## **Informe Ising 2D Computacional**

Depaoli, Eliana; Di Paolo, Adrián; Pereyra Gualda, Lorena

### 1. Introducción

Ciertos metales como Fe, Co y Ni y aleaciones metálicas como  $Cu_2MnAl$  y  $Cu_2MnSn$  exhiben propiedades ferromagnéticas debajo de una temperatura de transición  $T_C$  denominada temperatura de Curie. Si un material de este tipo es enfriado en presencia de un campo magnético externo  $\vec{B}$  a temperaturas inferiores a  $T_c$ , se magnetiza. Si a continuación se remueve el campo externo, sobrevive en el material una magnetización remanente que depende fuertemente de  $\vec{B}$  (y del tratamiento térmico y mecánico previo del material). Si el mismo material es en cambio sometido a un campo magnético externo a una temperatura  $T > T_C$  adquiere una magnetización que no perdura al remover  $\vec{B}$  (comportamiento paramagnético).

De acuerdo a P.A.Weiss, las características ferromagnéticas se deben al hecho de que incluso en muestras no magnetizadas los dipolos atómicos no están estadísticamente distribuidos, sino que se encuentran alineados entre sí, correlacionados de este modo en áreas del orden de decenas de milímetros de longitud. Así, estas áreas tienen un momento dipolar magnético permanente espontáneo. El alineamiento espontáneo de los dipolos atómicos se debe a la interacción de intercambio de los electrones.

El modelo más simple para abordar el estudio de este tipo de sistemas es el modelo de Ising. En este modelo se representa al sistema como una red ordenada de spines fijos en el espacio, cada uno de los cuales interactúa con q vecinos y que pueden orientarse únicamente en una dirección. El hamiltoniano que describe este arreglo es

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - B \sum_i S_i^z \tag{1}$$

Donde B es el campo magnético externo,  $S_i^z$  es la componente z del spin i, que puede tener los valores +1 o -1, y J es la energía de interacción por par de spin. La notación "<i,j>" en la sumatoria indica que deben sumarse los pares de vecinos más próximos.

La ecuación (1) en dos dimensiones y con B=0 puede ser resuelta exactamente (solución de Onsager) o mediante una aproximación de campo medio.

En este trabajo, estudiamos la magnetización espontánea de una red 2D, por lo que consideramos B=0. El hamiltoniano de este modelo es entonces

$$H = -J\sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_i^z \tag{2}$$

Abordamos el estudio mediante un método computacional usando el algoritmo de Metrópolis-Monte Carlo para estudiar el comportamiento de una red caracterizada por q=4 y comparamos los resultados con los que provienen de aplicar la aproximación de campo medio a dicha red.

Se estudian los siguientes observables del sistema en función de la temperatura: la magnetización por sitio, <m>, la energía por sitio, <e>, y sus respectivas fluctuaciones  $\sigma_m$  y  $\sigma_\varepsilon$ .

Se denomina función de correlación a

$$C(r) = \langle m(x)m(x+r) \rangle \tag{3}$$

donde el valor medio se calcula sobre el ensamble y r es la distancia entre espines de la red. Esta función mide la 'persistencia de memoria' ante variaciones espaciales en la magnetización media por espín.

Se demuestra que

$$C(r) \sim e^{-r/\xi} \tag{4}$$

 $\xi$  se denomina longitud de correlación y es una medida de la memoria espacial. Se la puede interpretar como el tamaño medio de los dominios magnéticos.

En este trabajo se calcula la función de correlación para distintos valores de temperatura alrededor de  $T_{\text{C}}$  y se determina en cada caso la longitud de correlación.

## 2. Procedimiento

Se implementó un algoritmo basado en Metrópolis - Monte Carlo, cuya codificación se realizó en Matlab. En el Apéndice se muestran los códigos generados.

El algoritmo realiza los siguientes pasos para cada valor fijo de temperatura T:

- **1.** Genera una red bidimensional de 32 x 32 spines orientados para arriba (+1) o para abajo (-1) de forma aleatoria.
- 2. Elige un sitio al azar e invierte el spin. Luego calcula la energía de la nueva configuración utilizando la ecuación (2) con J=1.
- **3.** Se computa la diferencia de energías entre las configuraciones previa y posterior al cambio de spin y calcula el mínimo entre 1 y  $e^{-\beta \Delta E}$ .
- **4.** Si min  $\{1, e^{-\beta \Delta E}\}$  > r (r es un número entre 0 y 1 generado al azar) , entonces se acepta la nueva configuración, caso contrario se rechaza.
- **5.** Termalización: se repiten los pasos 2 a 4, tantos ciclos como se considere necesarios para lograr una distribución compatible con T.
- **6.** Muestreo: Tomando como estado inicial el último obtenido en **5.**, se repiten los pasos 2 a 4. Para cada configuración aceptada se calcula la energía y magnetización del sistema.
- **7.** Se calculan los valores medios de la energía y de la magnetización sobre todas las configuraciones obtenidas en el paso 6.

Para el paso 3,

$$\beta = \frac{1}{kT} \tag{3}$$

Se ha establecido el valor k=1 para la constante de Boltzmann.

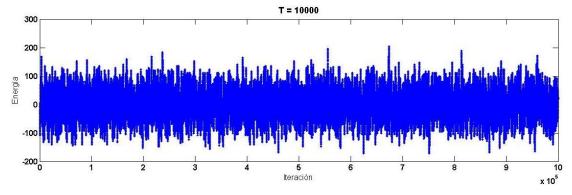
El paso **5.** coloca el arreglo de spines en alguna configuración con alta probabilidad, determinada por la temperatura. El paso **6.** utiliza el mismo método (cadenas de Markov) que el paso **5.**, para generar un muestreo del estado de equilibrio. Toma como estado inicial la última configuración obtenida en el paso **5.**, realiza cambios al sistema y se queda con aquellos más probables, compatibles con la temperatura. Calcula la energía y magnetización de cada nueva configuración aceptada. Cuando finaliza se obtiene un conjunto de configuraciones, al que denominamos ensamble. Sobre este ensamble se calculan los valores medios de la energía y de la magnetización, y también los respectivos desvíos estándar.

El código 'Ising.m' calcula la magnetización por sitio, la energía por sitio, y sus respectivas fluctuaciones para cada valor fijo de beta, utilizando un muestreo de  $5 \times 10^4$  copias de la red, estas últimas generadas por el mismo algoritmo que

produce la termalización. Varía beta en el rango 0.0001 a 3 K<sup>-1</sup> y grafica las magnitudes mencionadas en función de beta. Se implementó el código con dos alternativas: en la primera, el estado inicial se genera al azar por única vez para el primer ciclo de termalización. Los sucesivos cambios de temperatura utilizan como estado inicial para la termalización la última configuración de la red obtenida al finalizar el ciclo de muestreo anterior. En la segunda, para cada nuevo valor de beta el ciclo de termalización se inicia sobre un estado generado al azar.

El código 'calculacorrelacion.m' calcula y grafica C(r), la correlación entre elementos de la red en función de la distancia entre los mismos. El cálculo se realiza sobre la última copia del ensamble que se obtiene luego de termalizar y muestrear la red. Además, mientras se ejecuta el ciclo de muestreo, genera una imagen de la red que se actualiza con las sucesivas iteraciones. Se exhiben imágenes obtenidas para distintos estados de magnetización espontánea del sistema, a distintas temperaturas.

El código 'calculacorrelacion.m' también genera un gráfico de la energía media por sitio en función del número de iteración. Se utilizaron estos gráficos para analizar cuántas iteraciones son necesarias en el ciclo de termalización para T < Tc,  $T \sim Tc$  y T > Tc. Se evaluó a T = 1e4, T = 1, T = 1.11 y T = 2, 27. En las figuras 1 a 3 pueden observarse los resultados para  $10^6$  iteraciones en cada caso.



**Figura 1.**  $\beta$  = 0.00001.

Debido a que la temperatura es elevada, el número de configuraciones compatibles también es elevado, por lo que la energía exhibe grandes fluctuaciones alrededor de un valor medio que parece lograr inmediatamente. El estado inicial, totalmente desordenado, es compatible con temperatura del sistema.

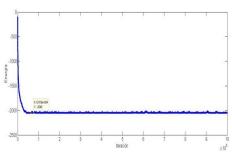
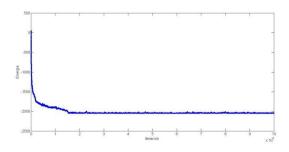


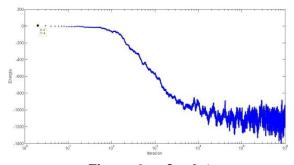
Figura 2 a.  $\beta$  = 1

A una temperatura menor a la de transición el número de microestados compatibles se reduce por lo que el sistema exhibe pocas fluctuaciones. La red se encuentra en equilibrio luego de ~ 2x10<sup>4</sup> iteraciones.



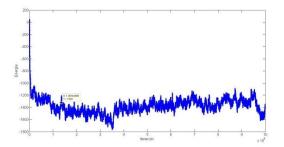
**Figura 2 b.**  $\beta$  = 0.9

La red se encuentra en equilibrio luego de ~ 2x10<sup>4</sup> iteraciones.



**Figura 3 a.**  $\beta$  = 0.4

Temperatura muy cercana a la crítica. El sistema alcanza el equilibrio luego de aproximadamente 10<sup>5</sup> iteraciones. Presenta grandes fluctuaciones debido a la transición cercana.



**Figura 3 b.**  $\beta$  = 0.44

Temperatura aproximadamente igual a la de transición. La energía del sistema parece decaer hacia una valor de equilibrio, pero presenta grandes fluctuaciones.

Se implementó el algoritmo 'Ising.m' utilizando  $5 x 10^5$  pasos en el ciclo de termalización y  $5 x 10^4$  iteraciones en el ciclo de muestreo.

Finalmente, se utilizaron sucesivas corridas del código "calculacorrelacion2.m" para graficar C(r) a distintos valores de temperatura, en el entorno de  $T_C$ . De cada uno de los gráficos generados se obtuvo la longitud de correlación como la distancia entre espines para la cual el valor de la función C(r) decayó a 1/e de su valor correspondiente a r=0. Se exhiben los resultados en un gráfico de  $\xi$  vs T.

## 3. Resultados

En las figuras 4 y 5 se muestran los gráficos del valor medio de la magnetización por sitio y de la energía por sitio en función de  $\beta$ . A sí mismo se adjunta el desvío estándar de cada una de dichas magnitudes. El correspondiente a la energía media es proporcional al calor específico de la red.

En ambas figuras se observa la existencia de un valor  $\beta_c$ . Para valores menores a  $\beta_c$  la magnetización media por sitio es nula, para valores mayores a  $\beta_c$  surge una magnetización <m> $\neq$ 0. Se produce una transición de fase de un estado paramagnético a un estado ferromagnético.

También se observa que para valores próximos a un cierto  $\beta_c$  existe una discontinuidad en  $\sigma_E$  y  $\sigma_M$ . Esto indica nuevamente la existencia de una transición de fase. El punto de la transición en la curva de la dispersión de la energía se da para  $\beta \approx 0.42$ , que corresponde a una  $T_c \approx 2.38$ .

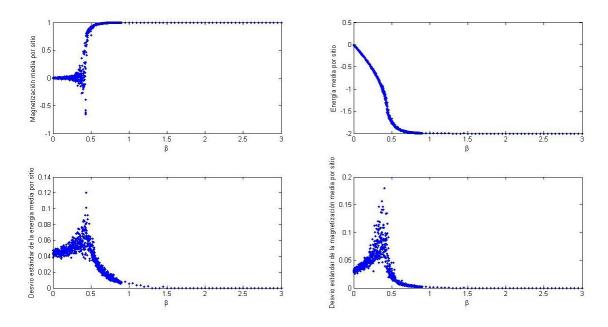


Figura 4. Gráficos obtenidos con 'Ising.m'.
El estado inicial al azar se genera una vez, antes del primer ciclo de termalización.
Debido a ello se observa uno solo de los valores posibles de la magnetización espontánea.

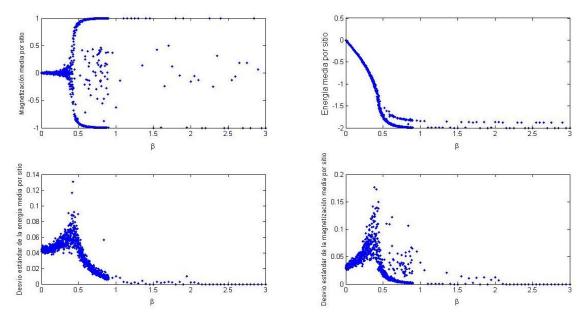


Figura 5. Gráficos obtenidos con 'Ising.m'.

El estado inicial al azar se genera antes de iniciar cada ciclo de termalización. Debido a ello, luego de atravesada la Tc, es posible obtener cualquiera de los dos valores posibles de la magnetización espontánea.

Los gráficos obtenidos exhiben mucha dispersión. Creemos que se podrían mejorar incrementando el número de iteraciones en el ciclo de muestreo, es decir aumentando el tamaño del ensamble sobre el que se calculan los valores medios. Para implementar esto sería conveniente utilizar otro lenguaje, pues Matlab emplea aproximadamente 24hs para correr el código actual.

Para comprender la transición de fase que se produce en el sistema, es conveniente analizar el cambio del parámetro de orden M a partir de la temperatura crítica. Se propone la siguiente relación de potencias entre M y  $T_C$  para  $T < T_C$ :

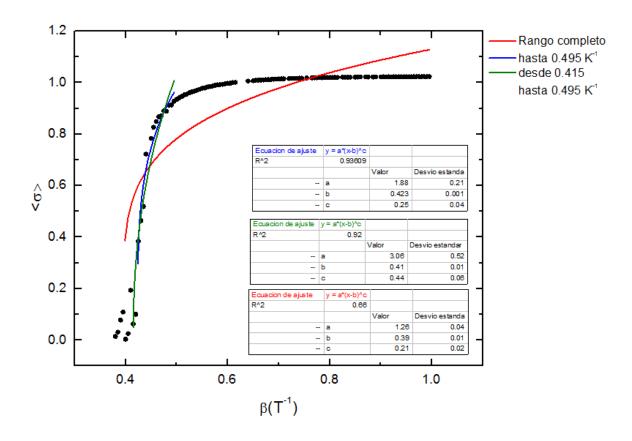
$$M \sim (T - T_c)^{\beta} \tag{3}$$

El exponente β se denomina exponente crítico.

La aproximación de campo medio da como resultado  $\beta = \frac{1}{2}$  y  $T_C = 4$  para la red cuadrada bajo estudio.

El resultado exacto de Onsager para esta red es  $\beta = \frac{1}{8}$  y T<sub>C</sub> = 2.269

Sobre los resultados de la simulación, se realizó un ajuste con la ecuación (3) en la región  $T < T_C$ .



**Figura 6.** Ajuste de la magnetización media por sitio en el entorno de la temperatura crítica.

En la figura 6, se muestran tres ajustes de la curva M vs β. La curva en azul, realizada en una región próxima al cambio de fase, es la que mejor aproxima a los valores 'experimentales'. Para este ajuste

$$\beta = 0.25$$
 y  $T_C = 2.364 \text{ K}$ 

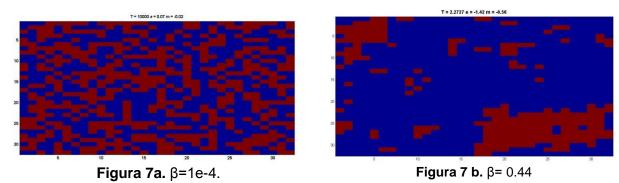
La temperatura crítica que se obtiene mediante la simulación es próxima a la que da como resultado la solución de Onsager. El exponente crítico obtenido mediante simulación aproxima mejor a esta solución que el valor  $\beta$ =1/2 predicho por la aproximación de campo medio.

Los ajustes realizados muestran que son 'buenos' solo en un rango muy estrecho alrededor de la temperatura crítica. Si el rango se extiende, el ajuste empeora.

Esto se debe a que la aproximación de campo medio deja de ser válida y debería evaluarse a partir de la solución exacta.

En principio esto no es un problema ya que lo que se espera con la aproximación es conocer el comportamiento de las variables termodinámicas cerca de la transición de fase y no exactamente la temperatura crítica.

La figura 7a muestra una configuración de la red de spines a una temperatura mucho mayor a la crítica. Debido a la agitación térmica ambos valores posibles del momento dipolar atómico se presentan con igual probabilidad por lo que el sistema no exhibe magnetización neta. En la figura 7b se muestra a la red a una temperatura muy próxima a la de transición de fase. Se observa la aparición de dominios, regiones extensas en las que todos los spines se alinean en alguna de las dos direcciones posibles.



Las regiones en color rojo corresponden a dominios con s=1. Las regiones en color azul corresponden a dominios con s=-1.

La función correlación, calculada para  $\beta$ =1e-4 y  $\beta$ = 0.44, se exhibe en las figuras 8a. y 8b. respectivamente. En estos gráficos se puede ver lo que se ha comentado previamente: a temperatura mucho mayor a la crítica la correlación entre spines es nula. En la transición de fase la función de correlación es cercana a uno entre los primeros vecinos y decae con la distancia entre estos. Es decir que en la transición de fase surge un alineamiento colectivo entre spines vecinos. La distancia en la que este comportamiento colectivo se presenta no abarca toda la red sino que se limita a una región de algunas pocas unidades de red (dominios).

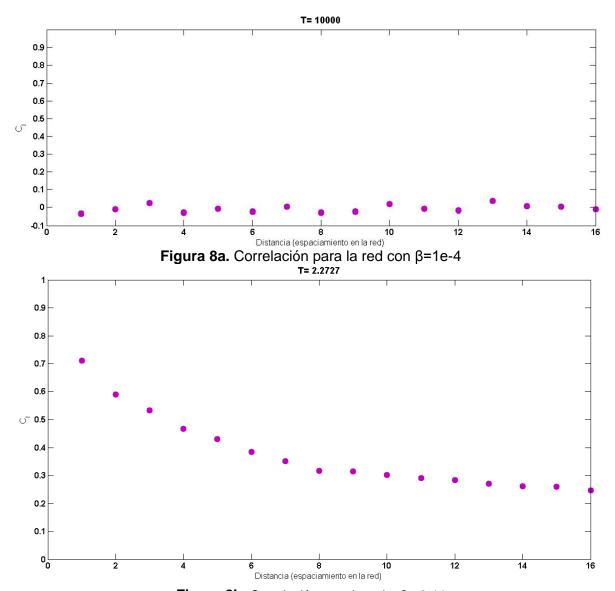
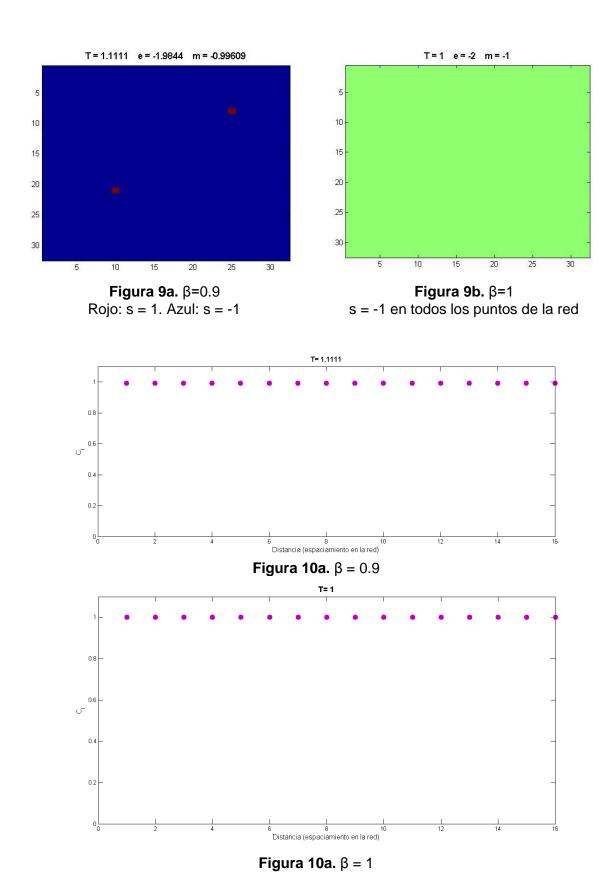


Figura 8b. Correlación para la red a β= 0.44

En las figuras 9a. y 9b. se puede ver la red a temperaturas menores a la crítica. En el primer caso el valor s=-1 es dominante, pero la agitación aún permite la aparición ocasional de la otra alternativa. En el segundo caso, con una temperatura menor, todos los spines tienen la misma orientación s=-1.

La función correlación para estas configuraciones se muestra en las figuras 10a. y 10b. respectivamente. En ambos casos la función es uno para toda distancia entre spines. Esto es consecuencia de que en estas configuraciones todos los spines se encuentran alineados en la misma dirección y sentido, en organicidad completa.



En la figura 11 se presenta el gráfico de  $\xi$  vs T. Se ve que la misma es una función decreciente de la temperatura. Para T < T<sub>C</sub> la longitud de correlación toma el valor

máximo posible para esta red, se puede pensar que la red completa forma un único dominio. En las cercanías de  $T_C$ ,  $\xi$  no está bien definida: se producen variaciones bruscas del valor. Para  $T > T_C$  la longitud cae rápidamente a cero.

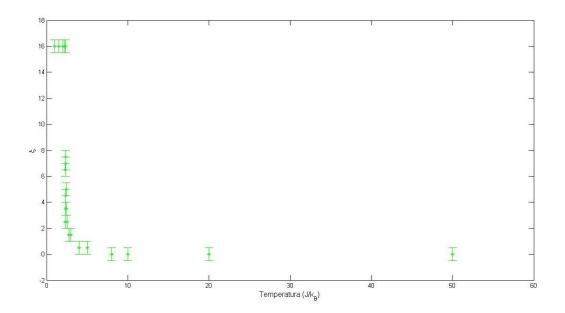


Figura 11. Longitud de correlación.

# 4. Conclusión

Utilizando el algoritmo de Metropolis-Monte Carlo logramos simular un arreglo de spines en 2D y estudiar su comportamiento a distintas temperaturas, permitiéndonos obtener evidencias de la transición de fase que se produce en el sistema debido a la interacción entre los spines vecinos.

Comparamos los resultados obtenidos mediante la simulación con las soluciones de la aproximación de campo medio, corroborando que dicha aproximación nos brinda una buena idea del comportamiento del sistema cerca a la temperatura crítica.

# 5. Referencias

- [1] Greiner, W.; Neise, L.; Stôcker, H. *Thermodynamics and statistical mechanics*. Ed. Springer, 1995.
- [2] Huang, K. Statistical mechanics. Ed. Wiley. 2nd ed. 1987.
- [3] Informe Ising 2D Computacional. Bergamasco P., Cánepa N., Depaoli, E. 2do cuatrimestre 2015.

# **Apéndice**

## Ising.m

```
clear all
close all
clc
L=32; %tamaño del sistema
npre = 500000; %cantidad de pasos para la pretermalización.
npasos = 5e4; %cantidad de copias del ensamble
Sij=2*(rand(L,L)>0.5) -1; % Estado inicial al azar. Matriz cuyas
componentes valen 1 o -1 indicando las dos proyecciones de espin.
b1=0.0001:0.001:0.9;
b2=0.9:0.05:3;
beta=[b1 b2];
U=zeros(length(beta),1);
M=zeros(length(beta),1);
SE=zeros(length(beta),1);
SM=zeros(length(beta),1);
for r=1:length(beta)
    energiapre = En(Sij); %Calcula la energía del estado inicial al azar
    for n=1:npre %Pretermalización.
%El estado al azar no es representativo de la T del sistema. El estado
atipico se va transformando en un estado de equilibrio del sistema que
corresponde a uno de los microestados más probables, compatible con la T.
    [Rij, DE, DM]=ising2Dpaso(Sij); %genera un nuevo elemento en la
cadena de Markov
    h=rand();
    a=min(1, exp(-beta(r)*DE));
        if h<a;
        Sij=Rij;
        energiapre=energiapre+DE;
        end
    end
    energia=zeros(npasos+1,1); %quardará la energía de cada cambio
aceptado
    magnet=zeros(npasos+1,1); %quardará la magnetización de cada cambio
aceptado
    energia(1) = En(Sij); %La función En(Sij) calcula la energia con
condiciones de contorno periódicas. Calcula la energía del último estado
obtenido en la pretermalización.
    magnet(1) = sum(sum(Sij)); % Magnetización del estado final de la
pretermalización. Suma la proyeccion de todos los spines.
    for n=1:npasos %Sampleo del sistema a T fija: generar microestados
compatibles con la T del sistema.
    [Rij, DE, dM] = ising2Dpaso(Sij);
    h=rand();
    a=min(1, exp(-beta(r)*DE));
        if h<a
        energia (n+1) = energia (n) +DE;
        magnet(n+1) = magnet(n) + dM;
        Sij=Rij;
```

```
else
        energia(n+1)=energia(n);
        magnet(n+1) = magnet(n);
        end
    end
e=energia./(L*L); %energía por sitio de cada elemento del ensamble
em=sum(e)/length(e); %energia por sitio media muestral
stde=sqrt(sum(e.^2)/length(e)-em^2);%desvio estándar muestral de la
energía
m=magnet./(L*L); % magnetización por sitio de cada elemento del ensamble
mm=sum(m)/length(m); %magnetizacion por sitio media muestral
stdm=sqrt(sum(m.^2)/length(m)-mm^2);%desvio estándar muestral de la
magnetización
M(r)=mm; %magnetización media a cada T muestreada
U(r) = em; % energía media a cada T muestreada
SE(r)=stde; %fluctuación de la energía a cada T
SM(r)=stdm;%fluctuación de la magnetización a cada T
end
subplot(2,2,1)
plot(beta, M, '.');
xlabel('\beta');
ylabel('Magnetización media por sitio');
subplot(2,2,2)
plot(beta, U, '.');
xlabel('\beta');
ylabel('Energía media por sitio');
subplot(2,2,3)
plot(beta, SE, '.');
xlabel('\beta');
ylabel('Desvio estándar de la energia media por sitio');
subplot(2,2,4)
plot(beta, SM, '.');
xlabel('\beta');
ylabel ('Desvio estándar de la magnetización media por sitio');
function [Rij, DE, DM] = ising2Dpaso(Sij)
Rij= Sij;
L=size(Sij);
L=L(1);
%elegir una coordenada al azar de la matriz de tamaño LxL con
probabilidad uniforme
k=rand();
if k<1;
   k=floor(L*k+1);
else
k=L*k;
end
l=rand();
if 1<1;</pre>
   l=floor(L*l+1);
else
l=L*1;
```

end

```
Rij(k,l)=Rij(k,l)*(-1); %cambio de signo en la coordenada (k,l),
equivalente a dar vuelta un spin
DE= -2*(Rij(k, 1)*Rij(k, 1+1-L*(1==L))+Rij(k, 1)*Rij(k, 1-L*(1==L))
1 + L * (l == 1)) + Rij(k, l) * Rij(k-1 + L * (k == 1), l) + Rij(k, l) * Rij(k+1 - L * (k == L), l)); % \\
ENERGÍA FINAL - ENERGÍA INICIAL
DM=2*Rij(k,1); % MAGNETIZACIÓN FINAL - INICIAL
end
function [energia] = En(Sij)
energia=0;
L=length(Sij);
for i=1:L
                  for j=1:L
                                     g=(-1)*sum(Sij(i,j)*Sij(i,j+1-L*(j==L))+Sij(i,j)*Sij(i+1-L*(j==L))+Sij(i,j)*Sij(i+1-L*(j==L))+Sij(i,j)*Sij(i+1-L*(j==L))+Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i+1-L*(j==L))+Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i+1-L*(j==L))+Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,
L*(i==L),j)); %sumamos derecha y abajo. == operacion logica que devuelve
uno o cero.
                                      energia = energia + g;
                   end
end
end
```

#### calculacorrelacion.m

```
clear all
close all
clc
L=32; %tamaño del sistema
beta=0.9;
Sij=2*(rand(L,L)>0.5) -1;% Estado inicial al azar.
npre = 1e6; %cantidad de pasos para la pretermalización.
npasos = 5e4;%cantidad de copias del ensamble
%Pretermalización.
energiapre=zeros(npre+1,1); %para estudiar cuántos pasos necesitamos para
pretermalizar
energiapre(1) = En(Sij);
for n=1:npre
[Rij, DE, DM]=ising2Dpaso(Sij);
h=rand();
a=min(1,exp(-beta*DE));
if h<a;</pre>
    Sij=Rij;
    energiapre (n+1) = energiapre (n) +DE;
else
    energiapre(n+1) = energiapre(n);
end
%sampleo del sistema a T fija
energia=zeros(npasos+1,1);
magnet=zeros(npasos+1,1);
energia(1) = En(Sij);
magnet(1) = sum(sum(Sij));
for n=1:npasos
    [Rij, DE, dM] = ising2Dpaso(Sij);
    h=rand();
    a=min(1,exp(-beta*DE));
    if h<a</pre>
    energia(n+1) = energia(n) + DE;
    magnet(n+1) = magnet(n) + dM;
    Sij=Rij;
    else
        energia (n+1) = energia (n);
        magnet(n+1) = magnet(n);
    end
    if(mod(n,10) == 0) % el resto de dividir n con 10
    imagesc(Sij); shading flat; % grafica
    title(['T = ' num2str(1/beta) ' e = ' num2str(energia(n)/(L*L)) '
m = ' num2str(magnet(n)/(L*L))], 'fontsize', 12, 'fontweight', 'b');
    drawnow;
    end
end
e=energia./(L*L);
em=sum(e)/length(e);
stde=sqrt(sum(e.^2)/length(e)-em^2);
```

```
m=magnet./(L*L);
mm=sum(m)/length(m);
stdm=sqrt(sum(m.^2)/length(m)-mm^2);
Corrp=zeros(1,16);%cálculo de correlación
for n=1:16
               p=n;
                [corr] = correlacion(Sij,p);
               Corrp(n) = corr;
end
figure;
plot(Corrp,'.');
xlabel('Distancia (espaciamiento en la
red)','fontsize',12,'FontName','Arial');
ylabel('C l','fontsize',12,'FontName','Arial');
title(['T= ' num2str(1/beta)], 'fontsize', 12, 'fontweight', 'b');
figure;
plot(energiapre,'.');
xlabel('Iteración','fontsize',12,'FontName','Arial');
ylabel('Energía','fontsize',12,'FontName','Arial');
function [corr]=correlacion(Sij,p)
corr=0;
L=length(Sij);
                for i=1:L
                              for j=1:L
                                              C=sum(Sij(i,j)*Sij(i,j+p-L*(j>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i+p-L*(i>L-p))+Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*Sij(i,j)*S
p),j));
                                              corr = corr + C;
                               end
               end
corr=corr/(2*L*L);
end
```

### calculacorrelacion2.m

```
close all
clc
L=32; %tamaño del sistema
beta=1;
Sij=2*(rand(L,L)>0.5) -1;% Estado inicial al azar.
npre = 1e6; %cantidad de pasos para la pretermalización.
%Pretermalización.
energiapre = En(Sij);
for n=1:npre
    [Rij, DE, DM]=ising2Dpaso(Sij);
    h=rand();
    a=min(1,exp(-beta*DE));
    if h<a;</pre>
        Sij=Rij;
        energiapre=energiapre+DE;
    end
end
Corrp=zeros(1,16);%cálculo de correlación
for n=1:16
    p=n;
    [corr] = correlacion(Sij,p);
    Corrp(n) = corr;
end
figure;
plot(Corrp, '.');
xlabel('Distancia (espaciamiento en la
red)','fontsize',12,'FontName','Arial');
ylabel('C l','fontsize',12,'FontName','Arial');
title(['T= ' num2str(1/beta)], 'fontsize', 12, 'fontweight', 'b');
datacursormode on
cd('C:\Users\Leticia\Documents\Materias\FT3\ISING\Correlacion');
A=dlmread('correlacionvstemperatura.txt');
errorbar(A(:,1), A(:,2), A(:,3), '*g');
xlabel('Temperatura (J/k B)','fontsize',12,'FontName','Arial');
ylabel('\xi','fontsize',12,'FontName','Arial');
```