

Frustración local en la red arquimediana (3,4,6,4)

W. Lebrecht y J.F. Valdés

Departamento de Física, Universidad de La Frontera,

Casilla 54-D, Temuco, Chile,

e-mail: lebrecht@ufro.cl, jvaldes@ufro.cl

Recibido el 30 de julio de 2007; aceptado el 29 de agosto de 2008

Mediante un modelo de Ising con interacciones mixtas $\pm J$ a primeros vecinos y a temperatura nula, se describe el comportamiento de parámetros físicos y topológicos del nivel fundamental asociado a la red (3,4,6,4) en notación de Grünbaum y Shephard (NL por simplicidad). Se utilizan para ello, dos descripciones canónicas determinadas por distribuciones de probabilidad ϕ y ψ que son establecidas a través de un análisis local de frustración sobre una celda representativa de la red. Los resultados obtenidos para la energía promedio por enlace, el segmento promedio de frustración y la fracción de enlaces no frustrados en ambas descripciones, se comparan con simulaciones numéricas basadas en el método de multirréplicas de descenso rápido sobre un conjunto de 10000 muestras generadas aleatoriamente, incluyendo condiciones periódicas de borde. Se encuentra un buen acuerdo entre los resultados analíticos y numéricos, especialmente en las fases antiferromagnética y vidrio de espín.

Descriptor: Frustración; red diluida; modelo de Ising.

By means of Ising model with mixed interactions $\pm J$ to nearest neighbors and null temperature, is described the behavior of physical and topological parameters of the fundamental level associated to (3,4,6,4) lattices in notation of Grünbaum and Shephard, NL for simplicity. It is used for it, two canonical descriptions determined by distributions of probabilities ϕ and ψ that they are established through a local analysis of frustration on a representative cell of the lattice. The results obtained for average energy per bond, average frustration segment and fraction of unfrustrated bonds in both descriptions are compared with numerical simulations based on method of multireplicas of quick descent over a set of 10000 samples randomly generated including periodic boundary conditions. It observes a good agreement between analytical and numerical results, especially at antiferromagnetic and spin glass phases.

Keywords: Frustration; diluted lattices; Ising model.

PACS: 05.50.+q; 75.10.Hk

1. Introducción y teoría

La red NL o (3,4,6,4) en notación de Grünbaum y Shephard [1] es una de las once redes arquimedianas conocidas y está conformada por una combinación de hexágonos, cuadrados y triángulos, cuya repetición en el plano determina una red con número de coordinación c igual a cuatro. El número de coordinación corresponde al número de nodos a primeros vecinos en torno a uno central. Nuestro trabajo describe el nivel fundamental de la red y una de las formas de hacerlo es considerar interacciones aleatorias y mixtas entre los nodos. El sistema formado permite realizar estudios de competencia de interacciones a través de frustraciones [2], población del nivel fundamental [3] ya que no existe un único estado, lo que permite introducir el concepto de red diluida [4,5]; es decir, aquellas interacciones que nunca fueron sometidas a frustración cuando se recorren todos los estados del nivel fundamental y finalmente optimizar los algoritmos computacionales, puesto que se observan mínimos locales que no necesariamente corresponden a aquellos que caracterizan el nivel fundamental. Este tratamiento de la red simula un modelo simple de vidrio de espín [6-8].

En general las redes arquimedianas mixtas mezclan dos o más geometrías diferentes, en el caso de la red de Kagomé incorpora geometrías hexagonales y triangulares, la red FL mezcla geometrías cuadradas y triangulares [9], en tanto en la red NL mezcla geometrías hexagonales, cuadradas y

triangulares, las cuales han sido desarrolladas independientemente siguiendo esta descripción [10].

Este trabajo permite comparar los resultados obtenidos para la red NL respecto de las siguientes propiedades asociadas al nivel fundamental: segmento promedio de frustración, fracción de enlaces no frustrados y energía promedio por enlace, además se presenta un método analítico basado en dos descripciones respecto de un análisis local de frustración sobre una celda representativa de la red [11,12].

Cada nodo de la red NL contiene espines de Ising con dos orientaciones posibles, *arriba* y *abajo*, cuyas interacciones están descritas por una función bimodal discreta de Edwards Anderson $\pm J$, de tal manera que el hamiltoniano que describe el sistema a primeros vecinos es

$$H = \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j, \quad (1)$$

donde J_{ij} es la interacción de intercambio y puede ser $+J$ si la interacción es antiferromagnética (AF) o $-J$ si es ferromagnética (F), distribuidas al azar. Dado que la distancia entre sitios de espín es igual en la red, la magnitud de la interacción a primeros vecinos es la misma, que por comodidad se supone $J = 1$. Tanto S_i (S_j) pueden ser ± 1 en cada sitio de espín de la red, por lo tanto el hamiltoniano anterior puede reescribirse como

$$E = J \sum^{B_1} \uparrow\uparrow + J \sum^{B_2} \uparrow\downarrow - J \sum^{B_3} \uparrow\uparrow - J \sum^{B_4} \uparrow\downarrow, \quad (2)$$

donde $\uparrow\uparrow$ ($\uparrow\downarrow$) son espines paralelos (antiparalelos), la sumatoria considera todos los casos asociados a estas parejas de espines y B_i representa el número total de interacciones correspondiente en cada caso. Para un tamaño finito N de espines y considerando condiciones periódicas de borde, el número total de interacciones o enlaces es

$$B = \sum_{i=1}^4 B_i = \frac{1}{2}cN. \quad (3)$$

Por otro lado, un análisis de la combinatoria en los términos internos de la Ec. (2) permite determinar aquellos enlaces que cooperan con una unidad negativa en la energía (B_2 y B_3), en cambio, los términos extremos cooperan con una unidad positiva de ella (B_1 y B_4). Estos últimos son enlaces *insatisfechos* y son los responsables de la frustración de la red. El número total de ellos se denomina longitud de frustración Λ_F . De este modo, combinando las Ecs. (2) y (3), se tiene

$$\begin{aligned} E &= B_1 - B_2 - B_3 + B_4 = -B + 2(B_1 + B_4) \\ &= -B + 2\Lambda_F. \end{aligned} \quad (4)$$

El concepto de frustración está asociado a ciertas geometrías en su fase antiferromagnética, tales como la red triangular, la red de Kagomé y NL, entre otras [13,14]. Esto significa que basta un tipo de interacción ($+J$ en este caso) para que exista frustración. Estos sistemas son altamente frustrados en su nivel fundamental y presentan una alta población de estados con mínima energía, determinados por un orden en los sitios de espín. En otras geometrías, tales como en la red cuadrada o hexagonal, la frustración solo es posible por la competencia de enlaces F y AF distribuidos al azar, siendo la competencia mayor entre ellos cuando el número de enlaces de un tipo es igual al otro.

Topológicamente, Toulouse [15] determinó que la longitud de frustración está determinada por la unión de pares de plaquetas frustradas. Una plaqueta frustrada o *curva* es el

mínimo circuito de la red en que al menos uno de sus enlaces está insatisfecho. La Fig. 1 ilustra este concepto para redes que contienen geometrías básicas tales como cuadrados, triángulos y hexágonos. La línea discontinua representa un enlace insatisfecho, puesto que al recorrer el circuito cerrado, ese enlace coopera con un valor positivo en la energía, el resto de ellos cooperan con valores negativos en ella. Se establece, además, que si el número de enlaces que compone la plaqueta es par, entonces una plaqueta frustrada coopera con una unidad negativa en la energía (estos son los casos de las redes cuadradas y hexagonales). En caso contrario, si el número de enlaces que conforma la plaqueta es impar (red triangular), una plaqueta frustrada coopera con una unidad positiva en la energía. Desde este punto de vista topológico, una plaqueta está siempre frustrada, cuando el número de enlaces antiferromagnéticos que conforma la plaqueta es impar.

El número de plaquetas frustradas (curvas) de una red está determinado por una función de plaquetas curvas $P_c(x)$ para distintos tipos de geometrías y en términos globales queda definida como

$$P_c(x) = \frac{(c-2)}{2} N \varphi_c(x), \quad (5)$$

donde x es la concentración de enlaces ferromagnéticos, $\varphi_c(x)$ corresponde a la función de probabilidad asociada a plaquetas curvas [16] y para el caso particular de la red NL [17] ésta se encuentra dada por

$$\varphi_c(x) = \frac{1}{3}(1-x)(16x^5 - 32x^4 + 40x^3 - 20x^2 + 7x + 1). \quad (6)$$

Por otro lado, la unión de dos plaquetas curvas determina lo que se denomina *segmento de frustración* σ , así por ejemplo, dos plaquetas curvas definen un segmento de frustración, cuatro plaquetas curvas, definen dos segmentos de frustración y así sucesivamente; en general, $\sigma = P_c/2$. A su vez, un segmento de frustración contiene uno, dos o más enlaces insatisfechos, de tal manera que la suma total de todos los enlaces insatisfechos coincide con la longitud de frustración definida anteriormente. Una forma de medir la frustración de la red es a través del segmento promedio de frustración, dado por

$$\langle \lambda \rangle = \frac{\Lambda_F}{\sigma} = \frac{2\Lambda_F}{P_c}, \quad (7)$$

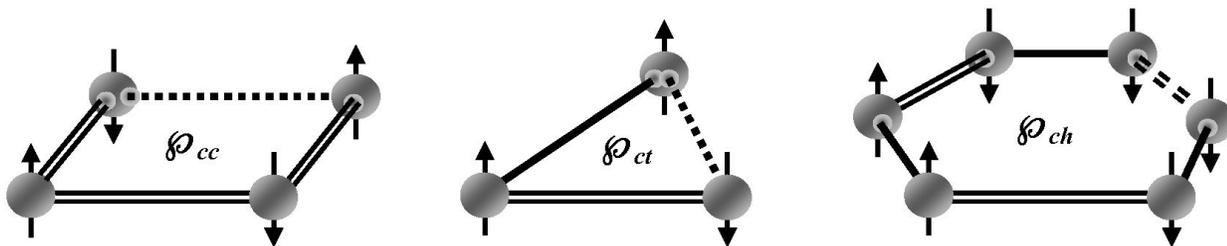


FIGURA 1. Plaquetas curvas en redes cuadradas, triangulares y hexagonales. Los círculos representan un sitio de espín, *arriba* o *abajo*. Las líneas dobles corresponden a un enlace AF y las simples a un enlace F. Las líneas segmentadas representan enlaces insatisfechos.

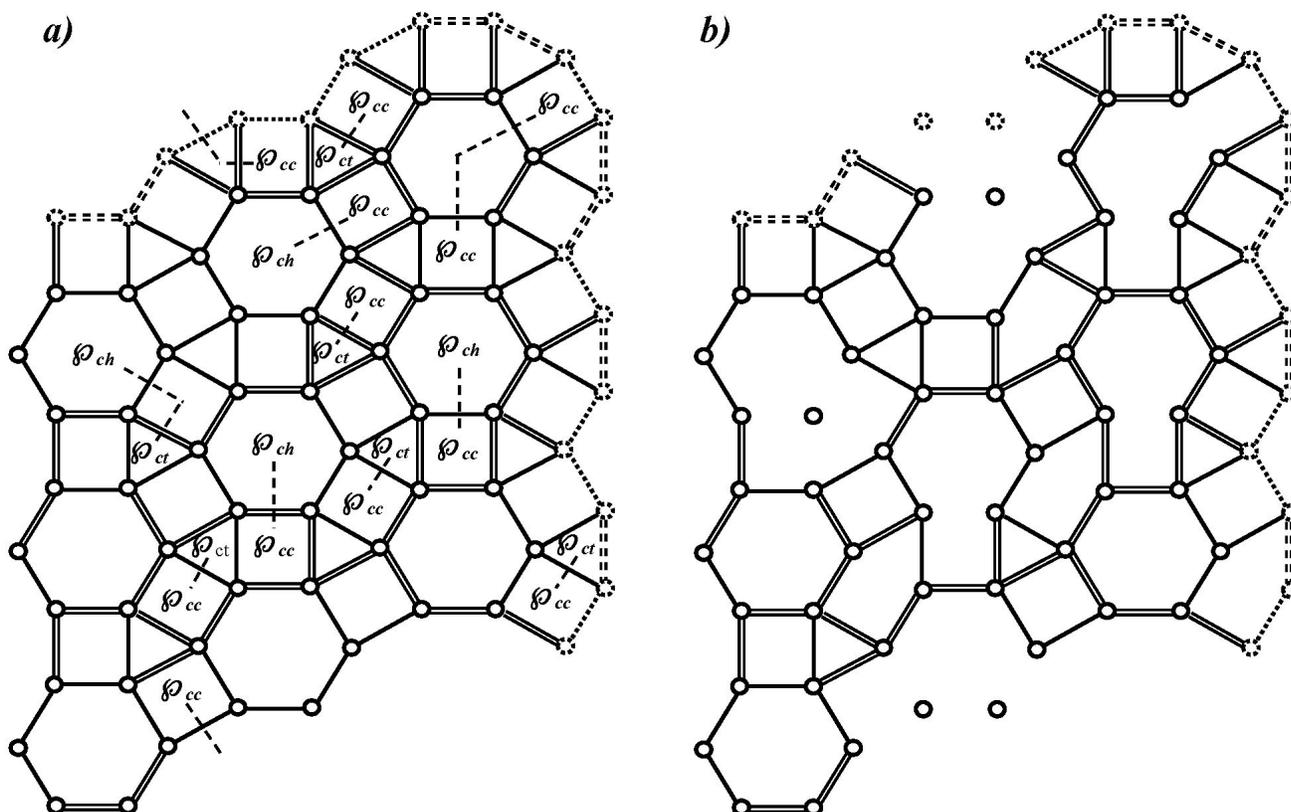


FIGURA 2. a) Un estado del nivel fundamental para una muestra de un arreglo 3×3 asociado a la red NL con condiciones periódicas de borde. Se indican sólo las plaquetas curva y se ilustran los segmentos mínimos de frustración mediante líneas segmentadas. b) Red diluida obtenida a partir de la mostrada en a) donde se han eliminado los enlaces frustrados de los 8 estados que conforman el nivel fundamental.

cuyo número indica la cantidad de enlaces insatisfechos por segmento. Para la fase F ($x = 1.0$) se supone la existencia de un segmento de longitud infinita y dado que la red no tiene frustración $\langle \lambda \rangle = 0.0$. Por el contrario, en la fase AF ($x = 0.0$), no es necesariamente nulo, sino que depende de la topología de la red. Dado el comportamiento que presenta este parámetro en redes cuadradas [18] es un buen elemento a considerar como responsable para la determinación del punto crítico x_c asociado al cambio de fase del sistema desordenado (interacciones mixtas) al sistema ordenado (interacciones ferromagnéticas). En particular, cuando los segmentos de frustración unen plaquetas curvas con longitudes son mínimas de frustración, se determina la mínima energía posible, que corresponde al nivel fundamental. Combinando las Ecs. (4), (5) y (7), se tiene que la energía promedio por enlace asociada al nivel fundamental, $\langle \varepsilon_g \rangle$, se puede expresar como

$$\langle \varepsilon_g \rangle = \frac{E_g}{B} = -1 + \frac{1}{2} \langle \lambda_g \rangle \varphi_c(x), \quad (8)$$

donde el subíndice g , aquí y en el resto del texto representa las propiedades asociados al nivel fundamental.

1.1. Cálculo topológico

Un arreglo de $L \times M$ espines en la red NL se obtiene a través de la repetición de una estructura compuesta por un

hexágono, tres cuadrados y dos triángulos [17]. Esta estructura se repite L veces en la dirección vertical y M veces en la dirección que une los centros de las plaquetas hexagonales, estableciendo un número total de sitios de espín $N=6(L \times M)$ y un número total de enlaces $B=12(L \times M)$. Sobre un arreglo se distribuyen aleatoriamente enlaces F y AF con una concentración $x = F/B$, la cual permanece fija a $T = 0$. Cada una de estas distribuciones de enlaces F y AF constituye una muestra en la cual se incorporan condiciones periódicas de borde.

La Fig. 2a ilustra un estado de mínima energía para una muestra de un arreglo 3×3 en una red NL. Los círculos representan un sitio de espín, las líneas simples y dobles representan enlaces F y AF, respectivamente. Los sitios y enlaces mostrados con líneas discontinuas en los bordes derecho y superior representan condiciones periódicas de borde para la muestra. El análisis topológico indica un total de 22 plaquetas frustradas, de las cuales 12 son plaquetas curvas cuadradas representadas por φ_{cc} , 6 son plaquetas curvas triangulares (φ_{ct}) y 4 son plaquetas curvas hexagonales φ_{ch} . Las líneas discontinuas que enlazan plaquetas curvas son segmentos mínimos de frustración, observándose que algunos tienen un enlace insatisfecho y otros 2 enlaces insatisfechos. La longitud de frustración es $\Lambda_{Fg} = 8 \times 1 + 3 \times 2 = 14$ que corresponden a los 14 enlaces insatisfechos en la muestra. Además, el número de segmentos de frustración es $\sigma_g = 8 + 3 = 11$,

por lo que el segmento promedio de frustración resulta ser $\langle \lambda_g \rangle = 14/11 = 1.27$. De este modo, la energía del nivel fundamental es $E_g = -108 + 28 = -80$, determinada por la Ec.(4).

Los estados que componen el nivel fundamental se obtienen enlazando otras configuraciones de pares de plaquetas frustradas con segmentos mínimos de frustración, y para esta muestra en particular el número de ellos es 8, lo que constituye la degeneración del nivel. Cuando se eliminan los enlaces insatisfechos o frustrados en esta muestra, recorriendo todos los estados del nivel fundamental, se obtiene la red diluida asociada, representada por la fracción de enlaces que nunca fueron frustrados respecto del total de enlaces de la muestra y que corresponde a $h_g = 86/108 = 0.80$, tal como se ilustra en la Fig. 2b. La red diluida en esta muestra conecta todos sus enlaces y se dice que percola [19]. En otras muestras se pueden establecer islas de diferentes tamaños y formas, siendo la mayor la que permite establecer un ancla o pivote para estudios del comportamiento del espacio de configuración. Éste es el puente para considerar estudios a temperatura no nula del sistema [20,21].

1.2. Cálculo numérico

Los cálculos topológicos permiten obtener en forma exacta las propiedades asociadas al segmento promedio de frustración, la fracción de enlaces no frustrados y la energía promedio por enlace para muestras de tamaño pequeño, caracterizadas por una baja degeneración del nivel fundamental. Las representaciones gráficas obtenidas a partir de los cálculos topológicos, permiten comparar, mejorar y optimizar los cálculos numéricos basados en algoritmos computacionales que efectúan la simulación y posteriormente el cálculo de las propiedades en estudio asociadas al sistema. Así, por ejemplo, en la fase AF de la red NL se pueden calcular topológicamente los valores iniciales de la simulación. El número total de enlaces para cualquier arreglo $L \times M$ de la red NL es $12(L \times M)$ (12 enlaces contiene una estructura). Dado que la concentración de enlaces AF es $x = 0$, todas las plaquetas triangulares están frustradas (número impar de enlaces AF) y enlazadas con un segmento de frustración que contiene dos enlaces insatisfechos por estructura. Por lo tanto, $\sigma_g = (L \times M)$ y la longitud de frustración es $\Lambda_{Fg} = 2(L \times M)$. De esta forma el segmento promedio de frustración de acuerdo a la Ec. (7) es $\langle \lambda_g(0.0) \rangle = 2.00$, y la energía por enlaces de acuerdo a la Ec. (8) es $\langle \epsilon_g(0.0) \rangle = -2/3$. Para obtener el parámetro h_g basta contar el número de enlaces que nunca fueron frustrados en todas las alternativas posibles de conectar plaquetas triangulares. Se establece finalmente que sólo los enlaces que componen el hexágono están libres de frustración correspondientes a $6(L \times M)$, por lo tanto, $h_g(0.0) = 1/2$.

El programa computacional inicialmente lee una muestra de un archivo que contiene 500 muestras generadas al azar de un arreglo $L \times M$. Posteriormente, se escoge aleatoriamente un estado y se baja la energía *flipeando* todos los espines de la red, proceso que se realiza N^2 veces. Esto permite calcu-

lar las propiedades del nivel fundamental como una primera aproximación y se denomina “réplica”. Una segunda réplica se ejecuta duplicando el *flipeo* de espines. Aquí se consideran los parámetros obtenidos en la primera réplica y se comparan con los de la segunda y así se ejecutan varias réplicas hasta que no cambie la configuración del nivel fundamental. A continuación se procede a leer la siguiente muestra y finalmente se promedian los resultados de las 500 muestras del arreglo para cada una de las propiedades en estudio. Este método numérico permite determinar con una buena aproximación la frustración de la red, medida a través del segmento promedio de frustración y el parámetro h_g que mide la fracción de enlaces que siempre quedaron satisfechos y la energía del nivel fundamental. Se ha establecido para la red NL en el nivel fundamental y para el límite termodinámico [17] que en la fase $x = 0.5$, el segmento promedio de frustración se estabiliza en $\langle \lambda_g(0.5) \rangle = 1.21$, la fracción de enlaces satisfechos en $h_g(0.5) = 0.50$ y la energía promedio por enlace en $\langle \epsilon_g(0.5) \rangle = -0.70$. Estos resultados han sido obtenidos con equipos Pentium IV de 2.66 Mhz y se ha podido establecer que para tamaños 4×4 , el tiempo de proceso numérico supera el mes de cálculo.

1.3. Cálculo analítico

Se propone realizar estudios de frustración local para determinar las tres magnitudes físicas planteadas anteriormente a través de cálculos analíticos y comparar con los resultados topológicos y numéricos indicados en los Secs. 1.1 y 1.2. Para ello se considera una celda representativa, la de menor número de enlaces de la red NL mostrada en la Fig. 3, que contiene cuatro plaquetas (una hexagonal, dos cuadradas y una triangular) compuesta por trece enlaces, tal que cuatro de ellos convergen en un sitio de espín central. De acuerdo con esta celda, el desarrollo analítico está restringido a longitudes de frustración menores o iguales a dos, correspondiente a la unión de las plaquetas cuadradas. Considerando la combinatoria de los dos tipos de plaqueta (frustrada y no-frustrada) se obtienen un total de $4^2 = 16$ configuraciones. Un análisis de la simetría de las configuraciones anteriores permite determinar que sólo existen 12 de ellas independientes y están representadas en la Fig. 3. Las plaquetas frustradas se han indicado por \wp_{ch} , \wp_{cc} , \wp_{ct} si son hexagonales, cuadradas y triangulares, respectivamente. Las plaquetas sin etiquetar son no-frustradas o *planas*. Además, se ilustra para cada configuración en la parte superior, la simetría α_j y en la parte inferior, un trío de números $(\sigma_j, \lambda_{gj}, \hat{h}_{gj})$ que representa el análisis local de frustración. El segmento de frustración local se denota por σ_j , el segmento promedio de frustración local por λ_{gj} y finalmente la fracción local de enlaces no frustrados por \hat{h}_{gj} . Cada trío de números se ha calculado usando el siguiente criterio:

- A) si el número de plaquetas curvas es par, se conectan al interior de la celda por un segmento de frustración representado por una línea discontinua;

- B) si el número de plaquetas curvas es impar, una plaqueta se conecta externamente minimizando la energía; y
- C) la fracción de enlaces que nunca se frustraron se calcula por la razón entre los enlaces satisfechos (no-frustrados), considerando las distintas combinaciones de unir pares de plaquetas curvas de mínima energía y los cuatro enlaces centrales de la celda.

Las doce configuraciones anteriores pueden ser representadas por dos tipos de funciones de probabilidad. Una asociada a la distribución de plaquetas curvas y planas que se denomina $\phi_j(\wp_c, \wp_p)$ para cada elemento [10], donde \wp_p representa la distribución de probabilidades de obtener plaquetas planas, dada por $1 - \wp_c$, y otra, ligada a la combinatoria de enlaces F y AF de la celda para cada una de las 12 configuraciones, descrita por un polinomio dado por $\psi_j(x)$ [9]. Este trabajo desarrolla en paralelo ambas descripciones de probabilidad basado en las configuraciones de la Fig. 3. Por ejemplo, la configuración 5 está determinada por la probabilidad $\phi_5(\wp_c, \wp_p) = \wp_{ch}\wp_{cc}\wp_{pt}\wp_{pc}$, donde el primer subíndice

indica si la plaqueta es curva (c) o plana (p) y el segundo indica la geometría (h: hexagonal, c: cuadrada, t: triangular). Las distribuciones de probabilidad asociadas a plaquetas curvas y planas para cada geometría están descritas de una manera similar a la Ec. (6) y conocidas detalladamente [16]. Análogamente una descripción en términos de la función ligada a enlaces F y AF de la celda para el elemento 5 es

$$\begin{aligned} \psi_5(x) = & 0x^{13} + x^{12}y + 8x^{11}y^2 + 17x^{10}y^3 + 40x^9y^4 \\ & + 82x^8y^5 + 104x^7y^6 + 106x^6y^7 + 88x^5y^8 \\ & + 45x^4y^9 + 16x^3y^{10} + 5x^2y^{11} + 0xy^{12} + 0y^{13} \end{aligned} \quad (9)$$

donde $y = 1 - x$ corresponde a la concentración de enlaces AF.

De este modo, el segmento promedio de frustración expresado en términos de las distintas configuraciones de la Fig. 3 con base en el análisis local de frustración está dado por

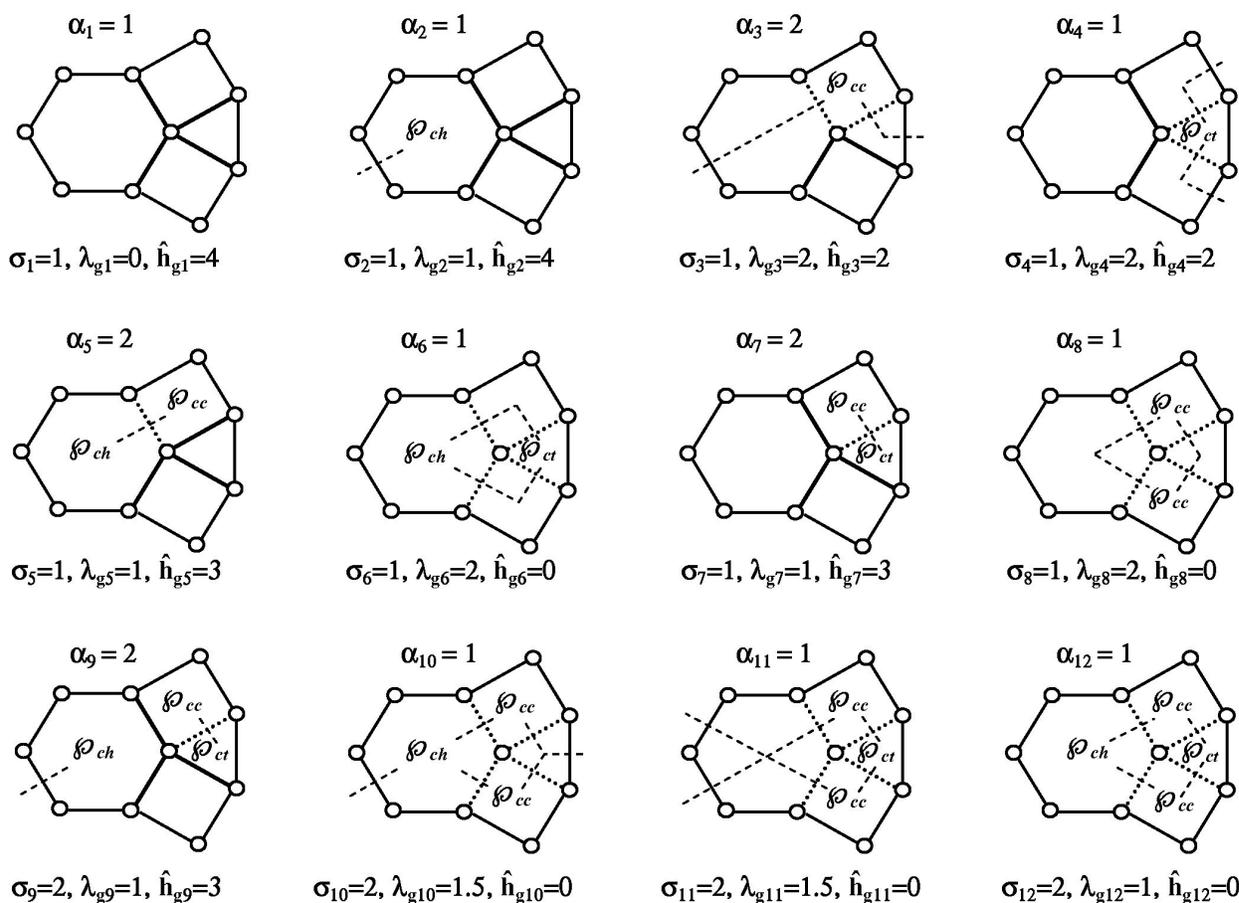


FIGURA 3. Las 12 configuraciones que representan el análisis local de frustración para la red (3,4,6,4) mediante combinatoria de plaquetas curvas. Las líneas más gruesas representan los enlaces centrales de la celda, las líneas punteadas ilustran enlaces insatisfechos centrales y las líneas segmentadas representan segmentos de frustración local.

$$\langle \lambda_g(x) \rangle = \frac{\sum_{j=1}^{\eta} \alpha_j \sigma_j \xi_j \lambda_{gj}}{\sum_{j=1}^{\eta} \alpha_j \sigma_j \xi_j}, \quad (10)$$

donde η es el número de configuraciones (12 en este caso) y la función ξ_j adopta cualquiera de las dos descripciones de funciones de probabilidad $\phi_j(\wp_c, \wp_p)$ ó $\psi_j(x)$ caracterizadas anteriormente. Del mismo modo, la fracción de enlaces no frustrados de la red diluida es

$$h_g(x) = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^{\eta} \alpha_j \xi_j \hat{h}_{gj}. \quad (11)$$

Finalmente, la energía promedio por enlace queda expresada por la Ec. (8) donde $\wp_c(x)$ está dada por la Ec. (6) y $\langle \lambda_g(x) \rangle$ se obtiene a partir de la Ec. (10) para cada descripción asociada a ξ_j .

2. Resultados

A continuación se exponen los resultados del análisis local de frustración para la red NL en ambas descripciones $\phi_j(\wp_c, \wp_p)$ y $\psi_j(x)$, obtenidas a partir de las Tablas I y II. En ellas, se incorporan los distintos coeficientes y funciones de probabilidad para cada configuración. Las propiedades del nivel fundamental asociadas al segmento promedio de frustración, la fracción de enlaces no frustrados y la energía promedio por enlace, para esta red, están resumidos en una gráfica que permite establecer comparaciones entre ambos métodos analíticos y sus respectivas simulaciones numéricas en función de la concentración de enlaces F para un tamaño N dado ($N = 54$).

TABLE I. Coeficientes que contiene el análisis local de frustración para la descripción $\phi_j(\wp_c, \wp_p)$ de las 12 configuraciones de la celda NL dadas en la Fig. 3.

ϕ_j	$\phi(\wp_c, \wp_p)$	$\alpha_j \sigma_j \lambda_{gj}$	$\alpha_j \sigma_j$	$\alpha_j \hat{h}_{gj}$
ϕ_1	$\wp_{ph} \wp_{pc}^2 \wp_{pt}$	0	1	4
ϕ_2	$\wp_{ch} \wp_{pc}^2 \wp_{pt}$	1	1	4
ϕ_3	$\wp_{ph} \wp_{cc} \wp_{pt} \wp_{pc}$	4	2	4
ϕ_4	$\wp_{ph} \wp_{pc}^2 \wp_{ct}$	2	1	2
ϕ_5	$\wp_{ch} \wp_{cc} \wp_{pt} \wp_{pc}$	2	2	6
ϕ_6	$\wp_{ch} \wp_{pc}^2 \wp_{ct}$	2	1	0
ϕ_7	$\wp_{ph} \wp_{cc} \wp_{ct} \wp_{pc}$	2	2	6
ϕ_8	$\wp_{ph} \wp_{cc}^2 \wp_{pt}$	2	1	0
ϕ_9	$\wp_{ch} \wp_{cc} \wp_{ct} \wp_{pc}$	4	4	6
ϕ_{10}	$\wp_{ch} \wp_{cc}^2 \wp_{pt}$	3	2	0
ϕ_{11}	$\wp_{ph} \wp_{cc}^2 \wp_{ct}$	3	2	0
ϕ_{12}	$\wp_{ch} \wp_{cc}^2 \wp_{ct}$	2	2	0

La Tabla I contiene 5 columnas que resumen la frustración local descrita en la Fig. 3. Para cada configuración de ella, la primera columna indica la función ϕ_j , la segunda columna muestra la distribución probabilística en términos de plaquetas frustradas y no frustradas. La tercera columna indica el producto de los coeficientes asociados a la longitud de frustración local, la cuarta columna muestra el producto de los coeficientes asociados al segmento de frustración local y, finalmente, la quinta columna señala el producto de los coeficientes responsables de la fracción de enlaces no frustrados localmente. Para obtener cada número de la Tabla I se han usado rigurosamente los criterios establecidos anteriormente (A, B y C). Por ejemplo, para la configuración 6 que contiene dos plaquetas frustradas, admite un segmento de frustración que contiene dos enlaces insatisfechos, lo cual implica $\sigma_6 = 1$ y $\lambda_{g6} = 2/1 = 2$. Para obtener \hat{h}_{g6} se deben considerar las posibilidades de conexión de pares de plaquetas curvas con mínima energía, de modo que en este caso los enlaces centrales siempre quedan insatisfechos, por ello $\hat{h}_{g6} = 0/4 = 0$.

El segmento promedio de frustración se obtiene a partir de la Ec. (10) donde en el caso de la descripción $\xi_j = \phi_j$ utilizando las distribuciones probabilísticas y la información proporcionada por la tercera y cuarta columna de la Tabla I se tiene

$$\begin{aligned} \Lambda_{Fg}(x) = & \wp_{ch} \wp_{pc}^2 \wp_{pt} + 4\wp_{ph} \wp_{cc} \wp_{pt} \wp_{pc} + 2\wp_{ph} \wp_{pc}^2 \wp_{ct} \\ & + 2\wp_{ch} \wp_{cc} \wp_{pt} \wp_{pc} + 2\wp_{ch} \wp_{pc}^2 \wp_{ct} + 2\wp_{ph} \wp_{cc} \wp_{ct} \wp_{pc} \\ & + 2\wp_{ph} \wp_{cc}^2 \wp_{pt} + 4\wp_{ch} \wp_{cc} \wp_{ct} \wp_{pc} + 3\wp_{ch} \wp_{cc}^2 \wp_{pt} \\ & + 3\wp_{ph} \wp_{cc}^2 \wp_{ct} + 2\wp_{ch} \wp_{cc}^2 \wp_{ct} \end{aligned} \quad (12)$$

y

$$\begin{aligned} \sigma_g(x) = & \wp_{ph} \wp_{pc}^2 \wp_{pt} + \wp_{ch} \wp_{pc}^2 \wp_{pt} + 2\wp_{ph} \wp_{cc} \wp_{pt} \wp_{pc} \\ & + \wp_{ph} \wp_{pc}^2 \wp_{ct} + 2\wp_{ch} \wp_{cc} \wp_{pt} \wp_{pc} + \wp_{ch} \wp_{pc}^2 \wp_{ct} \\ & + 2\wp_{ph} \wp_{cc} \wp_{ct} \wp_{pc} + \wp_{ph} \wp_{cc}^2 \wp_{pt} + 4\wp_{ch} \wp_{cc} \wp_{ct} \wp_{pc} \\ & + 2\wp_{ch} \wp_{cc}^2 \wp_{pt} + 2\wp_{ph} \wp_{cc}^2 \wp_{ct} + 2\wp_{ch} \wp_{cc}^2 \wp_{ct}, \end{aligned} \quad (13)$$

de modo que

$$\langle \lambda_g(x) \rangle = \frac{\Lambda_{Fg}(x)}{\sigma_g(x)}. \quad (14)$$

La fracción de enlaces no frustrados se obtiene a partir de la Ec. (11) donde en el caso de la descripción $\xi_j = \phi_j$ usando las distribuciones probabilísticas y la información proporcionada por la quinta columna de la Tabla I se tiene

$$\begin{aligned} h_g(x) = & \frac{1}{4} (4\wp_{ph} \wp_{pc}^2 \wp_{pt} + 4\wp_{ch} \wp_{pc}^2 \wp_{pt} + 4\wp_{ph} \wp_{cc} \wp_{pt} \wp_{pc} \\ & + 2\wp_{ph} \wp_{pc}^2 \wp_{ct} + 6\wp_{ch} \wp_{cc} \wp_{pt} \wp_{pc} + 6\wp_{ph} \wp_{cc} \wp_{ct} \wp_{pc} \\ & + 6\wp_{ch} \wp_{cc} \wp_{ct} \wp_{pc}). \end{aligned} \quad (15)$$

La energía promedio por enlace se obtiene al reemplazar los valores del segmento promedio de frustración dado por la

Ec. (12) en la Ec. (8). De este modo, para esta descripción las tres propiedades del nivel fundamental en estudio, que está basada en plaquetas planas y curvas, las cuales son a su vez funciones de la concentración de enlaces F [16], permite representaciones de funciones polinomiales de grado 17, las cuales se muestran en la Fig. 4.

La Tabla II presenta la descripción $\xi_j = \psi_j(x)$ descrita mediante polinomios de grado 13 correspondiente al número de enlaces de la celda. Las funciones polinomiales $\psi_j(x)$ para cada configuración están dadas por

$$\psi_j(x) = \sum_{i=0}^{i=13} C_{ij} x^{13-i} y^i, \quad j = 1, 2, \dots, 12. \quad (16)$$

El cálculo de los coeficientes C_{ij} se obtuvo numéricamente mediante algoritmos computacionales para cada configuración en términos de los enlaces F y AF dada en la Fig. 3. Se puede observar en la Tabla II que la suma de los coeficientes para cada configuración resulta ser 512, número que se relaciona con los enlaces b y plaquetas p contenidos en la celda, correspondiente a la combinatoria $2^{(b-p)}$ ($b = 13$ y $p = 4$) [9].

Utilizando los resultados numéricos dados en las columnas 3, 4 y 5 de la Tabla I y las funciones polinomiales ψ_j proporcionados por la Tabla II es posible determinar a partir de las Ecs. (8), (10) y (11) para $\xi_j = \psi_j(x)$, la energía promedio por enlace, el segmento promedio de frustración y la fracción de enlaces no frustrados para esta descripción. De este modo

$$\Lambda_{Fg}(x) = \psi_2 + 4\psi_3 + 2\psi_4 + 2\psi_5 + 2\psi_6 + 2\psi_7 + 2\psi_8 + 4\psi_9 + 3\psi_{10} + 3\psi_{11} + 2\psi_{12}, \quad (17)$$

$$\sigma_g(x) = \psi_1 + \psi_2 + 2\psi_3 + \psi_4 + 2\psi_5 + \psi_6 + 2\psi_7 + \psi_8 + 4\psi_9 + 2\psi_{10} + 2\psi_{11} + 2\psi_{12}. \quad (18)$$

De tal manera que el segmento promedio de frustración queda dado directamente al reemplazar las expresiones anteriores en la Ec. (14).

Por otra parte, la fracción de enlaces no frustrados es

$$h_g(x) = \frac{1}{4}(4\psi_1 + 4\psi_2 + 4\psi_3 + 2\psi_4 + 6\psi_5 + 6\psi_7 + 6\psi_9). \quad (19)$$

Del mismo modo, la energía promedio por enlace se obtiene directamente al reemplazar el segmento promedio de frustración en la Ec. (8). Cada una de las propiedades del nivel fundamental estudiadas para esta descripción son ilustrados en la Fig. 4 como función de la concentración de enlaces F . En esta figura los símbolos sólidos: cuadrados, triangulares y circulares representan simulaciones numéricas asociadas a las propiedades del nivel fundamental, segmento promedio de frustración, fracción de enlaces no frustrados y energía promedio por enlace respectivamente para un arreglo 3×3 de la red NL. Cada símbolo corresponde al promedio de 500 muestras aleatorias a la concentración x dada, por lo tanto contiene un análisis del orden de 10000 muestras para este arreglo. Las fluctuaciones en la fracción de enlaces no frustrados se deben a lo pequeño del tamaño del arreglo (54 espines), situación que no se observa en los otros parámetros en estudio. El segmento promedio de frustración muestra un cambio brusco entre $x = 0.85$ y $x = 0.90$ que indicaría una transición desorden-orden para el sistema. La energía del nivel fundamental es una curva plana y muestra la tendencia al orden después de $x = 0.85$, lo cual significa que se pierde completamente la frustración. La línea continua gruesa corresponde a la descripción en términos de ϕ , en tanto, la línea continua delgada corresponde a la descripción ψ , que constituyen los resultados analíticos. En términos globales son similares en toda la fase, coincidiendo para $x = 0.5$. En particular, en esta fase el resultado para el segmento promedio de frustración es de 1.28, la fracción de enlaces no frustrados

TABLE II. Se ilustran los distintos coeficientes polinomiales de la función ψ_j para cada una de las 12 configuraciones de la celda NL.

ψ_j	x^{13}	$x^{12}y$	$x^{11}y^2$	$x^{10}y^3$	x^9y^4	x^8y^5	x^7y^6	x^6y^7	x^5y^8	x^4y^9	x^3y^{10}	x^2y^{11}	xy^{12}	y^{13}
ψ_1	1	0	8	20	31	80	120	104	79	48	16	4	1	0
ψ_2	0	4	4	14	48	72	104	124	80	36	20	6	0	0
ψ_3	0	2	5	18	45	76	106	108	82	50	17	2	1	0
ψ_4	0	1	4	16	48	79	104	120	80	31	20	8	0	1
ψ_5	0	1	8	17	40	82	104	106	88	45	16	5	0	0
ψ_6	0	0	6	20	36	80	124	104	72	48	14	4	4	0
ψ_7	0	1	2	17	50	82	108	106	76	45	18	5	2	0
ψ_8	0	0	6	20	48	80	92	104	96	48	14	4	0	0
ψ_9	0	0	5	16	45	88	106	104	82	40	17	8	1	0
ψ_{10}	0	0	4	26	48	64	104	116	80	48	20	2	0	0
ψ_{11}	0	0	4	14	48	96	104	92	80	48	20	6	0	0
ψ_{12}	0	0	2	20	48	80	116	104	64	48	26	4	0	0

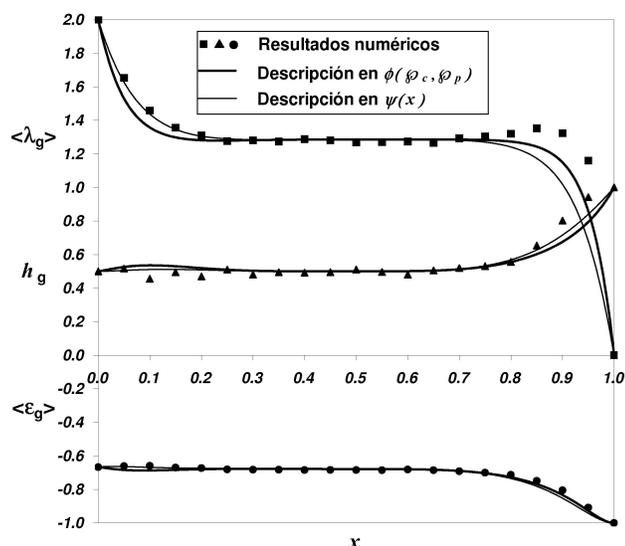


FIGURA 4. Los parámetros $\langle \lambda_g \rangle$, h_g y $\langle \epsilon_g \rangle$ asociados al nivel fundamental que miden el segmento promedio de frustración, fracción de enlaces no frustrados y la energía promedio por enlace de la red NL en función de la concentración de enlaces ferromagnéticos x . Los símbolos corresponden a simulaciones numéricas y las líneas continuas a las descripciones analíticas que describen este comportamiento a través de las funciones ϕ y ψ .

es 0.50 y la energía promedio por enlace es -0.68. Estos valores están dentro del rango informado en la literatura para cálculos numéricos desarrollados sobre esta red [17]. Un análisis más fino permite determinar que las mayores diferencias entre las descripciones están en las fases F y AF y en el segmento promedio de frustración, en las otras propiedades las curvas son muy similares. Comparando ahora los resultados analíticos y los resultados numéricos, se observa un mejor ajuste en ψ en la fase AF para las tres propiedades estudiadas; en cambio, en la fase F, la descripción ϕ presenta una mejor ajuste respecto del segmento promedio de frustración y de la energía promedio por enlace, no siendo así para la fracción de enlaces no frustrados. La red NL como se dijo anteriormente tiene un número de coordinación 4 igual que las redes arquimedianas cuadrada (SL) y de Kagomé (KL). Comparando los resultados de las propiedades desarrolladas aquí del nivel fundamental en $x = 0.5$ de estas redes y usando la Tabla II de la Ref. 12, se puede concluir que los valores de la fracción de enlaces no frustrados y de la energía promedio por enlace son similares. Respecto del segmento promedio de frustración, el valor de la red NL está entre los valores de la red SL y KL, lo cual lo hace un parámetro más

sensible que las otras dos propiedades. Un análisis en $x = 0$ entre estas redes permite determinar que el segmento promedio de frustración tiene el mismo valor para la red NL y KL; sin embargo, la fracción de enlaces no frustrados y la energía promedio por enlace no poseen el mismo valor.

3. Conclusiones

Se establece que la metodología usada en ambas descripciones analíticas basada en el análisis de frustración local sobre la celda representativa limitada a segmentos de frustración de longitud máxima 2, permite describir el comportamiento de las propiedades del nivel fundamental de la red NL. La Fig. 4 ilustra un ajuste para la energía promedio por enlace usando ambas descripciones en toda la fase. Los parámetros relacionados con frustración presentan corrimientos especialmente en las fases F y AF, que pueden justificarse debido al truncamiento en la longitud del segmento de frustración. Eventualmente si se considera una celda mayor, esto es, polinomios de grado mayor, esta conducta tiende a desaparecer. Dado que la descripción en ϕ es más simple de desarrollar que la descripción en ψ , una extensión del presente trabajo es aplicar esta metodología a otras redes arquimedianas considerando celdas de tamaño mayor. El estudio antes descrito, en la fase AF ($x = 0$), permite concluir que la red NL presenta un comportamiento semi frustrado, en comparación con la red KL que presenta un comportamiento totalmente frustrado. Así, para la red NL $\lambda_g(0) = 2$ y $h_g(0) = 0.5$, en tanto para la red KL $\lambda_g(0) = 2$ y $h_g(0) = 0.0$ [9]. En la fase vidrio de espín para la red NL, la energía del nivel fundamental prácticamente no cambia en comparación con la fase AF, en cuyo caso las interacciones mixtas no son determinantes para incorporar nueva frustración al sistema.

Como una proyección del presente trabajo se pueden efectuar estudios de percolación de enlaces correlacionados sobre la red NL diluida, dado su comportamiento mostrado en las fases AF y vidrio de espín, donde h_g es prácticamente igual a 0.5, lo cual asegura la existencia de trayectorias de percolación en la red.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad de la Frontera a través del proyecto DIDUFRO DI 07-0060 por el apoyo parcial en el desarrollo de este trabajo.

1. B. Grünbaum y G.C. Shephard, *Tilings and Patterns*, (W.H. Freeman and Company, New York, 1987).
2. E.E. Vogel, J. Cartes, S. Contreras, W. Lebrecht y J. Villegas, *Phys. Rev. B* **49** (1994) 6018.
3. J.F. Valdés, J. Cartes, E.E. Vogel, S. Kobe y T. Klotz, *Physica*

A **257** (1998) 557.

4. E.E. Vogel, S. Contreras, M.A. Osorio, A.J. Ramirez-Pastor y F. Nieto, *Physica A* **266** (1999) 425.
5. A. J. Ramirez-Pastor, F. Romá, F. Nieto y E.E. Vogel, *Physica A* **336** (2004) 454.

6. S.F. Edwards y P.W. Anderson, *J. Phys. F* **5** (1975) 965.
7. M. Mezard, G. Parisi y M.A. Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond*, (World Scientific Publishing, Singapore, 1987).
8. J.W. Landry y S.N. Coppersmith, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 134404.
9. W. Lebrecht, J.F. Valdés y E.E. Vogel, *Physica A* **323** (2003) 466.
10. E.E. Vogel y W. Lebrecht, *Z. Phys. B* **102** (1997) 145.
11. E.E. Vogel, F. Valdés y W. Lebrecht, *Physica A* **371** (2006) 150.
12. J.F. Valdés, W. Lebrecht y E.E. Vogel, *Physica A* **385** (2007) 551.
13. B.D. Gaulin, *Nature Materials* **4** (2005) 269.
14. H. Karunadasa *et al.*, *Phys. Rev. B* **71** (2005) 144414.
15. G. Toulouse, *Commun. Phys.* **2** (1977) 115.
16. W. Lebrecht, E.E. Vogel, J. Cartes y J.F. Valdés, *Physica A* **342** (2004) 90.
17. W. Lebrecht, E.E. Vogel y J.F. Valdés, *Journal of Alloys and Compounds* **369** (2004) 66.
18. R. Liebmann y H.G. Schuster, *J. Phys. C. Solid State Phys.* **14** (1981) 709.
19. W. Lebrecht, C. Fuentes y E.E. Vogel, *Rev. Mex. Fís.* **44** s1 (1998) 85.
20. F. Romá, F. Nieto, A.J. Ramirez-Pastor y E.E. Vogel, *Physica A* **348** (2005) 216.
21. F. Romá, F. Nieto, A.J. Ramirez-Pastor y E.E. Vogel, *Physica A* **363** (2006) 327.