluida**. Esta subrutina nos permitirá encontrar la red diluída que a su vez nos permite encontrar el parámetro *h*. Ver los esquemas de las Fig. A y B. Para más detalle ir al apéndice A.

j) Subrutina **arremat**. Esta subrutina nos permite reducir una matriz de orden $(n \times n)$ a una de orden $([n - 2] \times [n - 2])$. Para esto se tienen dos ciclos que nos permitan comparar los índices que se escogieron, con todos los demás y al encontrar los 2 escogidos quitarlos y crear una nueva matriz que no contenga ni renglón, ni columna con esos números, de tal manera que se quitarán dos renglones y dos columnas.

k) Variable que sirve de tope a los siguientes ciclos. Sencillamente se pone una variable al final de cada dos ciclos que será igual a la variable anterior correspondiente menos 2. Al terminar los primeros dos ciclos la variable correspondiente es el número de plaquetas curvas que se tienen menos 2.

l) Cálculo del parámetro *h*, energía mínima y degeneración. Finalmente se hace el cálculo de los parámetros. Para encontrar el parámetro *h* se utilizan dos ciclos cuyos índices funcionarán como los índices de las matrices en donde guardamos los enlaces de la red diluída, después viene una condición donde pregunta si el elemento (i, j) de estas matrices es igual a cero, si es así incrementa un contador, de tal manera que al finalizar estos ciclos, tenemos guardado en una variable el número de enlaces frustrados, y esto nos permite calcular *h*, como el número de enlaces menos el número de enlaces frustrados, todo entre, el número de enlaces. Por otra parte para calcular la energía mínima se resta el doble de la suma mínima a el negativo del número de enlaces. Y para terminar la degeneración se obtiene del número que se calcula con el contador que se encuentra en la subrutina **enermin**, pero debido a que hay conteo múltiple por tomar en cuenta toda la matriz de distancias que es triangular se divide entre $(P_C!!)$.

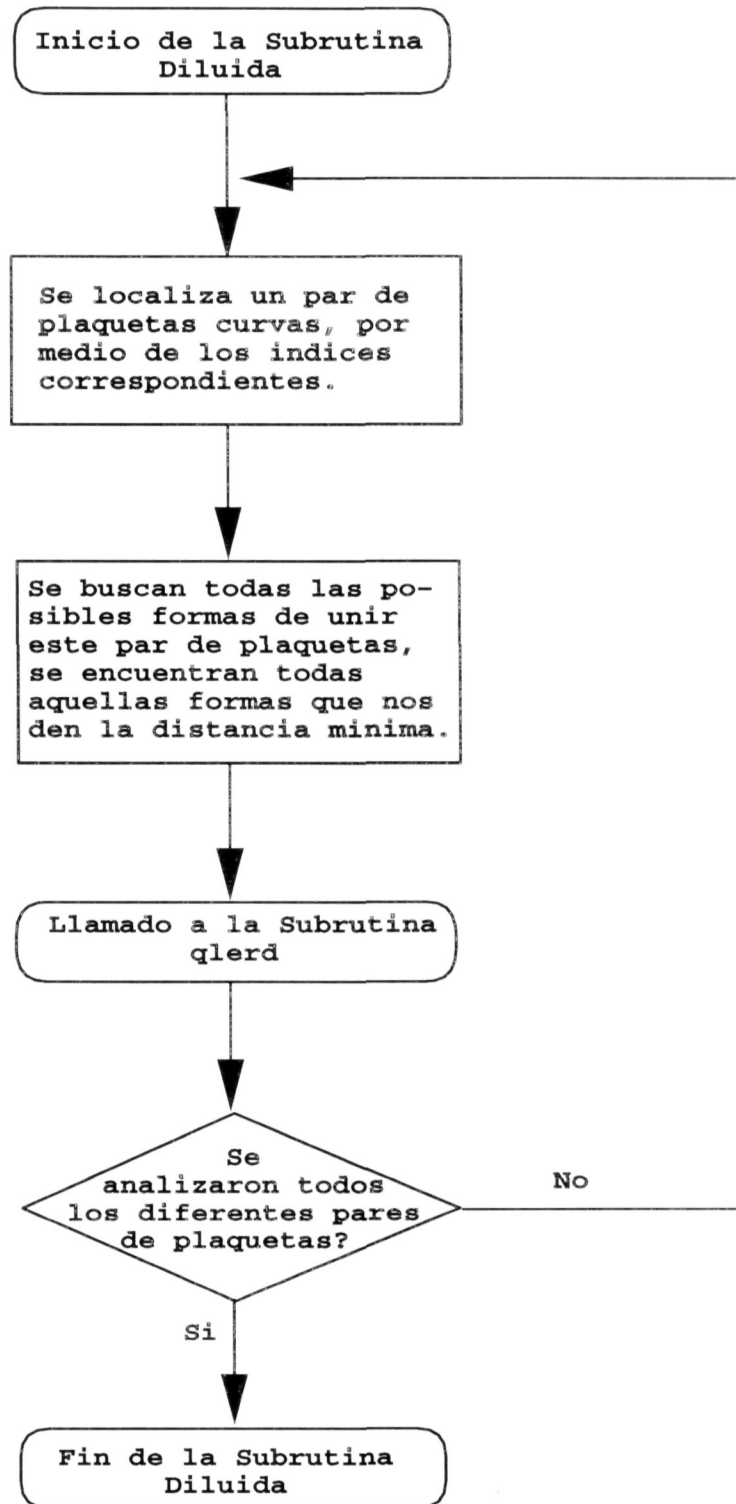


Figura A. Esquema de la subrutina diluida, donde qlerd significa: quita los enlaces de la red diluida.

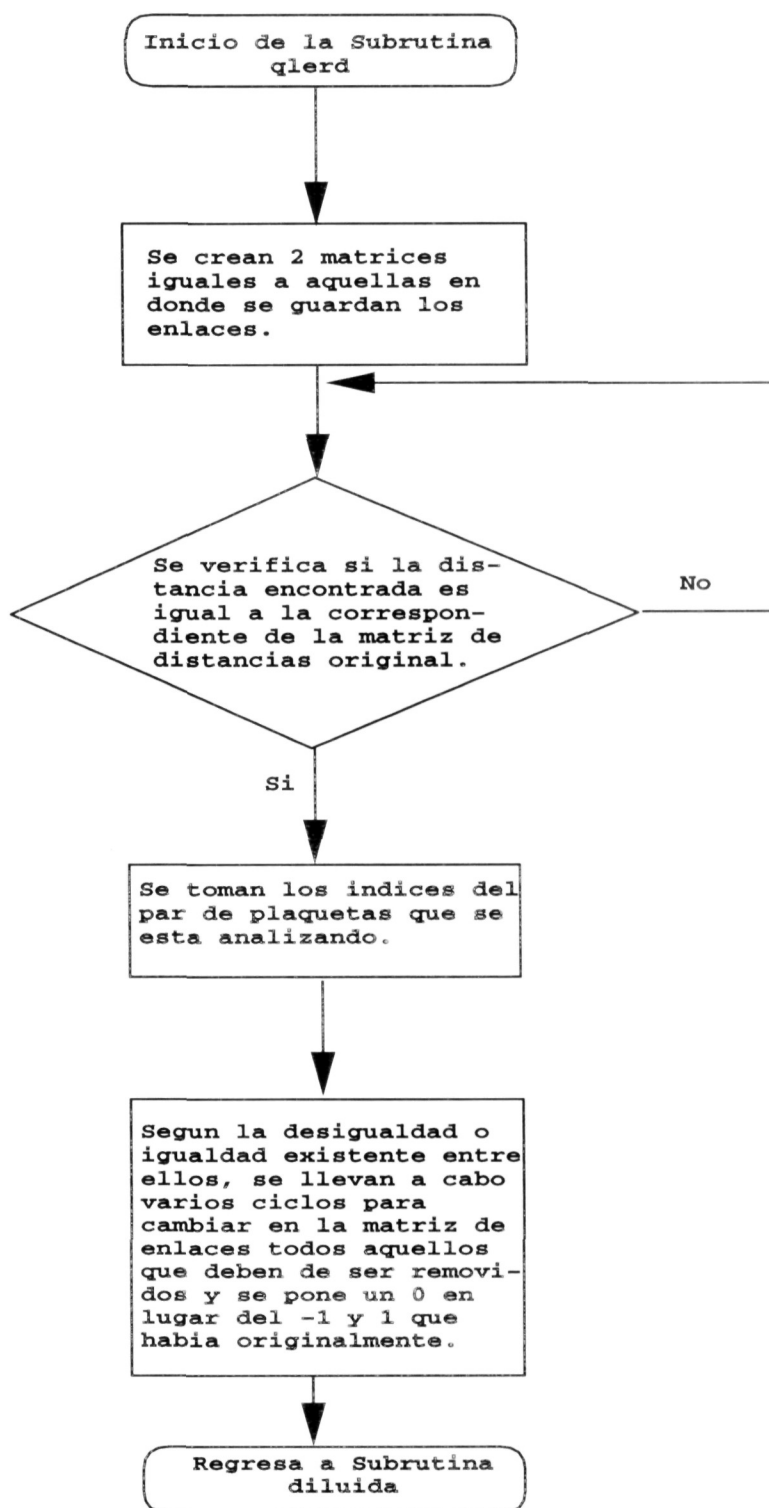


Figura B. Esquema de la subrutina **qlerd**, donde **qlerd** significa: *quita los enlaces de la red diluida*.

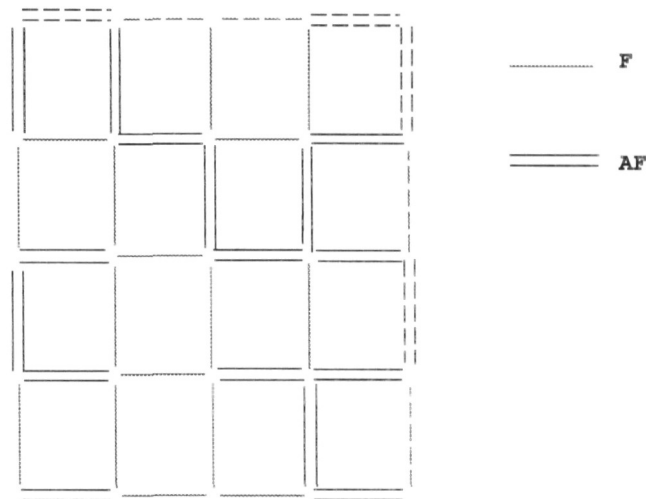


Figura 3.1: Red (4×4) correspondiente al arreglo de enlaces de la muestra # 7

3.2 Desarrollo de un ejemplo

A continuación se hará un ejemplo detallado para la mejor comprensión del algoritmo.

Red (4×4) Muestra #7 Ver Fig. 3.1

Como se mencionó anteriormente lo primero que se hace es tomar los enlaces y colocarlos en la red, que en el algoritmo se forma por dos matrices. Así que aquí partimos de nuestra Fig. 3.1 donde los enlaces ya están acomodados en la red. Después se recorren los circuitos mínimos, un circuito mínimo es como el que se muestra en la Fig. 3.2. Al recorrer estos circuitos se crea una matriz que contiene la suma de los enlaces de cada circuito, cada elemento de la matriz que se crea tiene la correspondencia con el elemento de la red. La matriz correspondiente a la muestra ejemplo es la que mostramos a continuación:

$$\begin{array}{cccc} 2 & 0 & -4 & 2 \\ -2 & 0 & 2 & 2 \\ 2 & -4 & 0 & 2 \\ 0 & -4 & 0 & 2 \end{array}$$

A continuación se marcan las plaquetas curvas, recordamos que éstas son aquellas que tienen un número impar de enlaces antiferromagnéticos (AF), es decir, 3 ó 1, si una plaqueta tiene 3 enlaces (AF) su suma de enlaces da 2, si una plaqueta tiene un solo enlace (AF) su suma es -2, por lo tanto toda aquella plaqueta cuyo valor absoluto de su suma sea 2 es curva. Aquí se crea otra matriz, en la que cada elemento corresponde a su plaqueta en la red, y contiene 0 si la plaqueta es plana, y 1 si es curva,

$$\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}$$

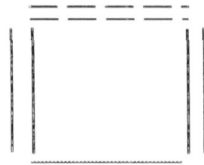


Figura 3.2: Un ejemplo de circuito cerrado sacado de la red muestra # 7

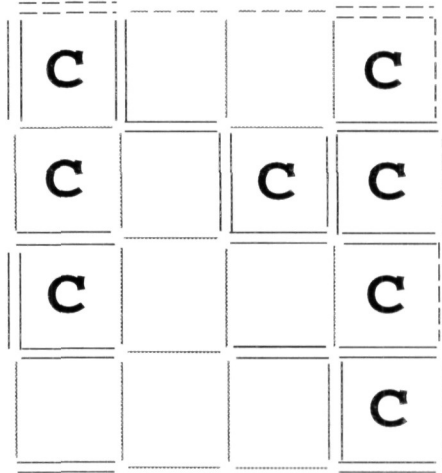


Figura 3.3: Red muestra # 7 mostrando las plaquetas curvas marcadas con una C al centro.

Además se crea otra matriz donde a cada plaqueta curva se le asigna un número, para reconocer a la hora de unir plaquetas cuales son las que se unen,

$$\begin{array}{cccc}
 1 & 0 & 0 & 2 \\
 3 & 0 & 4 & 5 \\
 6 & 0 & 0 & 7 \\
 0 & 0 & 0 & 8
 \end{array}$$

observemos la Fig. 3.3, donde se nos muestran cuales son las plaquetas curvas.

Ahora sí se encuentra la matriz de distancias, recordemos que las distancias que se consideran en esta matriz son solo las menores a pesar de que no son estas las únicas posibles para unir pares de plaquetas veamos la Fig. 3.4 que nos muestra las diferentes maneras de unir un par de plaquetas.

Nosotros al considerar solo las menores obtenemos la matriz :

$$\begin{array}{cccccccc}
 0 & 1 & 1 & 3 & 2 & 2 & 3 & 2 \\
 1 & 0 & 2 & 2 & 1 & 3 & 2 & 1 \\
 1 & 2 & 0 & 2 & 1 & 1 & 2 & 3 \\
 3 & 2 & 2 & 0 & 1 & 3 & 2 & 3 \\
 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 2 & 1 & 2 \\
 2 & 3 & 1 & 3 & 2 & 0 & 1 & 2 \\
 3 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 0 & 1 \\
 2 & 1 & 3 & 3 & 2 & 2 & 1 & 0
 \end{array}$$

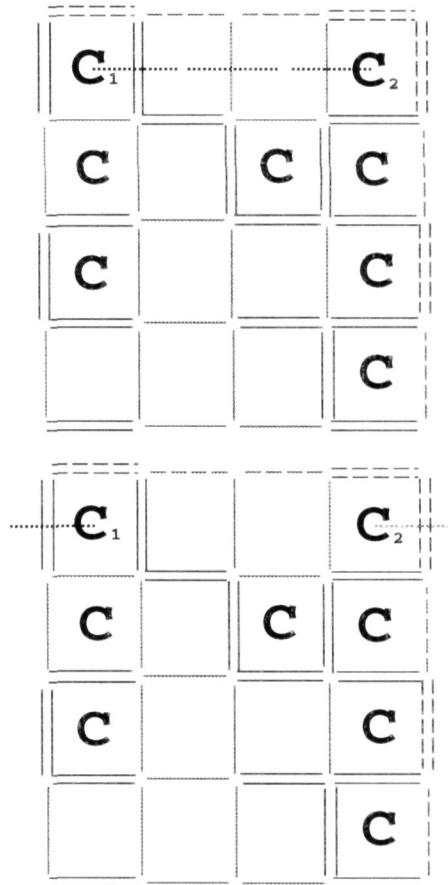


Figura 3.4: Aquí se muestran dos diferentes maneras de unir las plaquetas curvas 1 y 2 marcadas por C_1 y C_2 , en la segunda red estas se unen a través de las condiciones periódicas de borde, observamos que en la primera red la longitud entre las plaquetas es 3, en la segunda es 1, por lo tanto en nuestra matriz de distancias aparecerá un 1, en el elemento $(1, 2)$.

que llamaremos matriz de distancias. Donde si tomáramos el elemento (1,3) significaría que la distancia menor entre la plaqueta 1 y la 3 es el número asociado a este elemento, en este caso 1.

Después de lo anterior se le asigna a la variable que nos guardará el menor valor posible de la suma de distancias entre plaquetas, el mayor valor que podría tomar que es $2N$ correspondiente al hipotético caso en que todas las interacciones se frustran (32 en nuestro ejemplo); entonces inicialmente $smín = 32$.

A continuación se comienza con el cálculo de la sumas de distancias entre plaquetas para encontrar la que es mínima.

Primero se escoge el menor elemento de la primera fila de nuestra matriz de distancias, el cual es 1, y dado que tenemos 2, primero se toma el de la columna con el índice más pequeño, esto es, la primera distancia que tomaremos es la que une a las plaquetas 1 y 2, entonces se guarda en una variable $isum1$ este valor, es decir, $isum1 = 1$. Además se guardan los índices de fila y columna, ya que estos nos indican las plaquetas que se unieron:

$$ind(1) = 1$$

$$ind(2) = 2$$

Después se reduce la matriz quitando las columnas y renglones correspondientes al elemento escogido, en este caso se quitan las columnas y los renglones 1 y 2, obteniendo así la matriz:

$$\begin{array}{cccccc} 0 & 2 & 1 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 0 & 1 & 3 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 0 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 2 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 3 & 2 & 2 & 1 & 0 \end{array}$$

cuyos índices tienen una correspondencia con la matriz de distancias original:

Tabla 1		
Matriz (6 × 6)		Matriz original(8 × 8)
1	→	3
2	→	4
3	→	5
4	→	6
5	→	7
6	→	8

Ahora escogemos el elemento menor del primer renglón de nuestra nueva matriz, siguiendo los mismos criterios que en el anterior consideramos primero el elemento (1,3). Se asigna ahora el valor de la suma de este elemento con la suma anterior a una nueva variable $isum2$, es decir, $isum2 = isum1 + 1$, $isum2 = 2$. Los índices tomados aquí son 1 y 3, pero estos corresponden al 3 y 5 respectivamente de nuestra matriz original, por lo que guardamos éstos últimos en nuestro vector de índices

$$ind(3) = 3$$

$$ind(4) = 5$$

nuevamente quitamos los renglones y las columnas correspondientes a los índices tomados, aquí se consideran los de la matriz (6×6) , es decir 1 y 3, retirando éstos obtenemos una nueva matriz:

$$\begin{array}{cccc} 0 & 3 & 2 & 3 \\ 3 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \end{array}$$

Los índices de ésta matriz se relacionan con los de la anterior y con los de la original de la siguiente manera:

Tabla 2						
Matriz (4×4)			Matriz (6×6)			Matriz original (8×8)
1	→	2	→	4		4
2	→	4	→	6		6
3	→	5	→	7		7
4	→	6	→	8		8

Nuevamente se escoge el elemento menor del primer renglón de nuestra nueva matriz, que es $(1, 3)$. De manera similar a la anterior se considera la suma de este elemento con la suma anterior en una nueva variable $isum3$, entonces, $isum3 = isum2 + 2$, $isum3 = 4$. Los índices tomados corresponden, como observamos de la Tabla 2, al 4 y 7 de nuestra matriz original, éstos también los guardamos en el vector de índices

$$ind(5) = 4$$

$$ind(6) = 7$$

quitamos los renglones y las columnas correspondientes y obtenemos:

$$\begin{array}{cc} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{array}$$

Obviamente los índices de esta matriz se relacionan con los que nos faltan de la original, es decir

Tabla 3			
Matriz (2×2)			Matriz original (8×8)
1	→	6	
2	→	8	

Finalmente tomamos el único elemento que nos queda, y lo agregamos a la suma anterior guardándolo en una nueva variable $isum4$, donde $isum4 = isum3 + 2$, $isum4 = 6$. Se guardan los correspondientes índices de la matriz original:

$$ind(7) = 6$$

$$ind(8) = 8$$

Ahora se compara el valor guardado en esta variable $isum4$ con el guardado en $ismin$, y observamos que $isum4 < ismin$, por lo tanto, se hace $ismin = isum4$. De aquí nos regresamos a la matriz (4×4) , y escogemos el siguiente menor del primer renglón, que es el

elemento (1, 2). Y siguiendo lo hecho anteriormente, se suma el valor de este elemento con la suma anterior en la variable $isum3$, $isum3 = isum2 + 3$, $isum3 = 5$. Los índices tomados corresponden, como observamos de la Tabla 2, al 4 y 6 de la matriz original, entonces se cambian los índices que se habían guardado anteriormente por los nuevos,

$$ind(5) = 4$$

$$ind(6) = 6$$

quitamos los renglones y las columnas correspondientes y obtenemos:

$$\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array}$$

Los índices de ésta matriz se relacionan con los de la original de la siguiente manera:

Tabla 4	
Matriz (2 × 2)	Matriz original(8 × 8)
1	→ 7
2	→ 8

Tomamos una vez más el único elemento permitido de ésta matriz y lo sumamos a la suma anterior y guardándolo en $isum4$, tenemos, $isum4 = isum3 + 1$, $isum4 = 6$. Se reemplazan en el vector de índices los que corresponden a la matriz original

$$ind(7) = 7$$

$$ind(8) = 8$$

Se compara el valor guardado en $ismin$ con el obtenido para $isum4$ y encontramos que $ismin = isum4$, entonces, se incrementa un contador, el cual nos dará al final la degeneración del estado base, y se mantiene fija $ismin$. Volvemos a la matriz (4 × 4), y escogemos el siguiente elemento menor del primer renglón que es el (1, 4). Y haciendo todo exactamente igual, encontramos que $isum3 = 5$, y que los índices correspondientes a la matriz original que se guardan son:

$$ind(5) = 4$$

$$ind(6) = 8$$

la nueva matriz que se obtiene es:

$$\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array}$$

La correspondencia con la matriz original está dada por:

Tabla 5	
Matriz (2 × 2)	Matriz original(8 × 8)
1	→ 6
2	→ 7

Sumando el elemento correspondiente de ésta matriz, tenemos, $isum4 = isum3 + 1$, $isum4 = 6$. Guardamos en el vector de índices los correspondientes:

$$ind(7) = 6$$

$$ind(8) = 7$$

Se repite la comparación con $ismin$ y se encuentra que nuevamente $isum4 = ismin$, entonces se incrementa en 1 el contador, y no se cambia $ismin$.

Como ya analizamos todos los posibles elementos de la matriz (4×4), ahora volvemos a la matriz (6×6), y tomamos el siguiente elemento menor del primer renglón que corresponde al (1, 4). Ahora se cambiará $isum2$, sumamos $isum1$ con el elemento (1, 4) que tiene el valor de 1 y lo guardamos en $isum2$, entonces, $isum2 = 2$. Guardamos los índices correspondientes, que observamos en la Tabla 1:

$$ind(3) = 3$$

$$ind(4) = 6$$

Quitando los renglones y columnas correspondientes obtenemos una nueva matriz (4×4):

$$\begin{array}{cccc} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \end{array}$$

Los índices de ésta matriz se relacionan con los de la anterior y con los de la original de la siguiente manera:

Tabla 6						
Matriz (4×4)			Matriz (6×6)			Matriz original(8×8)
1	→	2	→	4		4
2	→	3	→	5		5
3	→	5	→	7		7
4	→	6	→	8		8

Ahora vamos a sumar el elemento más pequeño del primer renglón de esta matriz con la $isum2$, y lo guardamos como se ha venido haciendo en $isum3$, observamos que el elemento es el (1, 2), que tiene un valor de 1, obtenemos, $isum3 = 3$, los índices correspondientes los observamos en la Tabla 3 y los guardamos:

$$ind(5) = 4$$

$$ind(6) = 5$$

se repite el proceso de quitar renglones y columnas, obtenemos:

$$\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array}$$

La relación de éstos índices con la matriz original es como sigue

Tabla 7			
Matriz (2×2)			Matriz original(8×8)
1	→		7
2	→		8

De aquí vemos que los índices a guardar son

$$ind(7) = 7$$

$$ind(8) = 8$$

Tomando el elemento de ésta matriz y adicionandolo con la anterior suma, tenemos, $isum4 = 4$. Comparando éste valor con el de $ismin$, observamos que se cumple que $isum4 < ismin$, por lo tanto guardamos ahora el valor de $isum4$ en $ismin$ y se inicializa el contador en 1.

Nosotros sabemos que este es el mínimo valor que puede tomar la suma ya que tenemos 4 pares de plaquetas curvas, entonces abreviaremos aquí, sabiendo que el resto de las iteraciones nos encontrarían la degeneración, y de cuantas diferentes formas podemos unir estos cuatro pares de plaquetas obteniendo esta suma.

De la Fig. 3.5 observamos cuales son las 2 diferentes maneras de unir estas plaquetas teniendo como resultado de la suma de los segmentos de frustración 4, por lo que nuestra degeneración $W = 2$. Entonces la energía del nivel fundamental la calculamos con la ecuación ya mencionada anteriormente:

$$E_g = -2(N - \Lambda_f), \quad (3.1)$$

entonces,

$$E_g = -2(16 - 4), \quad (3.2)$$

$$E_g = -24. \quad (3.3)$$

Por otro lado, recordamos que el parámetro h lo calculamos fácilmente observando nuestra red diluída, que presentamos en la Fig. 3.6, observamos que los enlaces que no aparecen son todos aquellos que en algún momento se atraviesan al unir las plaquetas curvas. Hacemos el conteo y los enlaces que sobreviven y que se observan en la red diluída son 25, entonces dado que el parámetro h está dado por:

$$h = \frac{\text{No. de enlaces no frustrados}}{\text{No. de enlaces totales}}, \quad (3.4)$$

por lo que obtenemos que :

$$h = 0.7813.$$

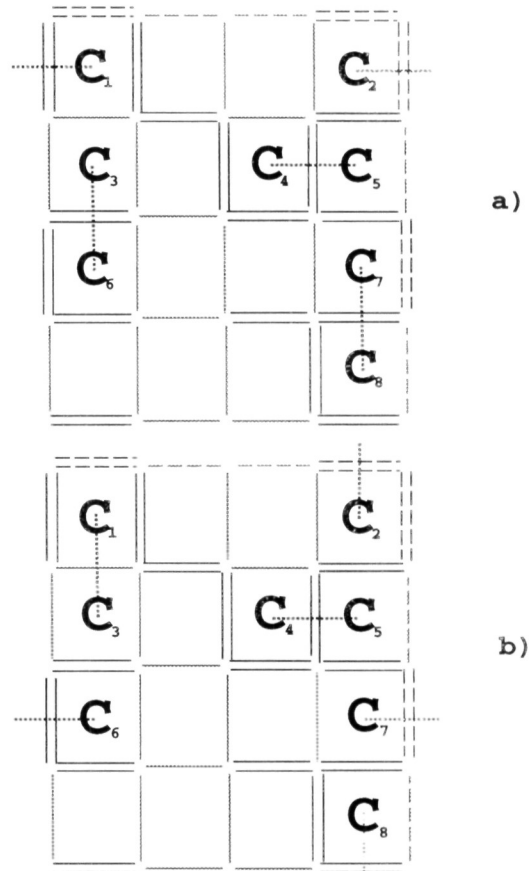


Figura 3.5: Se muestran las dos diferentes maneras de unir las plaquetas curvas para la muestra #7. En el inciso a) se unen $(1,2)(3,6)(4,5)(7,8)$, mientras que en el inciso b) se unen $(1,3)(2,8)(4,5)(6,7)$.

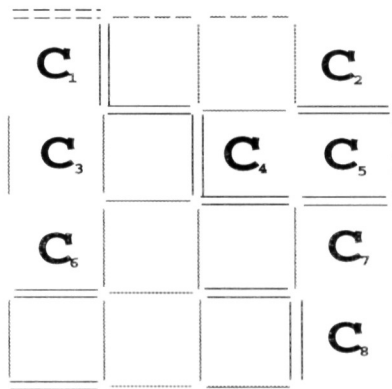


Figura 3.6: Red diluída correspondiente a la muestra #7.

Capítulo 4

Resultados

4.1 Resultados

Efectuados los cálculos para las muestras de los diferentes tamaños de red (4×4) y (5×5), 500 muestras de cada uno y (6×6) sólo 30 muestras, en este último caso debido principalmente a los grandes tiempos de cómputo que se requieren para su análisis utilizando el programa ya descrito en el capítulo anterior, a continuación se muestran los resultados obtenidos.

En la Fig. 4.1 se muestra un diagrama de la Entropía Remanente σ en función de la Energía del estado base por enlace ϵ_g , observamos que la tendencia de σ es a crecer conforme ϵ_g crece para los tres diferentes tamaños de red, encontramos que este es el comportamiento esperado, ya que siempre se puede considerar a la energía como una función de la temperatura, en cuyo caso sabemos que al aumentar la temperatura de cualquier sistema este tiende a desordenarse, por lo tanto la entropía debe crecer. Notamos que existe más dispersión para la red más pequeña esto debido al mismo tamaño, se puede pensar en que los efectos de frontera periódica se sienten más en muestras más pequeñas, sin embargo es importante notar que a bajas energías todos los datos siguen una misma curva.

La Fig. 4.2 muestra la dependencia del parámetro h en función de la Energía del estado base por enlace ϵ_g . La tendencia del parámetro h , recordamos que este nos da información acerca del número de enlaces que nunca se frustran, es clara a decrecer conforme la energía aumenta lo cual nos indica que existe más frustración entre más alta es la energía y se puede relacionar con lo observado en la Fig. anterior en donde como ya comentamos la entropía crece conforme crece la energía, la frustración también crece conforme crece ésta. Observamos también que la convergencia en los tres tamaños de red para el parámetro h es más rápida que en el caso de la entropía remanente pues los datos se ven menos dispersos entorno a una misma curva. Esto nos indica que el efecto de tamaño no afecta de manera sensible a este parámetro.

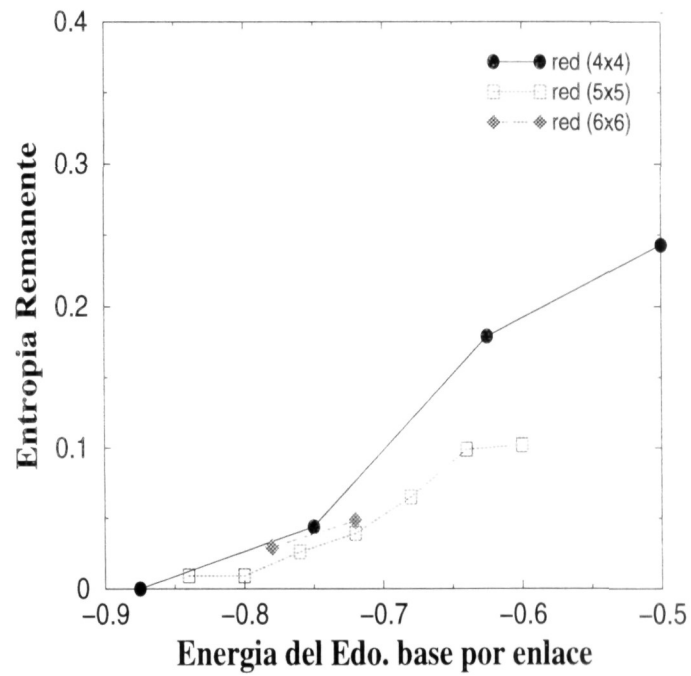


Figura 4.1: Entropía remanente como función de la energía por enlace.

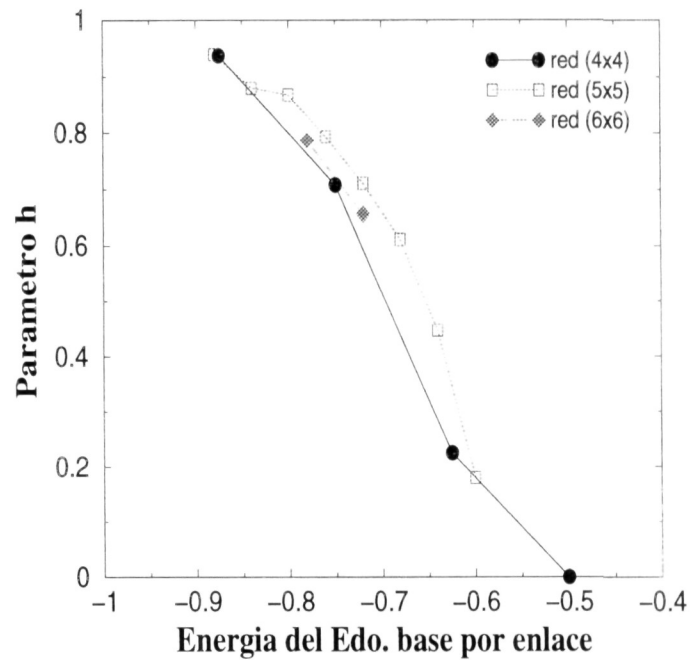


Figura 4.2: Parámetro h como función de la energía por enlace.

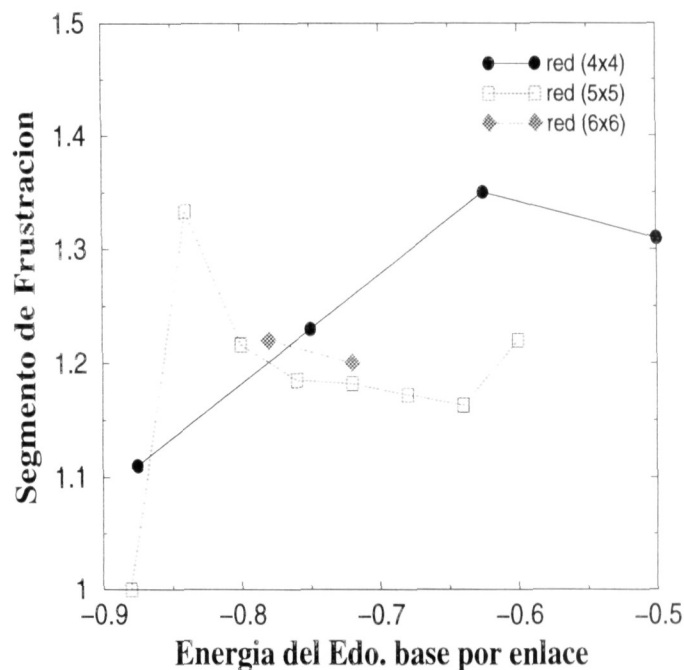


Figura 4.3: *Segmento de frustración promedio como función de la energía por enlace.*

La Fig. 4.3 nos presenta el segmento de frustración promedio (tengamos en cuenta que éste se obtiene dividiendo 2 veces Λ_{fg} entre el número de plaquetas curvas P_C) en función de la Energía del estado base por enlace ϵ_g , aquí observamos que existe una tendencia fuerte del segmento de frustración a decrecer y después a estabilizarse alrededor de 1.18 conforme la energía aumenta para las redes (5×5) y (6×6) , a diferencia de la red pequeña que se tiende a crecer y se dispersa mucho más, suponemos que esto es debido a que en este tamaño de red la frustración en bandas afecta mucho todavía.

De la Fig. 4.4 a la Fig. 4.7 tenemos las gráficas de frecuencias para darnos una idea de cuales son los valores más probables para cada parámetro. En éstas, con el propósito de poder hacer una comparación adecuada, esto es tener iguales poblaciones en las gráficas, los valores que se obtuvieron de frecuencia para las redes (6×6) fueron multiplicados por un factor $500/30$. En la Fig. 4.4 observamos que la energía más probable para el estado base en los tres tamaños de red esta entre -0.75 y -0.70 . Aunque para las redes (4×4) tenemos dos máximos, efecto que no aparece en las redes (5×5) donde podemos observar una distribución casi “normal”. Para las redes (6×6) nos inclinamos a pensar que si tuvieramos mayor número de muestras estas seguirían la misma tendencia que (5×5) de formar una distribución normal.

En la Fig. 4.5 es clara la tendencia a las entropías pequeñas para los 3 diferentes tamaños de red, teniendo el valor más probable en 0. Si observamos bien esta figura nos damos cuenta de que cerca del 20% del total de las muestras para los tres tamaños tienen entropía cero, lo que nos habla de que estos sistemas tienen una componente ordenada considerable y que los estados con entropías altas (gran desorden) se presentan con muy poca frecuencia. Por

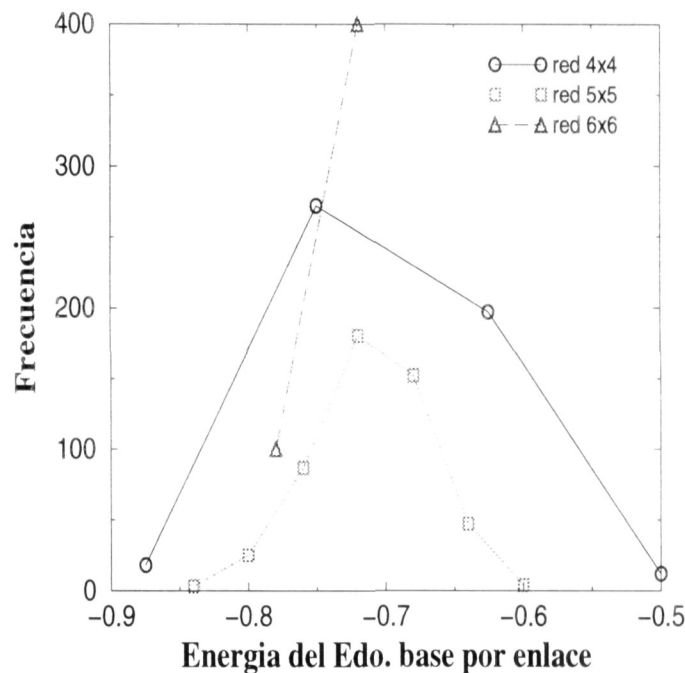


Figura 4.4: Frecuencia de las muestras generadas como función de la energía mínima por enlace.

otro lado notamos una vez más que las redes (4×4) tienen una distribución con 2 máximos, aunque en este caso no es tan notable, y tiende a seguir la misma tendencia que los otros tamaños, la frecuencia decae al parecer exponencialmente conforme la entropía crece. Otra vez se presentan los efectos de tamaño en las redes (4×4) al presentarse dos máximos en la distribución de frecuencias.

La Fig. 4.6 nos muestra que el parámetro h más probable en las redes (4×4) se sitúa alrededor de 0.25 y alrededor de 0.87, una vez más existen 2 máximos para este tamaño de red, mientras que las redes (5×5) presentan un máximo que se establece cercano al 0.80. Observamos que para éste tamaño de red se presenta una distribución sesgada hacia los valores pequeños del parámetro h . En las redes (6×6) aparecen también dos picos, uno alrededor de 0.65 y el otro cerca de 0.85, aunque a diferencia de las redes (4×4) , tiene una distribución más uniforme, suponemos una vez más que si tuviéramos más muestras seguiría una distribución del tipo de las redes (5×5) . Nuevamente se ven claros los efectos de tamaño.

La Fig. 4.7 muestra que para las redes (4×4) y (5×5) el valor del segmento de frustración más probable es 1.00, mientras que para las redes (6×6) anda alrededor de 1.15 y 1.25. Aquí es importante señalar que el único tamaño de red que llega a tener segmentos de frustración promedio de orden 2.00 es (5×5) , esto nos hace pensar, que entre más grande sean las redes hay más posibilidad de tener plaquetas curvas lo suficientemente separadas que no se puedan unir a través de condiciones periódicas, lo cual trae como consecuencia segmentos de frustración más grandes. Imaginamos que no se presentan en las redes (6×6) por tener tan pocas muestras.

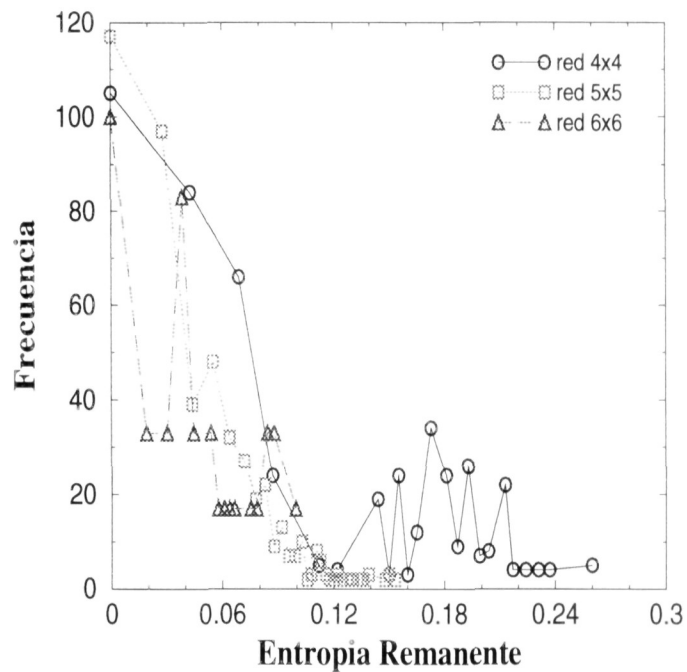


Figura 4.5: Frecuencia de las muestras generadas como función de la entropía remanente.

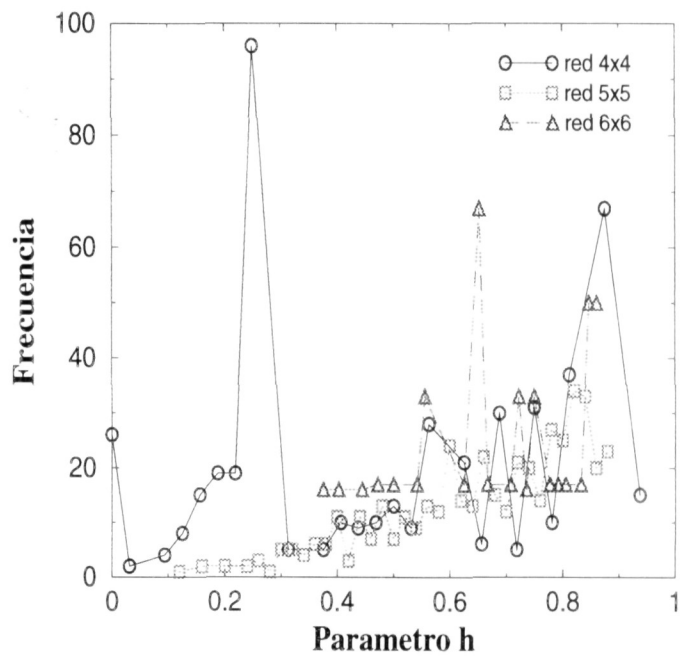


Figura 4.6: Frecuencia de las muestras generadas como función del parámetro h .

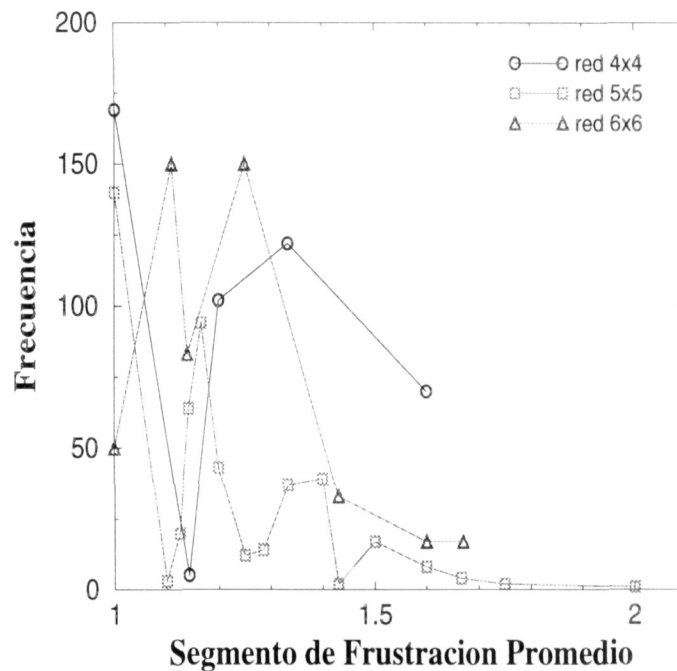


Figura 4.7: Frecuencia de las muestras generadas como función de los segmentos de frustración.

4.2 Comparación con cálculos que consideran frustración en bandas

En esta sección presentamos los resultados obtenidos comparados con los resultados obtenidos por el Prof. Vogel y su grupo[8] para los mismos tamaños de redes pero considerando frustración en bandas.

En la Fig. 4.8 se muestra la Energía del estado base por enlace ϵ_g en función del inverso de N . Los círculos unidos representan los cálculos realizados en el presente trabajo, mientras que los triángulos representan los cálculos del grupo del Prof. Vogel, en especial el triángulo relleno nos representa el valor extrapolado al infinito en estos cálculos. La línea segmentada nos representa la energía ideal para estos sistemas. Entendemos como energía ideal, la que se obtiene cuando el número de plaquetas curvas es exactamente la mitad del número de plaquetas y el segmento de frustración es 1.0, esto es, cuando todos los pares de plaquetas curvas comparten un enlace frustrado. Observamos como los dos diferentes cálculos tienen la misma tendencia para las redes más pequeñas tienen energía más grande y de ahí las otras decrecen la energía rápidamente. En el caso del cálculo que considera frustración en bandas tiende a el valor de -0.70 [8] al igual que otros cálculos computacionales para redes grandes[14, 15], mientras que nuestros cálculos nos acercan al valor de -0.75 , lo que nos habla de que nuestros cálculos aún sin considerar frustración en bandas son buenos ya que se acercan al límite ideal obtenido en algunos cálculos teóricos[14]; observamos por lo tanto que la eliminación de las condiciones de bandas acerca más a la situación ideal. Por otro

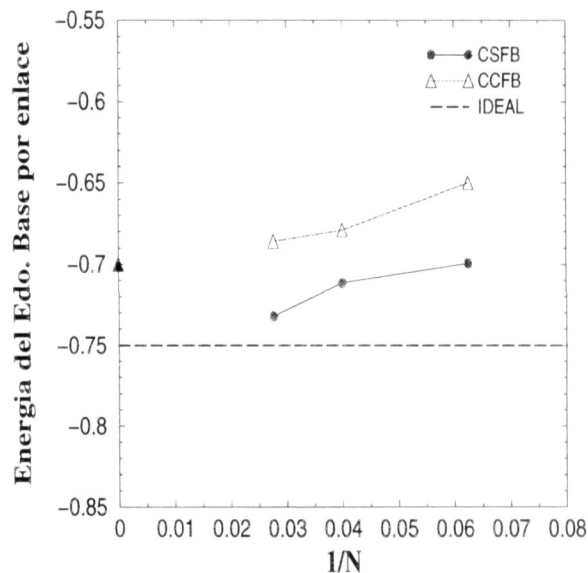


Figura 4.8: *Energía del estado base por enlace como función del inverso de N . CSFB hace referencia a los cálculos realizados en este trabajo, mientras que CCFB nos hacen referencia a los que consideran frustración en bandas[8].*

lado los resultados nos demuestran que efectivamente la consideración de bandas hace que la energía crezca, como se mencionó en el capítulo 2.

La degeneración W del estado base se estudia mejor a través de la Entropía remanente σ . Esta la presentamos en la Fig. 4.9 como función del inverso de N . Como en la figura anterior círculos son los cálculos realizados en el presente trabajo y triángulos los realizados por el grupo del Prof. Vogel. Observamos como la tendencia es exactamente igual para ambos cálculos decrece conforme N aumenta. En los cálculos que consideran frustración en bandas observamos que tiende al valor de 0.11, mientras que en los nuestros que además de no considerar frustración en bandas consideran más pequeña degeneración pues tienen a un valor por abajo como era de esperarse, el valor es 0.04. Cabe hacer notar que algunos otros cálculos que no consideran tampoco frustración en bandas obtienen un valor de 0.07 para esta magnitud[13].

En la Fig. 4.10 mostramos ahora el Parámetro h en función del inverso de N , considerando las mismas observaciones que en las figuras anteriores. En este esquema observamos nuevamente que las tendencias son muy parecidas h crece conforme N crece alcanzando una saturación. En el caso que considera frustración en bandas la tendencia es hacia el valor de 0.5, mientras que en el caso que no se considera esta frustración el valor es más alto, aproximadamente 0.7, lo que nos indica que al no considerar bandas los sistemas tienden a tener menos frustración puesto que hay más grados de libertad disponibles en el sistema.

Dada la relación que el promedio del segmento de frustración del estado base $\langle \lambda_{Fg} \rangle$ tiene con la energía, relación que observamos en la ecuación 2.16 es conveniente o interesante estudiar su comportamiento, por lo cual, se muestra en la Fig. 4.11 en función nuevamente del inverso de N . Observamos como al parecer las tendencias varían un poco, en el caso

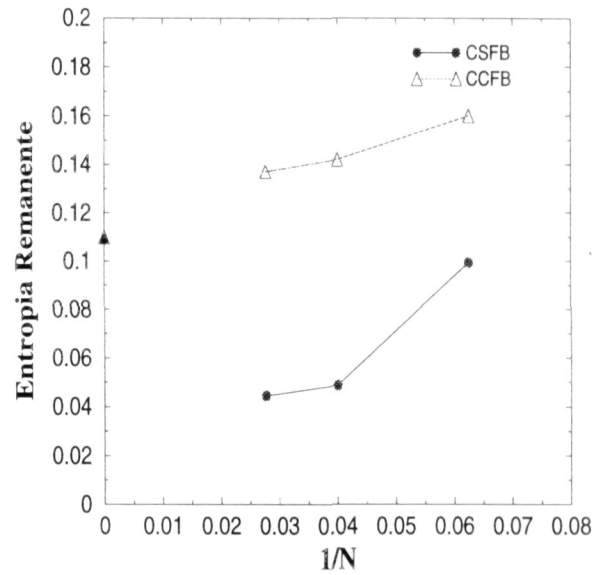


Figura 4.9: *Entropía Remanente como función del inverso de N . CSFB hace referencia a los cálculos realizados en este trabajo, mientras que CCFB nos hacen referencia a los que consideran frustración en bandas[8].*

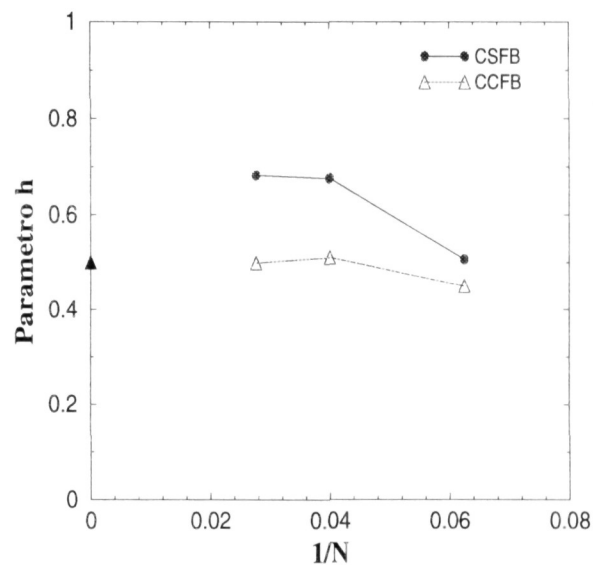


Figura 4.10: *Parámetro h como función del inverso de N . CSFB hace referencia a los cálculos realizados en este trabajo, mientras que CCFB nos hacen referencia a los que consideran frustración en bandas[8].*

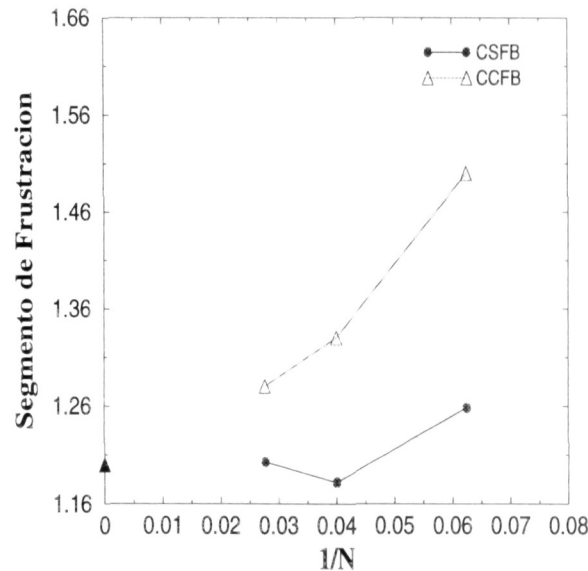


Figura 4.11: Segmento de frustración como función del inverso de N . CSFB hace referencia a los cálculos realizados en este trabajo, mientras que CCFB nos hacen referencia a los que consideran frustración en bandas[8].

de los resultados que consideran frustración en bandas se nota claramente una tendencia decreciente conforme N aumenta encontrando como valor asintótico 1.20, mientras que en nuestros resultados observamos como las redes (4×4) y (5×5) así lo muestran pero en la (6×6) tiende a subir un poco, esto suponemos debido a las pocas muestras con las que se cuentan, porque sin embargo el valor más probable recordamos que anda entre 1.15 lo cual es por abajo del límite asintótico de los otros cálculos. Esperamos que con más muestras (6×6) y considerando redes de tamaños más grandes la tendencia a decrecer sería más clara, esto sustentado en el valor más probable observado en el histograma Fig. 4.7.

4.3 Comparación con resultados del Algoritmo Genético.

En esta sección compararemos nuestros resultados con los obtenidos con un cálculo realizado con algoritmo genético[16]. Este algoritmo además de ser uno de los que se piensan tienen más futuro, al parecer es uno de los más efectivos. Este se basa en encontrar mínimos para cálculos de varias variables.

La Tabla A nos muestra los resultados obtenidos por el AG y la Tabla B los obtenidos por nosotros para los mismos tamaños de redes, con el fin de poder comparar con los resultados del AG, las energías obtenidas en nuestro trabajo ahora en lugar de dividirse por el número de enlaces B como en los capítulos anteriores aquí se divide por el tamaño de la red N , ya que es el número de espines que se tienen en el sistema. Cabe hacer notar que en el trabajo de AG no se menciona nada acerca de frustración en bandas o en plaquetas.

TABLA A: En la tabla se muestran los resultados encontrados para la energía del estado base por espín en diferentes redes de Ising con algoritmo genético[16].

Tamaño del sistema	No. de corridas	Promedio $\frac{E_0}{\text{espín}}$
16	100	-1.290 ± 0.110
25	100	-1.347 ± 0.097
36	100	-1.350 ± 0.077
36	100	-1.344 ± 0.081

TABLA B: En la tabla se muestran los resultados encontrados para la energía del estado base por espín en diferentes redes de Ising en nuestro trabajo.

Tamaño del sistema	No. de corridas	Promedio $\frac{E_0}{\text{espín}}$
16	500	-1.375 ± 0.280
25	500	-1.422 ± 0.160
36	30	-1.464 ± 0.060

Observamos de las Tablas que aunque nuestros resultados no son iguales, si entran en el rango de los obtenidos por el AG. Por ejemplo para una red (5×5) éste (AG) obtiene una energía por espín de -1.347 ± 0.097 y nosotros obtenemos -1.422 ± 0.160 , si nos vamos al límite inferior del AG obtenemos -1.444 y obviamente nuestro valor cae dentro de ese rango. Esto nos da confianza en nuestros resultados.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se desarrolló un algoritmo capaz de calcular la energía del estado base y su degeneración para una red de Ising $\pm J$ en dos dimensiones con frustración, considerando solo frustración en plaquetas, y condiciones de borde periódicas. La idea original surgió con el propósito de encontrar hasta que segmento de frustración promedio es necesario considerar en cálculos de este tipo, debido al tiempo de computo nuestros resultados no nos permiten dar respuesta para este planteamiento, sin embargo, los resultados que aquí se presentan nos dan una idea del comportamiento que estos sistemas tienen. Observamos que el tamaño en estos sistemas es importante, pues para $N = 16$ (4×4) se observa mucha dispersión en los resultados, a diferencia de $N = 25$ (5×5) y $N = 36$ (6×6) donde las tendencias son más claras. Se encontró que la entropía remanente como función de la energía del estado base presenta un tendencia creciente. El parámetro h presenta al contrario que la entropía una tendencia decreciente, además que observa menos dispersión que en las otras cantidades calculadas razón por la cual se puede decir que no es tan sensible al tamaño, pero en el histograma (frecuencia vs parámetro h) correspondiente se observan dos valores con frecuencias altas, lo cual nos indica que el tamaño si afecta al parámetro aunque no drásticamente. Para el segmento de frustración como función de la energía del estado base por enlace, se encontró que tiende a decrecer un poco y rápidamente se estabiliza. Por otra parte, nuestras cantidades calculadas (ϵ_g, h, W) como función del tamaño fueron comparadas con las obtenidas por el Prof. Vogel y su grupo para estos mismos sistemas pero donde ellos si consideran frustración en bandas y plaquetas. Para la energía del estado base por enlace nosotros encontramos una tendencia creciente conforme el tamaño disminuye tendencia que también presentan los otros cálculos, al extrapolar obtenemos como valor límite -0.75 , mientras que en los cálculos que si consideran frustración en bandas el valor extrapolado es -0.70 , lo cual nos habla de que el no considerar bandas hace que la energía disminuya. La entropía remanente observa en ambos cálculos una tendencia similar, decrece conforme N aumenta. En los cálculos de bandas el valor extrapolado es 0.11 , mientras que el correspondiente para nuestros cálculos es 0.04 , lo que nos habla de que el no considerar bandas hace que la entropía disminuya considerablemente. Para el parámetro h se tiene también que ambos cálculos tienen la misma tendencia, crece conforme N crece, alcanzando un valor de saturación de 0.5 para los cálculos con bandas y un valor de 0.7 para nuestros cálculos, lo que nos indica que al no considerar bandas tenemos menos frustración. Por último observamos que para el segmento de frus-

tración promedio en los cálculos con bandas se tiene una tendencia decreciente conforme N aumenta y un valor extrapolado de 1.20, mientras que nuestra tendencia se sale un poco para las redes (6×6) esto debido suponemos a las pocas muestras, pero definitivamente el valor extrapolado debe de andar por debajo del valor encontrado en el otro cálculo. Finalmente es importante mencionar que se compararon nuestros resultados con unos obtenidos por un cálculo con algoritmo genético y nuestros resultados aunque no iguales están dentro de los rangos obtenidos por éste.

En resumen, los algoritmos basados exclusivamente en topología de plaquetas dan valores consistentes con otros cálculos numéricos y topológicos. La importancia de nuestros algoritmos reside en que al aumentar N el rol de las bandas debe disminuir, por lo que resultados obtenidos por técnicas como las desarrolladas aquí podrían ser suficientes para la descripción de estos sistemas y sus principales propiedades. Para lograr conclusiones más firmes que respalden esta hipótesis será necesario avanzar a redes de mayor tamaño $[(7 \times 7), (8 \times 8),$ eventualmente hasta $(10 \times 10)]$ mediante máquinas más rápidas y optimización de los códigos de Fortran aquí desarrollados.

Bibliografía

- [1] Huang, Kerson, *Statistical Mechanics* (1987).
- [2] K. Binder, A.P. Young, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 801 (1986).
- [3] M.A. Ruderman and C. Kittel, *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954); T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956); K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957).
- [4] F. Aguilera-Granja, M.C. Cadeville, V. Pierron-Bohnes, A. Dina and T.H. Kim, *Phys. Rev. B* **56**, 693 (1997).
- [5] D. Sherrington, S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792 (1975).
- [6] n. Parga, *Actas del Quinto Taller Sur de Física del Sólido*, Ed. Universidad de la Frontera, Temuco 5 (1990).
- [7] G.Toulouse, *Commun. Phys.***2**, 115 (1977).
- [8] E.E. Vogel, J. Cartes, S. Contreras, W. Lebrecht and J.Villegas, *Phys. Rev. B* **49**, 6018 (1994).
- [9] S.F. Edwards and P.W. Anderson, *J. Phys. F***5**, 965 (1975).
- [10] E.E. Vogel, S. Contreras, J. Cartes, enviado a *Proceeding of the Second Latin-American Workshop on Magnetism. Magnetic Materials and their Applications.* , Guanajuato, México (1993).
- [11] E.E. Vogel, S. Contreras, J. Cartes, W. Lebrecht, J.Valdés, F. Nieto and A.J. Ramírez. *Actas Séptimo Taller Sur de Física del Sólido* **97**, (1993).
- [12] I. Ono, *J. Phys. Soc. Jpn.* **41**, 345 (1976).
- [13] J. Vannimenus and G. Tolouse, *J. Phys. C* **10**, 537 (1977).
- [14] S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. B* **16**, 4630 (1977).
- [15] E.E. Vogel, P. Vargas and G. Pérez, *Phys. Rev. B* **40**, 4369 (1989).
- [16] P. Sutton and S. Boyden, *Am. J. Phys.* **62** (6), 549 (1994).

Apéndice A

Subrutina Diluída

Esta subrutina comienza con un ciclo que nos permitirá controlar los índices, aquellos que guardamos en el vector mencionado en la sección de índices. Después vienen dos ciclos más para encontrar la primera plaqueta de un par que se unió, esto se hace comparando con el un elemento del vector de índices, después vienen otros dos ciclos para encontrar la otra plaqueta que se unió y se compara con el siguiente elemento del vector de índices, ya que se tiene un par de plaquetas que se unió, y sus correspondientes índices para ubicarlos en la red, se buscarán todas las posibles formas de unir este par de plaquetas, y se encontrarán como en la subrutina **distancia** todos los valores para estas distancias, por lo tanto también aquí se cuestiona si los índices cumplen con las condiciones,

$$(i - k) < 0 \text{ y } (j - l) < 0$$

$$(i - k) < 0 \text{ y } (j - l) > 0$$

$$(i - k) > 0 \text{ y } (j - l) < 0$$

$$(i - k) > 0 \text{ y } (j - l) > 0$$

$$(i - k) = 0 \text{ y } (j - l) > 0$$

$$(i - k) = 0 \text{ y } (j - l) < 0$$

$$(i - k) < 0 \text{ y } (j - l) = 0$$

$$(i - k) > 0 \text{ y } (j - l) = 0$$

, después de que cumple con alguna de estas condiciones, se encuentran las distancias con fórmulas como las ya mencionadas anteriormente, ejemplo para $(i - k) < 0 \text{ y } (j - l) < 0$

$$ir1 = abs(i - k) + abs(j - l)$$

$$ir2 = abs(i - k + LX) + abs(j - l)$$

$$ir3 = abs(i - k) + abs(j - l + LX)$$

$$ir4 = abs(i - k + LX) + abs(j - l + LX)$$

de aquí hace un llamado a la subrutina **qlerd**, la cual crea unas matrices similares a las que se formaron al leer los enlaces de la muestra, pero donde pone 0, en lugar de -1 ó 1 en las posiciones donde los enlaces deben de ser quitados, recordamos que los enlaces que se quitan son aquellos que son atravesados por los segmentos de frustración al unir un par de plaquetas curvas. La subrutina **qlerd**, consiste en un número grande de if, que a su vez tienen if anidados, es importante hacer notar que por esta razón es que el tiempo de cálculo se hace tan grande. Esta subrutina básicamente repite cuatro algoritmos como el siguiente:
if(idm1.eq.ibr(lq1,lq2))then

```
if((jj-jl).eq.0)then
if(ji.lt.jk)then
do im=ji,jk-1
krdx(im,jj)=0
end do
end if
if(ji.gt.jk)then
do im=jk,ji-1
krdx(im,jj)=0
end do
end if
end if
if((ji-jk).eq.0)then
if(jj.lt.jl)then
do in=jj+1,jl
krdy(ji,in)=0
end do
end if
if(jj.gt.jl)then
do in=jl+1,jj
krdy(ji,in)=0
end do
end if
end if
if(ji.lt.jk.and.jj.lt.jl)then
do im=ji,jk-1
do in=jj,jl
krdx(im,in)=0
end do
end do
do im=ji,jk
do in=jj+1,jl
krdy(im,in)=0
end do
end do
end if
if(ji.lt.jk.and.jj.gt.jl)then
do im=ji,jk-1
do in=jl,jj
krdx(im,in)=0
end do
end do
do im=ji,jk
do in=jl+1,jj
```

```

krdy(im,in)=0
end do
end do
end if
if(ji.gt.jk.and.jj.gt.jl)then
do im=jk,ji-1
do in=jl,jj
krdx(im,in)=0
end do
end do
do im=jk,ji
do in=jl+1,jj
krdy(im,in)=0
end do
end do
end if
if(ji.gt.jk.and.jj.lt.jl)then
do im=jk,ji-1
do in=jj,jl
krdx(im,in)=0
end do
end do
do im=jk,ji
do in=jj+1,jl
krdy(im,in)=0
end do
end do
end if
end if

```

donde *ibr* es la matriz de distancias encontrada en la subrutina **distancia**, *idm1* es igual al *ir1* que aparece en el algoritmo presentado en la parte de la subrutina **diluida**, de manera similar *idm2* es *ir2*, *idm3* es *ir3* e *idm4* es *ir4*. Los *jk*, *jl*, *ji*, *jj*, representan los índices que controlan los ciclos de la subrutina **diluida**, *lq1* representa el valor guardado en el vector de índices con componente *m*, y *lq2* el valor guardado en este mismo vector con componente *m + 1*, finalmente *krdx* y *krdy* son las matrices que guardan los enlaces de la red diluída. ya que se encontró ésta, por último se pone en la variable **EX** el nuevo valor de la suma mínima.