

## Ejercicio 1

Se realizó un código en C++ para implementar el modelo de Ising bidimensional en ausencia de campo magnético externo mediante el algoritmo de Metrópolis, el cual permite simular los fliepos aleatorios de un spin por intercambio de energía con el ambiente a temperatura  $T = \text{cte}$  (a demás de los fliepos para disminuir la energía del sistema).

En este algoritmo se parte de un estado inicial aleatorio en una grilla periódica de  $n \times n$  (con valores de 1 o -1), se realizan  $n^2 t_{max}$  iteraciones y en cada una de estas se selecciona un spin al azar para evaluar si debe ser flipado.

Para esto se calcula el factor de Boltzmann  $p = e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$  para el spin sorteado, donde  $\Delta E = E' - E$  con  $E$  la energía local del spin dada por la suma de las energías de interacción con cada uno de sus cuatro spins vecinos ( $E_{int.} = -J s_i s_j$  en ausencia de campo magnético externo) y  $E'$  la energía local invirtiendo el spin (para este trabajo se tomó  $J = k = 1$ ). Luego se toma aleatoriamente un  $w \in (0, 1)$  y si  $w \leq p$  se flipa el spin y actualiza la energía del sistema (dada en este problema por  $-\sum_{i,j \in n \times n} \frac{s_i s_j}{2}$ ). Cada  $n^2$  iteraciones, se incrementa un paso temporal.

Se realizaron los gráficos de la energía y magnetización por spin en función del tiempo:

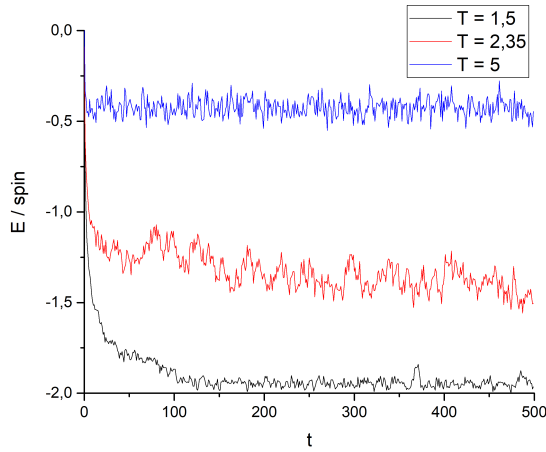


Gráfico de la energía por spin en función del tiempo. Se utilizó una grilla de  $32 \times 32$  con condiciones de borde periódicas y condición inicial aleatoria.

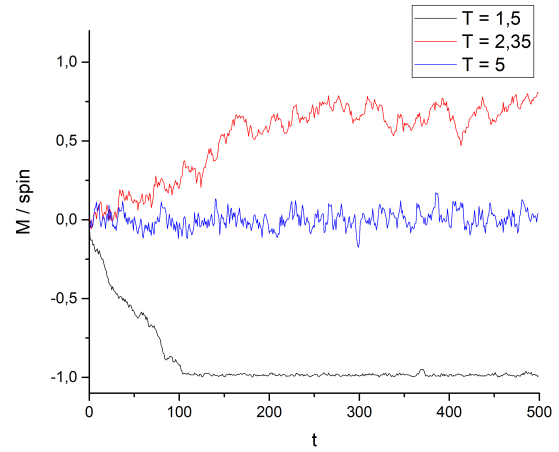


Gráfico de la magnetización por spin en función del tiempo. Se utilizó una grilla de  $32 \times 32$  con condiciones de borde periódicas y condición inicial aleatoria.

Se puede ver que luego de un estado transitorio la energía se estabiliza en un valor que aumenta junto con  $T$  (siendo la mínima energía por spin posible -2, correspondiente a todos los spins apuntando en el mismo sentido) mientras que con la magnetización ocurre algo diferente. Para temperaturas bajas se presenta el fenómeno de ferromagnetización pudiéndose ver que la magnetización se estabiliza en -1 (todos los spins apuntando hacia abajo, concuerda con la energía por spin), para temperatura alta la magnetización media es nula, y para una temperatura media la magnetización no se estabiliza a pesar de que la energía si. Esto último se debe a que se forman dominios de magnetización en la grilla que evolucionan muy lentamente, por lo que no llegan a estabilizarse.

Luego se midió la magnetización y la energía por spin en cada "muestra" de un ensamble de 100 grillas de  $32 \times 32$  (cada una con condición inicial al azar), para varias temperaturas en el intervalo  $T \in [1.5, 3]$ . Para esto se promedió las últimas 600 unidades temporales de cada elemento de cada ensamble, y a partir de ahí se obtuvo  $\langle E \rangle$  y  $\langle M \rangle$  para cada elemento del ensamble. Con esto se realizó un diagrama de fases para la magnetización por spin vs.  $T$ :

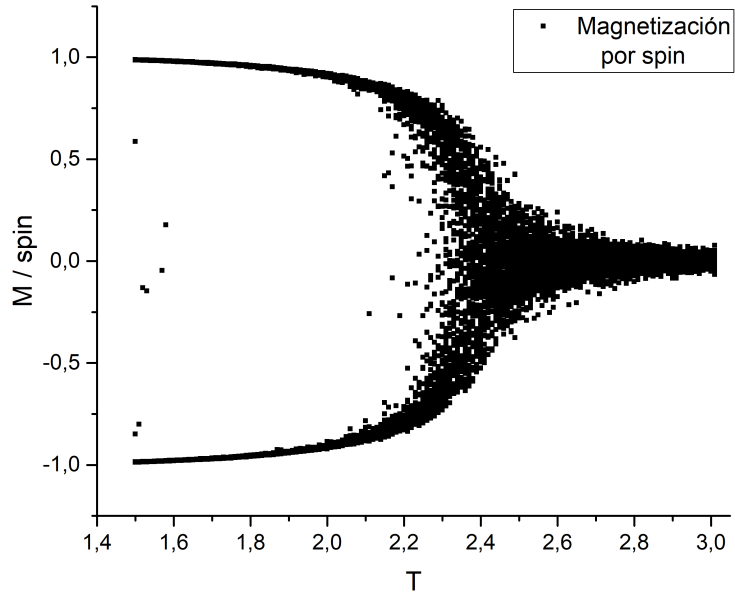
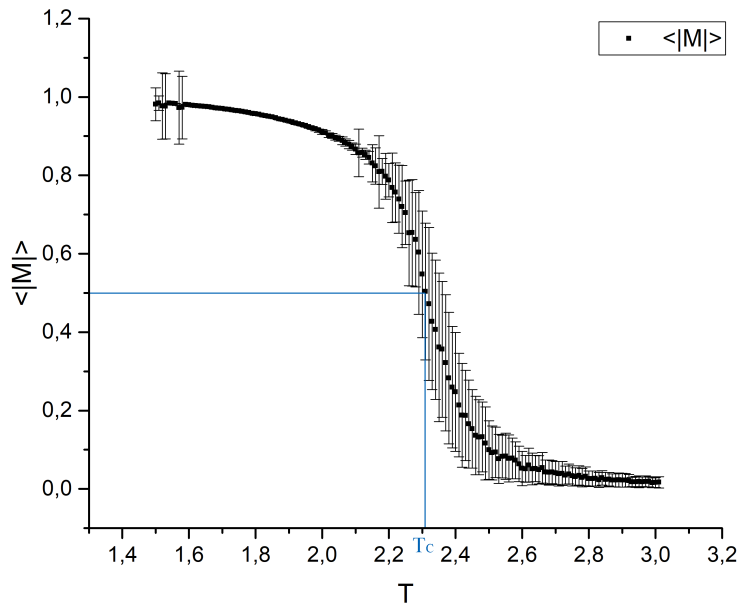
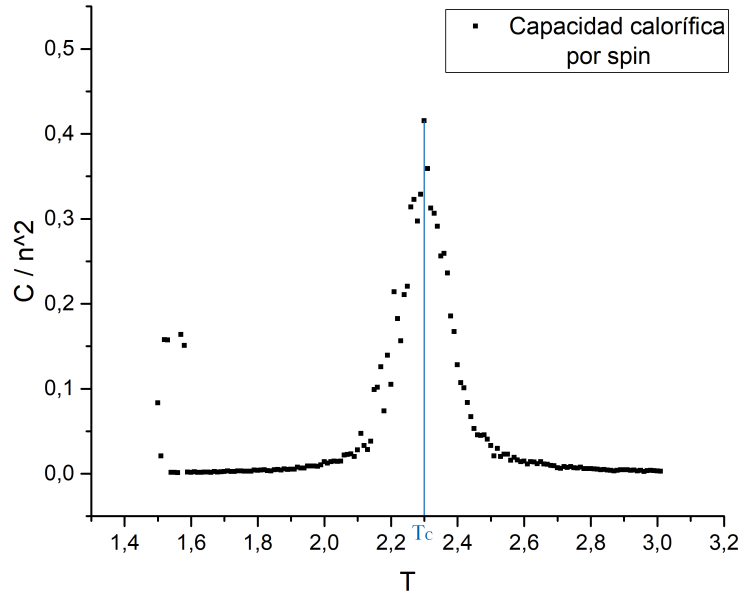


Diagrama de fases de la magnetización por spin en función de  $T$ , dejando evolucionar cada sistema 5000 pasos temporales. Se puede notar como a temperaturas bajas la magnetización puede valer 1 o -1 correspondiendo con lo mencionado anteriormente (salvo por algún punto suelto que no alcanzó el equilibrio), a temperaturas altas la magnetización por spin comienza a distribuirse mas cerca del 0 (magnetización media nula) y en la temperatura media se tiene una distribución mas ancha de magnetizaciones ya que en esta zona de temperaturas la magnetización no se estabiliza.

Luego promediando los ensambles se obtuvo  $\langle |E| \rangle$ ,  $\langle |M| \rangle$ ,  $\sigma_E^2$  y  $\sigma_M^2$  para cada temperatura, con lo que se pueden obtener algunas magnitudes termodinámicas de interés:

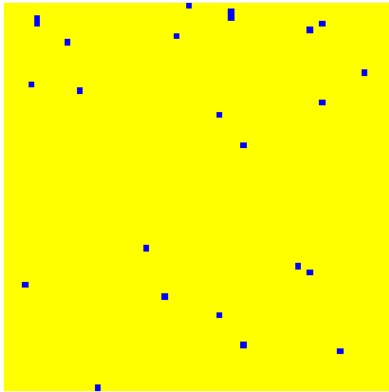


Valor medio del módulo de la magnetización por spin en función de la temperatura. El punto de inflexión ( $\langle |M| \rangle = 0,5$ ) se da a la temperatura de Curie, que resulta ser  $T_C \simeq 2,3$ .

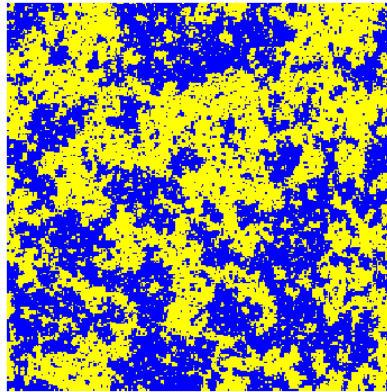


Capacidad calorífica por spin ( $C = \frac{1}{N^2} \frac{\sigma_E^2}{kT^2}$ ) en función de la temperatura. El máximo ( $C \simeq 0,4$ ) se da a la temperatura de Courie, que resulta ser  $T_C \simeq 2,3$  al igual que en el gráfico anterior.

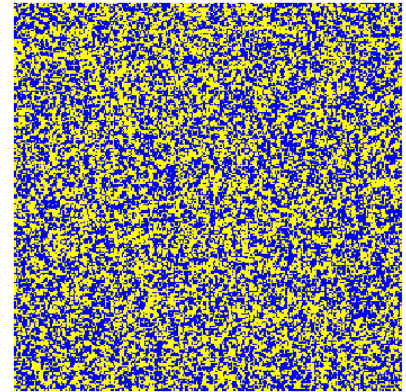
Por último se graficó los estados finales para una temperatura baja, una media y una alta en grillas de  $n \times n$  con  $n = 64, 256$  y  $256$  respectivamente:



$T=1,5$ . Se observa que todos los spines apuntan en la misma dirección por lo que la magnetización por spin resulta  $\pm 1$  según que color corresponda a cada orientación (fenómeno ferromagnético, como se mencionó en el diagrama de fases). Se pueden notar unos spines invertidos, y esto se debe a que la probabilidad de invertir un spin resultando en un aumento de energía es muy baja aunque no es 0, debido al algoritmo de Metrópolis que utilizamos.



$T=2,35$ . Se observan regiones con magnetización positiva y regiones con magnetización negativa de distintos tamaños que evolucionan lentamente sin llegar a estabilizarse. Es por esto que en el diagrama de fases se obtiene una amplia región de magnetizaciones por spin, y el gráfico de la magnetización en función del tiempo parecería hacer una caminata al azar.



$T=5$ . Se observa una distribución uniforme de spines positivos y negativos resultando en una magnetización por spin cercana a 0 (concordando con el diagrama de fases). Sin embargo se puede notar que los spines no están distribuidos aleatoriamente como en la condición inicial, si no que se distribuyen en pequeñas "manchas" positivas y negativas. Esto se debe a que un spin tiene una probailidad un poco mayor hacia rodearse con spines orientados en el mismo sentido, por lo que se puede decir que si bien hay un "desorden" en la escala de la muestra se tiene cierto orden a escala microscópica (de las celdas).