

# Simulaciones computacionales del Modelo de Ising con gradiente térmico

Juan Muglia

Departamento de Física  
Facultad de Ciencias Exactas  
Universidad Nacional de La Plata

Trabajo de Diploma de la Licenciatura en Física  
Director: Dr. Ezequiel Vicente Albano

Mes de Julio de 2011

Este trabajo fue realizado entre los meses de Octubre de 2010 y Julio de 2011, en el Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos de la Ciudad de La Plata, Provincia de Buenos Aires, República Argentina.

Estuvo financiado con una Beca de Entrenamiento para Alumnos Universitarios de la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires.

## Resumen

En este trabajo se estudió un sistema de Ising confinado en dos dimensiones con una superficie lateral en contacto con un foco térmico provisto de un gradiente de temperaturas lineal en una dirección preferencial. El método de trabajo constó en el uso de simulaciones computacionales aplicando el método de Monte Carlo, y usando el algoritmo de actualización de Metropolis. Se calcularon en función de la temperatura los perfiles en la dirección perpendicular al gradiente aplicado de la magnetización por partícula  $m$ , y sus momentos segundo y cuarto. A partir de ellas se determinaron los valores de otras funciones importantes. Se estudió tanto la dinámica de aproximación al equilibrio como el sistema en régimen estacionario, y se caracterizó la transición de fase orden-desorden que tiene lugar en la parte del sistema más cercana a la temperatura crítica del Modelo de Ising bidimensional. Combinando los resultados de dinámica crítica junto con los de régimen estacionario se pudo calcular los exponentes críticos estáticos de la transición de fase, que resultaron ser:  $\nu = 0,96(7)$ ,  $\beta = 0,120(2)$ , y  $\gamma = 0,736(1)$ . Estos valores de los exponentes estáticos están en excelente acuerdo con los exponentes conocidos exactamente,  $\nu = 1$ ,  $\beta = 1/8$ , y  $\gamma = 3/4$ [1]. Los exponentes dinámicos, por su parte, dieron por resultado  $\theta = 0,196(6)$  y  $z = 2,16(4)$ , que dentro de las incertidumbres concuerdan con los obtenidos mediante simulaciones por Okano et al[2] ( $\theta = 0,191(1)$ ), y Wang et al[3] ( $z = 2,166(7)$ ). Se encontró también que la dimensionalidad con la que se comportan los perfiles de las funciones termodinámicas es  $d = 1,02(8)$ , lo que sugiere que la sola interacción entre una columna unidimensional y sus vecinas más próximas es suficiente para que exista una transición orden-desorden. Por último se midió la temperatura crítica en la que ocurre la transición, obteniendo resultados diversos para los diferentes métodos con la que se la calculó.

## Agradecimientos

A Ezequiel Albano por aceptarme como su alumno del Trabajo de Diploma de la Licenciatura en Física y guiarme en este primer paso en el mundo de la investigación.

A la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires por brindarme su apoyo mediante el programa de Becas de Entrenamiento para Alumnos Universitarios.

A la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP por brindarme los conocimientos necesarios para obtener mi título universitario.

Al Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (Iflysis) y al Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (Inifta) por brindarme la infraestructura con la que fue posible realizar este trabajo.

Al Grupo de Sistemas Complejos del Iflysis, especialmente a Diego Rodriguez y Gabriel Baglietto, por aportar conocimientos y participar de discusiones enriquecedoras.

Otros agradecimientos no menos importantes

A mi familia, que me apoyó durante todos estos años y me seguirá apoyando hasta la eternidad en este clan que somos los Muglia.

A mi mamá, que me alentó a que estudiara física entre todas las carreras científicas.

A los amigos que conocí durante estos años, y me aportaron muchísimos conocimientos, madurez, experiencia y delirio, sin los cuales en este momento yo no sería esta persona. Por nombrar a algunos, el Herni, Facu, Franchino, el Andrew, Fede G, la Taira, Chofi, Ceci Sottile, Isisbart, y Camila Marisasa.

A Juli Kaminsky, con la que comparto todo desde hace un tiempo.

A Puerto Madryn y su gente, de la que tengo mis recuerdos del mar.

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>6</b>
<b>2. Fundamentos teóricos</b>	<b>7</b>
2.1. Aspectos preliminares de la Mecánica Estadística . . . . .	7
2.1.1. Algunas funciones importantes . . . . .	8
2.2. Transiciones de fase de segundo orden . . . . .	9
2.3. Fenómenos críticos . . . . .	10
2.4. Exponentes críticos . . . . .	12
2.5. Efectos de tamaño finito en el punto crítico . . . . .	13
2.6. El exponente $z$ y el tiempo de correlación . . . . .	16
2.7. Dinámica de tiempos cortos en el punto crítico . . . . .	17
2.8. El Modelo de Ising . . . . .	20
<b>3. Simulaciones del Modelo de Ising con gradiente térmico</b>	<b>22</b>
3.1. La difusión del calor en una barra homogénea . . . . .	22
3.2. El método del gradiente en el Modelo de Ising . . . . .	23
<b>4. Resultados obtenidos</b>	<b>27</b>
4.1. Las funciones estudiadas . . . . .	27
4.2. Dinámica de tiempos cortos . . . . .	27
4.2.1. Detalles técnicos de las simulaciones . . . . .	27
4.2.2. Resultados . . . . .	28
4.3. Régimen estacionario . . . . .	31
4.3.1. Detalles técnicos de las simulaciones . . . . .	31
4.3.2. Resultados . . . . .	33
4.4. Los exponentes críticos del Modelo de Ising en gradiente térmico . . . . .	38
4.5. Otra forma de encontrar la temperatura crítica . . . . .	38
<b>5. Discusión</b>	<b>39</b>
<b>6. Conclusión</b>	<b>40</b>

# 1. Introducción

Uno de los fenómenos más interesantes en la Física del estado sólido es el ferromagnetismo. En algunos metales como el hierro y el níquel, una fracción de los spines de los átomos es polarizada en la misma dirección de manera espontánea, produciendo un campo magnético de características macroscópicas[4]. Este efecto físico se produce sólo si el sistema se encuentra por debajo de una temperatura crítica  $T_c$ , a la que se conoce como *Temperatura de Curie*. Por encima de esa temperatura, la agitación térmica no permite un ordenamiento de los spines.

Se ha observado que cuando la temperatura se acerca al valor de  $T_c$ , el calor específico del metal crece arbitrariamente. Esto sugiere que en la temperatura de Curie ocurre una transición de fase, entre un estado desordenado y otro ordenado.

En el presente trabajo se planea estudiar el caso en que una muestra ferromagnética se encuentre en presencia de un gradiente térmico en una de las direcciones del espacio. Para eso se definió un sistema confinado entre dos paredes (horizontales) de manera que los extremos verticales se encuentren a distintas temperaturas ( $T_1$  y  $T_2$ , respectivamente).

Si  $T_1 < T_c < T_2$ , donde  $T_c$  es la temperatura en la que ocurre la transición orden-desorden, el ferromagneto experimentará una transición de fase, de tal manera que en presencia de un gradiente térmico se tendrá coexistencia de dos fases (ordenada y desordenada) con una interfaz que las separa, localizada en promedio cerca de  $T_c$ . Este sistema planteado no es infinito en ninguna de las direcciones del espacio, por lo que es esperable que haya importantes efectos dados por el confinamiento.

El estudio de este problema de la Física se realizó en el marco de las simulaciones computacionales mediante el método de Monte Carlo, usando el algoritmo de actualización de Metropolis[5] para un sistema con un gradiente térmico lineal en la dirección longitudinal. Dado que este algoritmo usa probabilidades dependientes de una temperatura constante introducida como parámetro de control, el modelo mental que se debe hacer es el de un sistema ferromagnético en contacto con un foco térmico que no varíe sus propiedades en el tiempo. Este foco no está todo a la misma temperatura, sino que posee un gradiente estable en una dirección preferencial de tal manera que cada sección transversal del ferromagneto esté en equilibrio a una temperatura diferente con el foco.

El modelo elegido para representar al ferromagneto fue el Modelo de Ising, debido a que presenta una forma versátil de representar las interacciones entre átomos en un sistema sólido, y predice una transición de fase orden-desorden a una temperatura  $T_c$ <sup>1</sup>. Además, debido al carácter universal de las propiedades de los sistemas en estado crítico, resultados encontrados con este modelo pueden extenderse a situaciones de lo más variadas, como aleaciones binarias, condensación por mojado sobre una superficie, o gases de red.

El objetivo de este trabajo es estudiar la respuesta del Modelo de Ising al contacto con el foco térmico especial que le produzca un gradiente de temperaturas en la coordenada longitudinal. Con anterioridad se ha introducido un gradiente en otros modelos de la física simulacional, que muestran transiciones de fase irreversibles, con resultados exitosos[6][7]. Este estudio permitiría validar el uso del Método del gradiente (denominado así por Loscar et al en [6]), para el estudio de transiciones reversibles. La motivación de introducirlo en el Modelo de Ising viene dada porque la transición de fase que en él ocurre está muy bien estudiada, por lo que resulta interesante averiguar cómo varían las propiedades de un sistema de Ising cuando su temperatura no es uniforme.

La transición de fase que se quiere caracterizar no ocurriría en todo el material, sino sólo en la parte que esté a una temperatura cercana a  $T_c$ . Por lo tanto se podrá hablar de una zona crítica, siendo

---

<sup>1</sup>Para sistemas de dimensión mayor a 1.

esta la porción del espacio real donde exista la frontera entre las zonas desordenada y ordenada del sistema.

Bajo las condiciones explicadas se esperan medir, entre otras propiedades, los perfiles de magnetización y sus momentos, y sus comportamientos en las vecindades de  $T_c$ . También la temperatura pseudo-crítica para distintos tamaños del sistema y eventualmente su extrapolación a sistemas de tamaño infinito (límite termodinámico), junto con los exponentes críticos de la transición.

Este trabajo está ordenado de la siguiente manera: En el marco teórico se exponen ciertos conocimientos teóricos de la Mecánica Estadística, y se describen los efectos físicos que motivan al estudio de los fenómenos críticos. Luego se dan algunas pautas sobre efectos de confinamiento y evolución temporal en sistemas en estado crítico. En los procedimientos se explica el método simulacional usado, y cómo se introdujo el gradiente térmico en el mismo. En los resultados se detallan particularidades de las distintas simulaciones hechas, y se exponen los gráficos y valores de cantidades físicas obtenidos. En la discusión se analizan estos resultados y se interpreta su alcance. Por último, en la conclusión se proyectan los diferentes estudios con los que se debería proceder a futuro en el tema.

## 2. Fundamentos teóricos

### 2.1. Aspectos preliminares de la Mecánica Estadística

La Mecánica Estadística es una rama de la Física que se encarga de utilizar herramientas de la teoría matemática de las probabilidades para explicar fenómenos en los que intervienen gran cantidad de partículas. Tiene como objetivo entender el comportamiento macroscópico de los sistemas termodinámicos por medio de los procesos ocurridos entre sus componentes microscópicos.

Mediante la Mecánica Estadística es posible encontrar una interpretación a nivel molecular de cantidades termodinámicas como la entropía, la energía interna, y la magnetización. Por ejemplo la entropía, que clásicamente se conoce en forma empírica usando como herramienta la irreversibilidad de los procesos macroscópicos, en la física estadística posee una expresión funcional determinada por  $\Omega$ , el número de configuraciones posibles que pueden tener las partículas que componen al sistema:

$$S = k_B \ln(\Omega),$$

donde  $k_B$  es la Constante de Boltzmann, que vincula la física de los procesos microscópicos con la de los macroscópicos.

La cantidad  $\Omega$ , también conocida como *número de microestados posibles del sistema*, depende de los distintos grados de libertad que puede tener cada partícula. Entre ellos se cuentan la posición, el momento dipolar magnético, y, para el caso de moléculas de más de un átomo, estados vibracionales y rotacionales. Cuantos más estados posibles tenga cada partícula, y mayor sea el número de estas, más grande será  $\Omega$ .

El número de microestados posibles tiene una gran importancia en la física, ya que mediante las herramientas de la Mecánica Estadística determina el estado termodinámico del sistema. Funciones como la energía interna  $E$ , que clásicamente dependen de los parámetros extensivos del sistema, se pueden expresar como dependientes de la configuración de los componentes microscópicos. Una dada configuración suele escribirse como un conjunto de valores  $\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ , donde cada  $\sigma_i$  representa el estado de la partícula  $i$ <sup>2</sup>. De aquí en más a un dado microestado (conjunto de valores

---

<sup>2</sup>Según cuáles sean las características del sistema físico, la palabra *estado de la partícula* puede referirse a la posición

de  $\sigma_i$ ) del sistema se lo distinguirá como  $\{\sigma_\nu\}$ , y la cantidad de  $\{\sigma_\nu\}$  distintos que se pueda tener será el valor de  $\Omega$ .

Se llama  $E\{\sigma_\nu\}$  a la energía correspondiente a un dado microestado del sistema, y su valor depende de la forma del Hamiltoniano del problema que se esté tratando. De acuerdo con el formalismo de la Mecánica Estadística, la probabilidad de el sistema se encuentre en alguna configuración  $\{\sigma_\nu\}$  con energía  $E\{\sigma_\nu\}$  (dada por el Hamiltoniano), es proporcional al factor de Boltzmann e inversamente proporcional a la función de partición canónica:

$$P_\nu = \frac{e^{-\frac{E\{\sigma_\nu\}}{k_B T}}}{\sum_\nu e^{-\frac{E\{\sigma_\nu\}}{k_B T}}}, \quad (1)$$

donde  $T$  es la temperatura a la que se encuentra el sistema.

### 2.1.1. Algunas funciones importantes

Como se dijo en la introducción, en el presente trabajo se estudian sistemas ferromagnéticos, por lo que resulta pertinente a esta altura definir la magnetización por partícula  $m$  y la susceptibilidad magnética  $\chi$ , dos funciones importantes en sistemas de este tipo. Termodinámicamente tienen una dependencia con la temperatura  $T$  y el campo magnético externo  $\mathbf{H}$ , que conforman las llamadas *ecuaciones de estado* del problema.

La magnetización por partícula se define como:

$$\mathbf{m}(\mathbf{H}, T) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\mu}_i, \quad (2)$$

donde  $\boldsymbol{\mu}_i$  es el momento dipolar magnético que posee la partícula  $i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ). La dependencia de esta ecuación con las variables  $T$  y  $\mathbf{H}$  está dada por el Hamiltoniano del problema y la probabilidad de microestado expresada en (5). Por lo general la función termodinámica con la que se trabaja es el módulo de  $\mathbf{m}$ , expresado simplemente como  $m$ . Nótese que la magnetización por partícula está normalizada de tal manera que  $m = 1$  cuando el sistema está ordenado, y  $m = 0$  en el caso en que esté totalmente desordenado (en lo que a ordenamiento de los dipolos magnéticos se refiere).

La susceptibilidad magnética, que termodinámicamente mide la respuesta de un material al ser expuesto a un campo magnético externo, se define como:

$$\chi(H, T) = \left. \frac{\partial m}{\partial H} \right|_{T=cte}. \quad (3)$$

A través de la relación de fluctuación-disipación[8] se encuentra que  $\chi$  depende de las fluctuaciones de la magnetización respecto de su valor medio de la siguiente manera:

$$k_B T \chi = L^d (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (4)$$

donde  $d$  es la dimensión del sistema, y  $L$  es el *tamaño* del mismo. En un sistema cuadrado, por ejemplo,  $L$  corresponde a la longitud de los lados, y  $d = 2$ .

---

del centro de masas de la molécula, su momento dipolar magnético, posiciones relativas entre sus átomos, etc.



Las expresiones  $\langle m^2 \rangle$  y  $\langle m \rangle$  se refieren a los promedios de ensamble del módulo de la magnetización por partícula definida en (2) y su cuadrado, respectivamente. De acuerdo a la Mecánica Estadística, el promedio de ensamble  $\langle m^n \rangle$  de una potencia  $n$  de la magnetización (o algun otro observable físico) tiene por valor:

$$\langle m^n \rangle = \frac{\sum_{\nu} e^{\frac{-E\{\sigma_{\nu}\}}{k_B T}} (m\{\sigma_{\nu}\})^n}{\sum_{\nu} e^{\frac{-E\{\sigma_{\nu}\}}{k_B T}}}, \quad (5)$$

donde con  $m\{\sigma_{\nu}\}$  se quiere expresar la magnetización, dada por la ecuación (2), correspondiente a una configuración  $\{\sigma_{\nu}\}$  del sistema.

## 2.2. Transiciones de fase de segundo orden

En la naturaleza existen varios tipos de transiciones de fase. En particular existe una categoría en la que se observa una discontinuidad en alguno de los parámetros intensivos del sistema cuando se varía un parámetro de control. Por ejemplo, en la transición de fase en la que un líquido se convierte en vapor, se observa una discontinuidad en la densidad al expresarla como función de la temperatura o de la presión. A estos cambios bruscos se les asocia un calor latente, que representa la variación en la entropía entre un estado y el otro. Se les conoce como transiciones de fase de primer orden. Las variables termodinámicas que sufren la discontinuidad son los llamados parámetros de orden, ya que su valor representa la *fuerza* con la que el sistema cambia la manera en la que está ordenando[9].

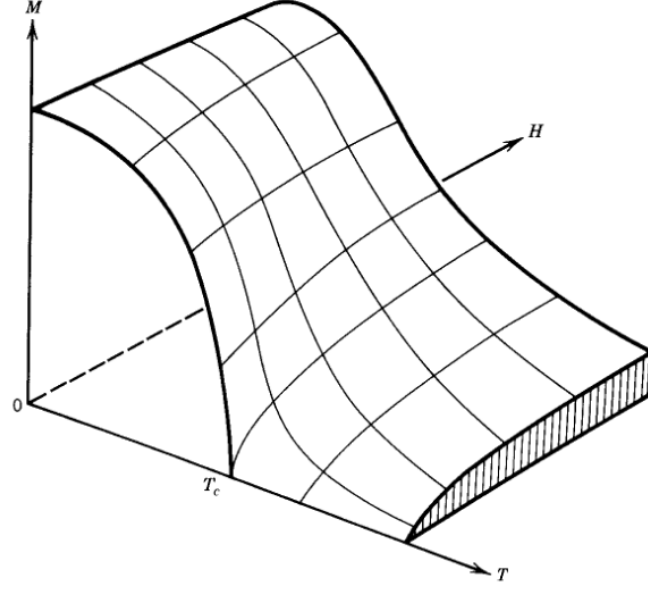
Ahora bien, es un hecho observado que si se aumenta la temperatura del sistema, las discontinuidades de las variables entre una fase y otra se verán disminuidas. Alcanzada una temperatura  $T_c$ , el salto desaparece y la transición de fase cambia sus características. En este punto se dice que ocurre una transición de fases de segundo orden o transición de fase continua[9]. Por ejemplo, alcanzada  $T_c$  en el sistema líquido-vapor, ya no hay una real distinción entre el líquido y el gas, y a esa fase se la conoce como *fluido super crítico*. El punto en el plano presión-temperatura donde ocurre la transición de segundo orden se lo conoce como punto crítico; y a  $T_c$ , temperatura crítica. Al alcanzarse el punto crítico en una transición de fase de segundo orden, el sistema no se encuentra en un estado de coexistencia de fases, como ocurría en una de primer orden, sino que se halla en una única fase crítica.

En un sistema ferromagnético (donde el sistema tiende a estar ordenado para disminuir su energía), si se aplica un campo magnético externo  $H$ , los dipolos magnéticos que componen al material tienden a orientarse paralelos a ese campo, produciendo una magnetización inducida. Al aumentarse la temperatura  $T$ , son menos los dipolos que se orientan con el campo, ya que la agitación térmica es mayor e induce al sistema a su fase desordenada. Para temperaturas bajas, la propia interacción entre dipolos hace que estos se ordenen, lo que sumado al efecto de ordenamiento por el campo externo, produce una mayor magnetización. Además, y como es de esperar, si se disminuye  $H$  la magnetización también disminuye, ya que es menor la fuerza que tiende a ordenar a los momentos magnéticos.

De eliminarse el campo  $H$  llevándolo a cero, sólo queda presente en el sistema la interacción entre dipolos. Para temperaturas altas gana la agitación térmica entre ellos, por lo que el sistema está desordenado, y sin campo externo que lo ordene, la magnetización es cero<sup>3</sup>. Para temperaturas bajas, los momentos magnéticos tienden a orientarse paralelos para disminuir la energía del sistema, y la

---

<sup>3</sup>En realidad es cero sólo si el sistema es de tamaño infinito, ya que la existencia de bordes produce de por sí una magnetización.



**Figura 1.** Gráfico tridimensional de la ecuación de estado que describe el comportamiento de la magnetización al ir variando la temperatura  $T$  y el campo magnético externo  $H$ . Nótese la presencia de la temperatura crítica en la curva de  $H = 0$ . La superficie es simétrica al cambio  $M \rightarrow -M$ . Gráfico tomado de [4].

fuerza con que lo hacen vence a los efectos térmicos. Aparece entonces una magnetización propia del material, conocida como magnetización espontánea. La temperatura que limita el estado ordenado del desordenado se conoce como temperatura crítica  $T_c$ . Por debajo de ella hay magnetización no nula, y por encima no. El punto  $(H = 0, T = T_c)$  se lo conoce como punto crítico, y la transición ocurrida en él es una transición de fase de segundo orden.

Para  $T < T_c$ , si se invierte el campo  $H$  también se invertirá la orientación de la magnetización  $m$ , en lo que es una transición de fase de primer orden.

En la figura 1 se muestra un gráfico en tres dimensiones del comportamiento de la magnetización en función del campo magnético externo y de la temperatura.

### 2.3. Fenómenos críticos

Los sistemas físicos tienen un comportamiento particular en vecindades del punto crítico. Por ejemplo, de realizarse en experimento de dispersión de neutrones sobre una muestra ferromagnética, cerca de ese punto se observa un violento incremento en la intensidad de la onda dispersada, especialmente en bajas longitudes de onda<sup>4</sup>. A este efecto se lo conoce como opalescencia crítica, y viene a cuenta de que en inmediaciones del punto crítico, la muestra dispersa todas las longitudes de onda[8].

Teniendo en cuenta que la dispersión de ondas depende del tamaño y la naturaleza de las fluctuaciones del material, es sabido que si la muestra es totalmente uniforme no hay ninguna onda dispersada. Por el contrario, si lo que ocurre es que todas las ondas son dispersadas, eso querrá decir que el material tiene fluctuaciones de todos los tamaños. Si efectivamente existen fluctuaciones de

<sup>4</sup>Algo similar se observa en el sistema líquido-vapor, usando dispersión de ondas electromagnéticas.

todos los tamaños, como lo indica el efecto de la opalescencia crítica, eso debe ser una consecuencia del tipo y alcance de las interacciones que ocurren en el punto crítico.

Para estudiar fluctuaciones espaciales como las ocurridas cerca del punto crítico se define una densidad de parámetro de orden  $m(\mathbf{r})$ , dependiente de la posición, que viene a ser un parámetro de orden local. Se define además la función de correlación del sistema, que mide la *memoria* de variaciones espaciales en la densidad del parámetro de orden[4]:

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \langle m(\mathbf{r})m(0) \rangle - \langle m(\mathbf{r}) \rangle \langle m(0) \rangle. \quad (6)$$

En el caso del ferromagneto, la densidad de parámetro de orden puede ser la magnetización local. Nótese que un sistema totalmente uniforme tiene  $\Gamma(\mathbf{r}) = 0$ , ya que en ese caso  $m(\mathbf{r}) = m(0)$ .

Para sistemas con invarianza traslacional, mediante una transformada de Fourier se puede encontrar una expresión alternativa para la función de correlación, conocida como la forma Ornstein-Zernike[4][8]:

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \frac{e^{-\frac{r}{\xi}}}{r}, \quad (7)$$

donde  $\xi$  es la *longitud de correlación*, y es una medida de la distancia en la que las fluctuaciones microscópicas en los grados de libertad de las partículas que componen la muestra (posición, momento magnético, etc.) están correlacionadas de manera significativa[10]. Se puede afirmar que no hay relación entre fluctuaciones de partículas que se encuentren más lejos entre ellas que la longitud de correlación. En otras palabras, no hay interacción entre ellas si su distancia es mayor que  $\xi$ .

El valor de  $\xi$  depende de las condiciones externas que determinan el estado del sistema, como la presión, el campo magnético aplicado, y la temperatura. Si las condiciones del sistema son tales que  $\xi \simeq 0$ , no hay casi correlación entre las partículas que lo componen, y por lo tanto no hay fluctuaciones espaciales importantes. Fenomenológicamente, si  $T = 0$  entonces  $\xi \rightarrow 0$ , ya que el sistema está totalmente ordenado en su mínima energía<sup>5</sup>. Pero también en el caso en que la temperatura sea muy alta ocurre que  $\xi \rightarrow 0$ , ya que si  $T \rightarrow \infty$ , las interacciones entre partículas que producen las fluctuaciones tienen un efecto despreciable respecto a la agitación térmica, que actúa sobre todo el sistema por igual.

En las inmediaciones del punto crítico, las interacciones de corto alcance que tienden a ordenar el sistema y las agitaciones térmicas se encuentran en pie de igualdad, y ambos efectos se suman. Esto hace que se produzcan agrupamientos de distintos tamaños de partículas correlacionadas entre ellas, tal como si hubiera un orden de largo alcance. Estos grupos de partículas se comportan como fluctuaciones de todos los tamaños, que es lo que se observa en el experimento de opalescencia crítica.

Desde el punto de vista de la longitud de correlación, lo que ocurre es que  $\xi \rightarrow \infty$  cuando  $T \rightarrow T_c$ , por lo que fluctuaciones en una partícula influyen en el comportamiento de todas las demás. Se dice entonces que las correlaciones se extienden por distancias macroscópicas, lo que tiene importantes implicancias físicas. Al diverger  $\xi$  en  $T_c$ , cualquier detalle estructural a nivel microscópico que diferencie al sistema de otros pierde importancia, llevando todo a una suerte de comportamiento universal[4]. Por lo tanto, el comportamiento de los sistemas en  $T_c$  no depende de las características microscópicas del mismo, sino de propiedades más generales, como pueden ser la dimensionalidad, o las simetrías del Hamiltoniano del problema[10].

---

<sup>5</sup>El orden del sistema se alcanza debido a interacciones de corto alcance entre partículas, pero en este desarrollo se está tratando un sistema que ya ha alcanzado el estado estacionario.

## 2.4. Exponentes críticos

Como se dijo en 2.3, cuando un sistema alcanza la temperatura crítica, la longitud de correlación diverge. Esta divergencia es descripta por una ley de potencias, ya que se asume que cerca del punto crítico las funciones termodinámicas poseen una parte regular y otra singular[4].

En el caso en que la función termodinámica sea divergente en  $T = T_c$ , se modela su comportamiento con una parte singular que responde a una ley de potencias de  $(T - T_c)$  con exponente negativo. Por el contrario, si se ve que es continua en ese punto (o discontinua pero finita), el exponente que se le asigna a la parte singular es positivo. En el segundo caso, para  $(T - T_c) = 0$  domina la parte regular de la función. Para el caso divergente, por el contrario, la parte singular va a infinito y es la única relevante en cercanías del punto crítico.

Se define la temperatura reducida  $\epsilon$  como:

$$\epsilon = \frac{T - T_c}{T_c}.$$

Para una dada función termodinámica  $f(\epsilon)$ , se postula que su comportamiento cerca de  $\epsilon = 0$  es del tipo  $f(\epsilon) \sim \epsilon^\lambda$ , donde  $\lambda$  es el exponente crítico de la función[11]. Se define entonces el siguiente límite, que debe existir para que haya un comportamiento de ley de potencias:

$$\lambda = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln(f(\epsilon))}{\ln(\epsilon)}. \quad (8)$$

Por supuesto, en general una función termodinámica tendrá un comportamiento mucho más complejo, del tipo:

$$f(\epsilon) = A\epsilon^\lambda(1 + B\epsilon^\eta + \dots), \quad (9)$$

sin embargo, la observación experimental muestra que suficientemente cerca del punto crítico el primer término es el que domina el comportamiento de  $f(\epsilon)$ . Esto hace que gráficos en escala doble logarítmica tengan una distribución de puntos que sigue una forma lineal en esa zona. El exponente crítico se puede obtener entonces como la pendiente del ajuste lineal a los datos experimentales[11]. Los exponentes críticos más usuales en el estudio de sistemas ferromagnéticos rigen el comportamiento cerca de  $\epsilon = 0$  de; la longitud de correlación  $\xi$ , la magnetización  $m^6$ , la susceptibilidad magnética  $\chi$ , y el calor específico  $c$ . Por convención se consideran los valores de los exponentes siempre positivos, y se coloca un signo menos de ser necesario:

$$\xi \sim |\epsilon|^{-\nu}, \quad (10)$$

$$m \sim |\epsilon|^\beta, \quad (11)$$

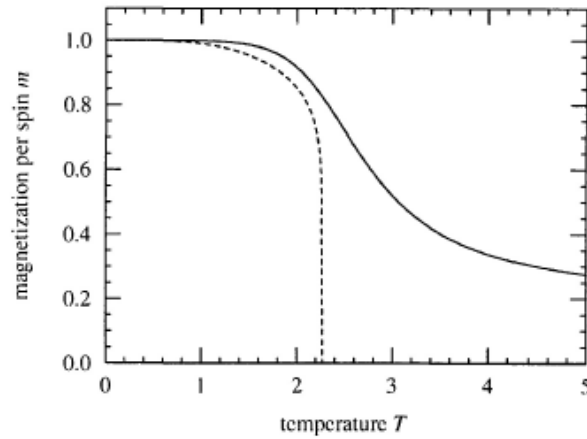
$$k_B T^2 c \sim |\epsilon|^{-\alpha}, \quad (12)$$

$$k_B T \chi \sim |\epsilon|^{-\gamma}. \quad (13)$$

Lo significativo de los exponentes críticos es la universalidad. Los experimentos muestran que gran cantidad de sistemas físicos muy diferentes entre ellos se comportan cerca del punto crítico como leyes de potencias con iguales exponentes. Los exponentes críticos dependen entonces de muy pocos factores: La dimensionalidad espacial en la que se encuentra el sistema, el número de componentes del parámetro de orden, y el rango de las interacciones microscópicas entre sus partículas[8].

---

<sup>6</sup>Donde con  $m$  se refiere en realidad al promedio de ensamble  $\langle m \rangle$ .



**Figura 2.** Efectos de tamaño finito en el comportamiento de la magnetización en función del tiempo en el Modelo de Ising. La línea punteada representa la curva para tamaño infinito, mientras que la sólida para lado  $L = 5$ .  
Imagen tomada de [12].

No todos los exponentes críticos son independientes. Por el contrario, existen relaciones entre ellos, predichas por la teoría de renormalización[9], y verificadas experimentalmente. Algunas de ellas son:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (14)$$

$$\nu d = 2 - \alpha, \quad (15)$$

donde, como es de esperar,  $d$  es la dimensionalidad del sistema.

## 2.5. Efectos de tamaño finito en el punto crítico

Hasta ahora se ha supuesto siempre que el sistema tiene un tamaño infinito, con infinitas partículas alojadas en su interior. Esto ha llevado al comportamiento divergente de la longitud de correlación en el punto crítico. Pero esta suposición, si bien es útil a la hora de estudiar los problemas teóricamente, no es real en los experimentos de laboratorio ni en las simulaciones computacionales.

Evidentemente, si la muestra es finita,  $\xi$  no puede tener valores mayores que el tamaño  $L$  del sistema. Esto tiene importantes implicancias en el comportamiento de las funciones termodinámicas[12]. El parámetro de orden, que en el sistema ferromagnético corresponde a la magnetización, ya no vale cero para  $T > T_c$ , sino que mantiene valores finitos, menores a los que tendría si  $T$  fuera menor que  $T_c$ . Esto quiere decir que jamás se puede conseguir un desorden total.

La susceptibilidad magnética, que para el sistema infinito diverge en  $T_c$  (ecuación (13)), para tamaño  $L$  alcanza un máximo finito. Esto se debe al hecho de que siendo el sistema finito,  $\xi$  no puede diverger, por lo que  $\chi$  también debe mantenerse acotada. La posición del máximo no corresponde a la temperatura crítica predicha por la teoría de tamaño infinito, y depende de  $L$ . A fines prácticos este máximo puede considerarse como una temperatura crítica efectiva  $T_c(L)$  dependiente del tamaño.

Si se aumenta el tamaño del sistema, las diferencias entre el sistema finito y el infinito van disminuyendo. Por el contrario, si las condiciones son tales que la longitud de correlación del sistema infinito supera a  $L$ , las diferencias entre comportamientos se agudizan.

Tomando como premisa el tamaño finito de la muestra, se puede arribar a conclusiones interesantes en las leyes de potencias (10)-(13). Si se combinan las expresiones (10) y (13) se obtiene:

$$k_B T \chi \sim \xi^{\frac{\gamma}{\nu}}. \quad (16)$$

Se puede expresar el hecho de que los sistemas finito e infinito difieran para parámetro de orden mayor que  $L$  de la siguiente manera:

$$k_B T \chi = \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \chi_0(L/\xi). \quad (17)$$

Teniendo en cuenta que a tamaños grandes ( $L \gg \xi$ ) el comportamiento debe tender al de la muestra infinita, es necesario que:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \chi_0(x) \rightarrow cte, \quad (18)$$

donde obviamente  $x = L/\xi$ . Si por el contrario se considera el caso donde  $\xi$  diverge, como la distancia de interacción entre partículas no puede ser mayor que el largo del sistema, se tiene que  $\xi$  satura en  $L$  y la ley de potencias (16) debe quedar en términos del tamaño de la muestra. Por lo tanto,

$$\lim_{x \rightarrow 0} \chi_0(x) \rightarrow x^{\frac{\gamma}{\nu}}. \quad (19)$$

Se define ahora la función  $\tilde{\chi}$  de tal manera que:

$$\chi_0(x) = x^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{\chi}(x^{\frac{1}{\nu}}). \quad (20)$$

Se busca expresar la susceptibilidad magnética en función de parámetros conocidos del sistema. Para eso, se debe encontrar la forma de eliminar a  $\xi$  de las relaciones. Se combinan entonces las ecuaciones (17) y (20), y se utiliza además la relación inversa de la ley de potencias (10). Por lo tanto, para temperaturas cercanas a la crítica (ya que sólo si  $T \simeq T_c$  se puede usar la relación (10)), se llega a que:

$$k_B T \chi(T, L) = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{\chi}(|\epsilon| L^{\frac{1}{\nu}}), \quad (21)$$

donde a la función desconocida  $\tilde{\chi}(|\epsilon| L^{\frac{1}{\nu}})$  se la conoce como función de escalo. Se puede demostrar con la relación de límite (19) que dicha función permanece finita en el punto crítico  $|\epsilon| = 0$  [12].

Así como se encontró una relación de escala para la susceptibilidad, se pueden hallar relaciones similares para las distintas funciones termonidámicas. Por ejemplo, para la magnetización se encuentra que:

$$m(T, L) = L^{-\frac{\beta}{\nu}} \tilde{m}(|\epsilon| L^{\frac{1}{\nu}}). \quad (22)$$

Dado que las dependencias de  $\tilde{m}$  con la temperatura y el tamaño son esencialmente las mismas que para  $\tilde{\chi}$  se concluye que también esta función se mantiene acotada en la temperatura crítica. Relaciones como las anteriores tienen importantes propiedades. Continuando con el ejemplo de la susceptibilidad, evaluando en el punto crítico se tiene que:

$$k_B T \chi(T_c, L) = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{\chi}(0), \quad (23)$$

por lo que determinando el valor de  $k_B T \chi$  para la temperatura crítica en diferentes tamaños se puede obtener el valor  $\gamma/\nu$  como la pendiente de la recta de ajuste de un gráfico en escala doble

logarítmica de  $k_B T_c \chi(T_c, L)$  en función de  $L$ . Algo similar se puede hacer para la magnetización en el punto crítico y obtener  $-\beta/\nu$ .

Es posible explotar el hecho de que las dependencias de  $\tilde{m}(x)$  y  $\tilde{\chi}(x)$  con el tamaño y la temperatura son conocidas. Si se mide y grafica alguna de ellas explícitamente en función de  $x$ , las distribuciones de puntos correspondientes a diferentes valores de  $L$  colapsarán todas en una misma curva[12]. Por supuesto que para hacer eso se deben conocer los valores de  $T_c$  y los exponentes críticos, pero es una buena forma de comprobar que mediante las funciones de escala se elimina la dependencia del tamaño cerca del punto crítico.

Se puede obtener información adicional del argumento de la función  $\tilde{\chi}$ . Sabiendo que este permanece finito para todo valor de la temperatura, es posible inferir una relación entre la temperatura crítica  $T_c \equiv T_c(\infty)$  del sistema infinito y  $T_c(L)$ , la posición del máximo de la susceptibilidad. Dicha relación tiene la forma:

$$T_c(L) - T_c(\infty) \propto L^{-\frac{1}{\nu}}. \quad (24)$$

Por lo que si se conoce el exponente  $\nu$ , se puede extrapolar la  $T_c$  del sistema infinito como la ordenada de origen del ajuste lineal de un gráfico de los máximos de  $\chi(T, L)$  en función de las correspondientes  $L^{-1/\nu}$ . O bien, conocida  $T_c(\infty)$  se puede determinar  $\nu$  como la recíproca de la pendiente de la curva de ajuste de  $T_c(L) - T_c(\infty)$  en función de  $L$  en escala doble logarítmica.

Otra función útil a la hora de estudiar el comportamiento crítico es el llamado cumulante de segundo orden  $U_2(T, L)$ . Esta función se define como:

$$U_2(T, L) = \frac{\langle m^2 \rangle}{\langle m \rangle^2} - 1. \quad (25)$$

Teniendo en cuenta las relaciones de escala de  $m$  y  $\chi$ , y sus definiciones dadas en 2.8, se puede escribir:

$$\begin{aligned} L^d(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) &= L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{\chi}(|\epsilon| L^{\frac{1}{\nu}}), \\ \langle m \rangle &= L^{-\frac{\beta}{\nu}} \tilde{m}(|\epsilon| L^{\frac{1}{\nu}}). \end{aligned}$$

Combinando estas ecuaciones y usando las relaciones entre exponentes (14) y (15), se puede hallar una relación de escala para  $U_2$ , que resulta ser:

$$U_2(T, L) = \tilde{U}_2(|\epsilon| L^{\frac{1}{\nu}}), \quad (26)$$

y en esto radica la importancia del cumulante: Su exponente de escalo es cero, por lo que en la temperatura crítica es eliminada cualquier dependencia con  $L$ . Si se grafica  $U_2$  en función de la temperatura para distintos tamaños, en  $T = T_c$  se verá que todas las curvas se cortan en un mismo punto. Con esa técnica es posible determinar el valor de  $T_c$  de una manera independiente a las estimaciones de exponentes críticos[13].

El cumulante de segundo orden no es la única función que cumple con esta propiedad. El cumulante de cuarto orden o cumulante de Binder también se comporta de esa manera en  $T_c$ . Su expresión matemática es[13]:

$$U_4(T, L) = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad (27)$$

y también puede ser usado para encontrar la temperatura crítica.

## 2.6. El exponente $z$ y el tiempo de correlación

Como ya se ha desarrollado en los apartados anteriores, cuando un sistema físico llega a su temperatura crítica, la longitud de correlación espacial  $\xi$  diverge. Pero esa no es la única característica particular del estado crítico. En numerosos sistemas se ha observado que el tiempo que tarda un sistema en relajarse al estado de equilibrio desde una fluctuación inicial es regido por una ley de potencias en el punto crítico, en lo que se conoce como *enlentecimiento crítico*.

Supóngase que a un tiempo  $t$  un sistema a temperatura constante sufre una fluctuación (apartamiento pequeño) de su estado de equilibrio. El tiempo característico  $\tau$  que tarda el mismo en perder toda memoria de ese apartamiento se conoce como tiempo de correlación. Este valor es por lo general grande a escala microscópica<sup>7</sup>, pero chico a escala macroscópica. Lejos del punto crítico  $\tau$  es finito[10], por lo que luego de ocurrida la fluctuación, alcanzado el tiempo de correlación la muestra se encontrará nuevamente en el estado de equilibrio.

Al tender la temperatura a  $T_c$ , el tiempo característico diverge, en analogía con lo ocurrido con la longitud de correlación. Por lo tanto, en el punto crítico las distintas configuraciones que pueden tener las partículas que componen la muestra nunca se independizan totalmente de efectos causados por fluctuaciones a tiempos anteriores. Más aún, debido al gran alcance de dichas fluctuaciones, el estado crítico resulta ser permanentemente fluctuante.

La función que mide cuantitativamente la influencia de las fluctuaciones a un tiempo  $t'$  sobre la configuración del sistema a un tiempo posterior  $t$  se llama *autocorrelación* y para un sistema magnético se define como:

$$A(t, t') = \frac{1}{L^d} \left\langle \sum_i s_i(t') s_i(t) \right\rangle, \quad (28)$$

donde los  $s_i$  son los momentos magnéticos o spines de las partículas. En un sistema en equilibrio y para tiempos lo suficientemente largos  $A(t, t')$  decae exponencialmente[14]:

$$A(t, t') \sim e^{-t/\tau}. \quad (29)$$

Por lo tanto, pasado el tiempo característico  $\tau$ , el sistema no guarda información de la configuración a  $t'$ .

Sin embargo, en el punto crítico se tiene que el valor de  $\tau$  diverge, provocando el *enlentecimiento crítico* que fue descrito arriba. Este enlentecimiento tiene consecuencias tanto en el comportamiento del estado de equilibrio como en la dinámica con la que se llega al mismo[14]. En el apartado siguiente se detallará más sobre esto último.

Al igual que lo ocurrido en el caso espacial, la divergencia del tiempo de correlación en el punto crítico puede modelarse mediante una ley de potencias. Debido a que tanto esa variable como la longitud de correlación divergen en  $T_c$ , es esperable que sus leyes de potencias de la temperatura reducida  $\epsilon$  estén relacionadas. Se introduce entonces el exponente  $z$ , conocido como exponente dinámico, que mide el comportamiento del tiempo de correlación en cercanías de la temperatura crítica[10]:

$$\tau \sim \xi^z, \quad (30)$$

donde  $\xi$  es la longitud de correlación que tiene como ley de potencias la dada por (10).

---

<sup>7</sup>Con *tiempo de escala microscópica* se quiere referir a un tiempo que es tan corto que sólo es relevante para efectos físicos a escala microscópica.



Ahora bien, en un sistema finito se tiene que en el punto crítico la longitud de correlación satura al tamaño  $L$ , por lo que la ley de potencias de  $\tau$  termina resultando:

$$\tau \sim L^z. \quad (31)$$

## 2.7. Dinámica de tiempos cortos en el punto crítico

Hasta aquí se han descrito todos sistemas en equilibrio, pero nada se ha dicho de la dinámica con la que estos alcanzan ese estado. La observación indica que en cercanías del punto crítico dicha dinámica sigue una ley de potencias, luego de alcanzado un tiempo microscópico  $t_m$ [12].

Para dar una idea del funcionamiento de los sistemas en el punto crítico durante el tiempo que lleva llegar al estado estacionario se suele ejemplificar con el siguiente experimento mental[1]: Supóngase que se tiene un sistema ferromagnético, modelado como una cantidad de dipolos magnéticos o spines fijos en el espacio. Se lo supone en su temperatura crítica  $T_c$ , inmerso en un campo magnético externo  $\mathbf{H}$ , el cual produce una cierta magnetización  $m_0$  en la dirección del campo. En  $t = t_0$  se elimina el campo  $\mathbf{H}$ , y el sistema queda con una magnetización inicial. A partir de entonces los spines comienzan a correlacionarse, mientras que la magnetización  $m(t)$  decrece a su valor de equilibrio. Sin embargo, debido a la divergencia del tiempo de correlación, en la temperatura crítica ocurre el llamado *enlentecimiento crítico*, que hace que la evolución de  $m(t)$  a tiempos grandes sea tan lenta que el equilibrio pueda llegar a no alcanzarse[12].

El tiempo que tardan los spines en correlacionarse partiendo de una magnetización  $m_0$  es una cantidad de tiempo finita, chica a escala macroscópica. Debido a la existencia de este intervalo de tiempo en donde las correlaciones aún no son demasiado grandes, inicialmente en la muestra ocurren efectos inesperados, relacionados con un comportamiento del tipo de campo medio dado por la magnetización inicial[12].

Al comienzo de la evolución temporal, la magnetización sorpresivamente aumenta con una ley de potencias del tiempo, en lo que se llama el incremento crítico inicial[14]. Al ganar mayor importancia las correlaciones entre dipolos, los efectos de campo inicial se pierden para dar lugar a la relajación global hacia el estado de equilibrio. Debido a la divergencia del tiempo de correlación en  $T_c$ ,  $m(t)$  decrece como una nueva ley de potencias del tiempo, con un exponente que es función del exponente dinámico  $z$ . Observaciones muestran que no sólo la magnetización, sino todas las funciones termodinámicas se comportan como leyes de potencias del tiempo en la dinámica hacia el estado estacionario en el punto crítico. Más aún, los exponentes con los que dichas funciones evolucionan están relacionados con los exponentes del sistema en equilibrio. Por lo tanto, se pueden comparar resultados obtenidos mediante estudios en el estado de equilibrio, con resultados provenientes de la caracterización de la dinámica[1].

El hecho de que la magnetización y otras funciones termodinámicas evolucionen hacia su valor de equilibrio como una ley de potencias del tiempo indica que en la temperatura crítica nunca hay una total pérdida de la memoria del estado inicial. Esto se debe tener en cuenta a la hora de buscar una expresión de escalamiento de tamaño finito que contemple tanto las leyes de potencias asociadas a la longitud de correlación como las asociadas al tiempo de correlación. De esta forma, para una dada función termodinámica (en este caso el momento  $k$ -ésimo de la magnetización) en una muestra de tamaño  $L$ , se propone la siguiente expresión dependiente de un parámetro de escala  $b$ :

$$m^{(k)}(\epsilon, t, L) \equiv \langle m^k(\epsilon, t, L) \rangle = b^{-\frac{k\beta}{\nu}} \tilde{m}^{(k)}(b^{-z}t, b^{\frac{1}{\nu}}\epsilon, b^{-1}L, b^{x_0}m_0). \quad (32)$$

Aquí  $\beta$  y  $\nu$  son los exponentes críticos conocidos para sistemas estáticos, y  $z$  es el exponente dinámico. Los dos primeros son independientes de las particularidades microscópicas del sistema

y la dinámica del mismo. Sin embargo, el valor de  $z$  sí depende del tipo de evolución hacia el estado de equilibrio, y de la disposición micorscópica de las partículas que componen al sistema. La variable  $x_0$ , por su parte, es un nuevo exponente, que mide la dependencia de los momentos con la magnetización inicial durante el régimen de tiempos cortos[1]. Es necesario aclarar que una expresión como la (32) es válida sólo en casos en que  $m_0$  sea pequeño comparado con el valor de  $m$  correspondiente al sistema totalmente ordenado[14].

La expresión (32) permite elegir el valor de  $b$  con libertad, de manera de poder modelar los distintos fenómenos físicos que ocurren en la evolución temporal del sistema. Si por ejemplo,  $b \equiv t^{1/z}$ , puede representarse lo observado para la magnetización  $m$  a tiempos cortos, cuando la muestra evoluciona desde una magnetización inicial pequeña. En ese caso, en la temperatura crítica  $\epsilon = 0$  se obtiene:

$$m(t) = t^{-\beta/\nu z} \tilde{m}(1, 0, t^{-1/z} L, t^{x_0/z} m_0) = t^{-\beta/\nu z} F(t^{x_0/z} m_0). \quad (33)$$

En la función  $F(x)$  se ha omitido la dependencia con  $L$ , ya que no es necesario caracterizarla por el momento. Nótese que el valor por el que se ha reemplazado a  $b$  resulta ser la relación inversa a la ley de potencias (30), correspondiente al tiempo de correlación  $\tau$ . Esto quiere decir que el valor

$$\xi_{t-c}(t) \sim t^{1/z},$$

puede ser pensado como la longitud de correlación dependiente del tiempo, pertinente en el régimen de tiempos cortos. En la temperatura crítica inicialmente<sup>8</sup> debe pasar que  $\xi_{t-c}(t)$  sea mucho menor que la longitud de correlación del estado de equilibrio,  $\xi_{eq} \sim \epsilon^{-\nu}$ . Por lo tanto, para estudiar efectivamente el aumento inicial de la magnetización durante la evolución temporal del sistema desde una condición inicial debe ocurrir que  $\xi_{t-c}(t) < \xi_{eq}$ <sup>9</sup>.

Para tiempos realmente cortos y magnetización inicial  $m_0$  pequeña puede hacerse el siguiente desarrollo[14]:

$$F(t, m_0) \simeq F(t, 0) + m_0 \left. \frac{\partial F}{\partial m_0} \right|_{m_0=0} + O(m_0^2). \quad (34)$$

El primer término en la expansión es  $F(t, 0) = 0$ [14]. Si se preserva sólo el término lineal en  $m_0$  y se efectúa un nuevo desarrollo, en este caso para  $t$  chico<sup>10</sup>, se obtiene:

$$F(t, m_0) \sim m_0 t^{x_0/z}. \quad (35)$$

Lo cual lleva a la conclusión de que para  $t^{x_0/z} m_0 \ll 1$  se tiene la siguiente ley de potencias del tiempo:

$$m(t) \sim t^\theta, \quad (36)$$

donde

$$\theta = \frac{(x_0 - \beta/\nu)}{z}.$$

Para conseguir una ley de potencias que represente el decrecimiento crítico ocurrido a tiempos más largos (cuando la longitud de correlación ya ha alcanzado un tamaño suficiente), se debe pedir que  $F(x) \sim cte$  cuando  $x \gg 1$ [1], con lo que se obtiene:

$$m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \quad (37)$$

---

<sup>8</sup>Con inicialmente en este caso se refiere al intervalo de tiempo donde la magnetización crece debido al efecto de campo medio por  $m_0$ .

<sup>9</sup>Donde t-c se refiere a tiempos cortos, y eq a estado de equilibrio.

<sup>10</sup>Se está asumiendo  $x_0/z > 1$ , pero esto debe ser así para que se reproduzca el resultado observacional de que la magnetización inicialmente tiene un *crecimiento crítico*.

Si la condición inicial del sistema es que este está totalmente ordenado ( $m_0 = 1$ ), en la temperatura crítica el mismo decaerá hacia el estado de equilibrio como la ley de potencias (37). Si, por el contrario, la magnetización inicial es pequeña, para  $t^{1/z} \ll \xi_{eq}$  habrá un crecimiento siguiendo la expresión (36). Al llegar a la zona donde  $m_0 t^{x_0/z} \sim 1$  se alcanzará un máximo[1], para luego decaer como la función (37).

Se pueden encontrar más relaciones de potencias dependientes del tiempo, que ayudan a determinar los diferentes exponentes críticos mediante gráficos en función del tiempo de escala doble logarítmica de puntos experimentales o provenientes de simulaciones computacionales. Por ejemplo, si se tiene en cuenta la ecuación (33) fuera del punto crítico, para  $m_0 t^{x_0/z}$  pequeño se puede realizar la expansión hecha para obtener (36) y así tener[14]:

$$m(t, \epsilon, m_0) = m_0 t^\theta F(t^{1/\nu z} \epsilon). \quad (38)$$

Derivando logarítmicamente con respecto a  $\epsilon$  y evaluando en la temperatura crítica se obtiene:

$$\left. \frac{\partial \ln(m)}{\partial \epsilon} \right|_{\epsilon=0} \sim t^{1/\nu z}. \quad (39)$$

Para hallar esta expresión debe asumirse que tanto  $F(t^{1/\nu z} \epsilon)$  como su derivada mantienen un valor mayor que 0 en  $\epsilon = 0$ , pero esto se verifica por el hecho de que el comportamiento observado para la magnetización en la dinámica de tiempos cortos es tal que dicha función toma valores finitos en ese punto<sup>11</sup>.

Se puede encontrar también una relación para las fluctuaciones de la magnetización, o sea:

$$\Delta m^{(2)}(t) = \langle m^2(t) \rangle - \langle m(t) \rangle^2,$$

que, de acuerdo con la definición de la susceptibilidad magnética (ecuación (4)) son proporcionales a  $L^{-d}$ , donde  $d$  es la dimensionalidad del sistema. Imponiendo  $b = t^{1/z}$  en (32) junto con  $\epsilon = 0$ ,  $m_0 t^{x_0/z} \ll 1$  y suponiendo  $\Delta m^{(2)}(t) \sim L^{-d}$ , se obtiene[1]:

$$\Delta m^{(2)}(t) \sim t^{(d-2\beta/\nu)/z}, \quad (40)$$

que, en caso de valer la relación de hiperescala  $\nu d - 2\beta = \gamma$  resulta ser:

$$\Delta m^{(2)}(t) \sim t^{\gamma/\nu z}. \quad (41)$$

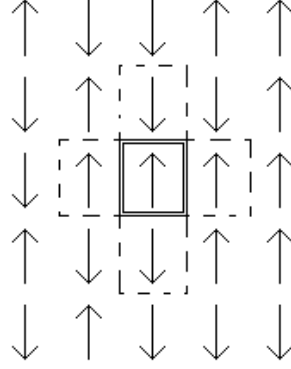
El cumulante  $U_2$  también tiene su ley de potencias con el tiempo asociada a la dinámica de tiempos cortos en la temperatura crítica. Realizando análisis de escaneo de tamaño finito se puede hallar que[14]:

$$U_2(t, L) \sim t^{d/z}, \quad (42)$$

donde  $d$  es la dimensionalidad del sistema. La misma ley de potencias se encuentra para el cumulante de Binder  $U_4$ .

---

<sup>11</sup>De otra manera no podría haber leyes de potencias para la magnetización en el punto crítico.



**Figura 3.** Esquema de un arreglo de spines en el Modelo de Ising. La línea punteada encierra a los primeros vecinos del spin demarcado con doble línea.

## 2.8. El Modelo de Ising

El Modelo de Ising es una manera simple de modelar un sistema ferromagnético. Es exitoso dado que mediante una regla de interacción entre dipolos magnéticos fijos o *spines*, predice la transición de fase que ocurre en un ferromagneto real a  $T_c$ . Por otra parte, en dos dimensiones tiene solución analítica, encontrada por primera vez por Onsager[4].

El Modelo de Ising consiste en un arreglo de  $N$  puntos equiespaciados que forman una red de dimensión  $d$  ( $d = 1, 2, 3$ ). En tres dimensiones el arreglo puede corresponder a un prisma, mientras que en dos, a un rectángulo. Alojada en cada sitio de la red hay una variable de spin  $s_i$ , que puede tomar los valores 1 o  $-1$ . Si para un dado  $i$  el valor es 1 se dice que el spin está hacia arriba, y si es  $-1$  se dice que está hacia abajo.

Un conjunto de números  $\{s_\nu\}$  representa una configuración particular del sistema. Dicha configuración, en presencia de un campo magnético externo  $H$ , tiene por energía la dada por el Hamiltoniano:

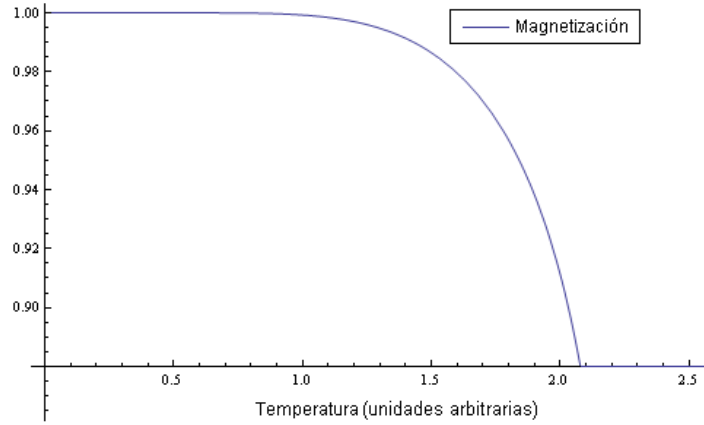
$$E\{s_\nu\} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i, \quad (43)$$

donde con  $\langle i, j \rangle$  se representa a los primeros vecinos (denotados con la letra  $j$ ) del spin  $i$ , y  $J > 0$  para que el modelo sea el de un ferromagneto<sup>12</sup>. A la constante  $J$  se la conoce como *constante de acoplamiento*. Este tipo de Hamiltoniano hace que en ausencia de un campo externo la energía dependa puramente de las interacciones entre partículas.

En la figura 3 se muestra un esquema de lo que es el modelo. Se ha representado a los spines con valor  $s_i = 1$  como flechas hacia arriba, y a los con valor  $s_i = -1$  como flechas hacia abajo.

Como se dijo arriba, uno de los logros del Modelo de Ising es que predice la transición de fase orden-desorden de un metal ocurrida a la Temperatura de Curie. Como cabe suponer, esa transición ocurre a una temperatura crítica  $T_c$ , que separa un estado donde los spines están ordenados (por debajo de esa temperatura), de otro donde están desordenados (por encima). Al igual que en otros modelos de la Mecánica Estadística, la regla de interacción introducida en el Hamiltoniano es la responsable

<sup>12</sup>Ya que de esta manera el estado de mínima energía es el estado ordenado



**Figura 4.** Gráfico de la magnetización en función de la temperatura para la solución del Modelo de Ising en dos dimensiones. Se ha tomado  $J/k_B = 1$ .

de que para diferentes temperaturas el comportamiento de la solución sea distinto<sup>13</sup>.

En el Modelo de Ising en dos dimensiones y tamaño infinito se puede ver que la transformación ocurrida en  $T_c$  deja continua la energía interna, por lo que no involucra un calor latente. El calor específico, también para dos dimensiones y tamaño infinito, diverge logarítmicamente en cercanías de ese punto. Esto está en concordancia con lo observado en metales, que tienen un crecimiento de esa variable al acercarse a la Temperatura de Curie. Por último, la magnetización por spin da en esas condiciones algo muy similar a lo esperado, con un valor nulo por encima de  $T_c$ , que corresponde al estado desordenado[4]. Por debajo de esa temperatura, hay un comportamiento funcional dado por una ley de potencias, en sintonía con la teoría de exponentes críticos desarrollada con anterioridad<sup>14</sup>:

$$m(0, T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \left(1 - \left(\frac{1}{\sinh(\frac{2J}{k_B T})}\right)^4\right)^{\frac{1}{8}} & T < T_c \end{cases} \quad (44)$$

La figura 4 muestra un gráfico de la función (44). En él se ve que para valores de temperatura mayores que  $\sim 2,27$  en unidades donde  $J/k_B = 1$  la magnetización se hace cero. Ese resulta ser el valor de la temperatura crítica, que para el Modelo de Ising en dos dimensiones se puede encontrar analíticamente y vale[15]:

$$T_c = \frac{J}{k_B} \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (45)$$

Durante este trabajo se utilizará siempre el sistema de unidades donde  $J/k_B = 1$ , por lo que las temperaturas serán adimensionales.

<sup>13</sup>Es oportuno aclarar que esta afirmación es sólo válida para  $d > 1$ , ya que en una dimensión se predice que en el Modelo de Ising no existe una transición de fase orden-desorden[4]

<sup>14</sup>Expresión válida solamente para el Modelo de Ising en dos dimensiones.

En el Modelo de Ising de dos dimensiones pueden calcularse exactamente algunos de los exponentes críticos. Los mismos son[1]:

$$\nu = 1,$$

$$\beta = \frac{1}{8},$$

y el valor del exponente  $\gamma$  puede calcularse usando la relación de hiperescala  $\gamma = d\nu - 2\beta = 7/4$ .

### 3. Simulaciones del Modelo de Ising con gradiente térmico

El objetivo de este trabajo es realizar una simulación computacional de un sistema físico que responda a las características del Modelo de Ising con las condiciones especiales de estar en presencia de dos focos térmicos en sus extremos. Por eso, resulta útil primeramente describir el modelo analítico que describe esta situación en un sistema continuo.

#### 3.1. La difusión del calor en una barra homogénea

Se considera una barra térmicamente aislada por los lados, homogénea, de longitud  $L$ . Los extremos de la barra se colocan en contacto con focos térmicos a distintas temperaturas. De acuerdo con la Ley de Fourier, ocurre entonces un flujo calorífico, dirigido desde los lugares de mayor temperatura hasta los de menor temperatura. La ecuación dinámica que gobierna este proceso es la ecuación de difusión del calor. En el caso en que los focos térmicos se encuentren en los extremos, sólo hay flujo calorífico en la dirección longitudinal, por lo que dicha ecuación queda reducida a una sola dimensión espacial y otra temporal:

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - K \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = 0 \quad u(0, t) = T_1, \quad u(L, t) = T_2, \quad (46)$$

donde  $u(x, t)$  es la función temperatura a lo largo de la barra, y  $K$  es conocida como la *conductividad térmica* del material. Como es de suponer, las temperaturas  $T_1$  y  $T_2$  que aparecen en las condiciones de contorno son aquellas a las que se encuentran los focos en los extremos.

Para largas escalas temporales, las partes dependientes del tiempo de la solución de la ecuación (46) caen asintóticamente, y la solución queda reducida a un gradiente térmico lineal:

$$u(x) = T_1 + \frac{(T_2 - T_1)}{L} x. \quad (47)$$

Relacionando este resultado con lo planteado en 2.8, si se tiene un sistema ferromagnético cuyos extremos están en contacto con dos focos a distintas temperaturas, se establecerá un gradiente térmico dado por la ecuación (47). La interacción entre dipolos magnéticos en el metal hará que las zonas cercanas a la temperatura más baja tengan una mayor tendencia a ordenarse que las zonas de temperatura alta. Si  $T_1$  y  $T_2$  son tales que la temperatura crítica del ferromagneto se encuentra entre ellos ( $T_1 < T_c < T_2$ ), es esperable que ocurra una transición de fase espacial en la zona en la que el sistema está a esa temperatura. Los spines del lado de  $T_1$  estarán ordenados entre ellos, mientras que los del lado de  $T_2$  estarán desordenados.

Colocando una temperatura que varíe linealmente en la coordenada longitudinal, el problema recién planteado podría tratarse con el formalismo del Modelo de Ising.

### 3.2. El método del gradiente en el Modelo de Ising

Se definió una red cuadrada de  $L \times L = N$  sitios, en los que a cada uno se asignó una variable de spin  $s_{i,j}$ , con valores posibles en el conjunto  $\{1, -1\}$ . Si un dado spin tiene valor 1, se dice que tiene orientación *hacia arriba*, mientras que si su valor es  $-1$ , posee orientación *hacia abajo*.

La configuración inicial del sistema, o sea, qué valores iniciales toman los spines inicialmente, se determinó mediante un generador de números aleatorios computacional: Para cada sitio se sorteó un número al azar entre 0 y 1, y se le asignó spin  $-1$  o  $1$  según el valor del número aleatorio fuera menor o mayor que 0,5. Para ciertos casos especiales se utilizaron otras condiciones iniciales, como por ejemplo spines totalmente ordenados (todos los spines con el mismo valor).

Luego de establecida la condición inicial se definió la temperatura a la que se encontraba el sistema. Teniendo en cuenta que el objetivo del trabajo es estudiar los fenómenos físicos ocurridos en el modelo de spines de Ising cuando este tiene sus extremos en contacto con focos a distintas temperaturas, se tomó el siguiente camino: Se dividió a la red en  $L$  columnas de  $L$  spines cada una, asignándole, a las 5 del extremo izquierdo y a las 5 del extremo derecho, dos temperaturas diferentes  $T_1$  y  $T_2$ , respectivamente.

El gradiente térmico ocurrido en el material según lo explicado en 3.1 se modeló fijando condiciones en la dirección longitudinal: A cada columna  $i$  de las  $L - 10$  entre las 5 de la izquierda a  $T_1$  y las otras 5 en el extremo derecho a  $T_2$ , se le asignó una temperatura calculada de la siguiente manera:

$$T(i) = T_1 + \frac{(T_2 - T_1)}{L} i \quad (48)$$

Donde  $i$  toma valores entre 6 y  $L - 5$ . De esta forma cada columna tiene una temperatura tal que entre todas forman un gradiente escalonado de pendiente lineal que va desde  $T_1$  en  $i = 5$  hasta  $T_2$  en  $i = L - 4$ .

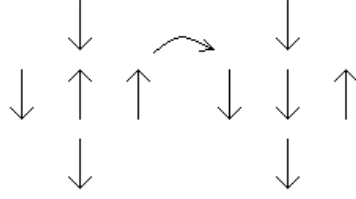
Luego de establecidos los parámetros iniciales, se fijaron condiciones de contorno para el sistema. Las mismas se eligieron periódicas en la dirección vertical, para disminuir los efectos de superficie en esa dirección. Por lo tanto, un spin que se encontrara en la primera fila de la red interactuaría con el spin de la misma columna pero de la última fila como si este estuviera arriba de él. No se impusieron condiciones periódicas en la dirección longitudinal debido a la presencia del gradiente térmico, que rompe la invarianza traslacional en ese sentido. Para impedir cualquier interacción entre la primera y la última columna, se fijaron como cero los spines de la primera.

Se prosiguió entonces a hacer evolucionar el sistema en el tiempo. Para eso se eligió una regla de interacción entre spines, que, como es de esperar, estuvo dada por aquella que se define para el Modelo de Ising en la expresión (43). De esta forma, al spin  $s_{i,j}$  se le asoció una energía  $\varepsilon_{i,j}$  definida como:

$$\varepsilon_{i,j} = -s_{i,j}(s_{i+1,j} + s_{i-1,j} + s_{i,j+1} + s_{i,j-1}) \quad (49)$$

donde se ha tomado a la constante de acoplamiento  $J$  que aparece en (43) como igual a 1. Analizando la expresión (49), puede verse que en un sitio de la red el spin correspondiente tendrá un valor de energía perteneciente al conjunto  $\{-4, -2, 0, 2, 4\}$ . Nótese que si ese spin tiene la misma orientación que sus primeros vecinos (o sea, todos tienen el mismo valor en la variable de spin), entonces posee energía negativa. Esto quiere decir que este sistema, al intentar llevar su energía al mínimo valor posible, hará tender a los momentos magnéticos a un ordenamiento total. Este hecho está de acuerdo con lo esperado para un ferromagneto como el que se quiere modelar.

Yendo a la simulación computacional propiamente dicha, la evolución constó de varios pasos que se iban repitiendo, de manera de ir llevando al sistema a su estado de equilibrio. Se utilizó para eso



**Figura 5.** Ejemplo de transición espontánea: En su vecindad el spin central tiene mayoría de momentos antiparalelos con respecto a él, por lo que invierte su orientación para disminuir la energía del sistema.

el algoritmo de Metropolis. Partiendo de una configuración inicial, las seis etapas básicas en dicho algoritmo son[5]:

1. Se selecciona un spin  $s_{i,j}$  de la red haciendo uso del generador de números aleatorios.
2. Se evalúa la posibilidad de que ese spin cambie su orientación, o sea, que ejecute una transición  $s_{i,j} \rightarrow -s_{i,j}$ . Para eso se calcula el cambio en su energía  $\Delta\varepsilon$  que implica dicha transición. Las energías inicial y final se calculan haciendo uso de la expresión (49), que tiene en cuenta a los vecinos más próximos. Nótese que si el spin  $s_{i,j}$  pasa de estar en una configuración desordenada a una ordenada con respecto a sus primeros vecinos entonces  $\Delta\varepsilon$  es negativa. Pero si pasa lo contrario,  $\Delta\varepsilon$  es positiva.

3. Se calcula la probabilidad  $W$  asociada al cambio de orientación del spin. Dicha probabilidad está definida como:

$$W = e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}}. \quad (50)$$

Que está íntimamente relacionada con la probabilidad de transición entre estados en el ensemble canónico de la Mecánica Estadística[8]. La temperatura  $T$  es un parámetro que debe fijarse de antemano en la simulación, y en el presente caso depende de cuál es la columna en la que se encuentra el spin seleccionado.

4. Se sortea un nuevo número aleatorio  $x$  entre 0 y 1.
5. Si  $x < W$ , la transición del spin ocurre; en otro caso, no.
6. Se guarda la configuración resultante del sistema, y se repite todo desde el primer paso con un nuevo spin  $s_{i',j'}$ .

Se definió como un nuevo paso del programa o paso de Monte Carlo<sup>15</sup> cada vez que se realizaron las seis etapas de Metropolis un número de veces igual al de partículas que tenía la red, o sea,  $L \times L$  veces. De aquí en más, se le llamará *tiempo* al número de pasos realizados hasta llegar a una dada configuración.

El primer punto a tener en cuenta en la descripción del método de Metropolis es el hecho de que si la transición es tal que ordena al spin  $s_{i,j}$  con respecto a sus vecinos entonces el valor de  $W$  es

<sup>15</sup>En referencia al Método de Monte Carlo, desarrollado por John von Neumann, Stanislaw Ulam y Nicholas Metropolis en los años cuarenta del siglo XX, que basa su optimización en el uso de números aleatorios.



mayor que 1. Esto hace que para cualquier número aleatorio  $x$  se tiene que  $W > x$ . Por lo tanto las transiciones que ordenen al sistema son espontáneas en el método de Metropolis para el Modelo de Ising ferromagnético. Si, por el contrario, la transición desordena a los spines, es necesario comparar  $x$  con  $W$  ya que en ese caso esta última sí resulta menor que la unidad. En otras palabras, esa transición no es espontánea. En la figura 5 se da un ejemplo de transición espontánea.

Es importante notar también el papel que juega la temperatura en el algoritmo. Para la transición no espontánea, un valor mayor de  $T$  implica una mayor probabilidad de transición, por lo que si la temperatura es alta será casi igual de probable que el sistema ejecute transiciones espontáneas como no espontáneas, lo que producirá un incipiente desorden en el mismo. Por otro lado, si la temperatura es baja, la probabilidad  $W$  será menor, haciendo más difíciles las transiciones que desordenen el sistema.

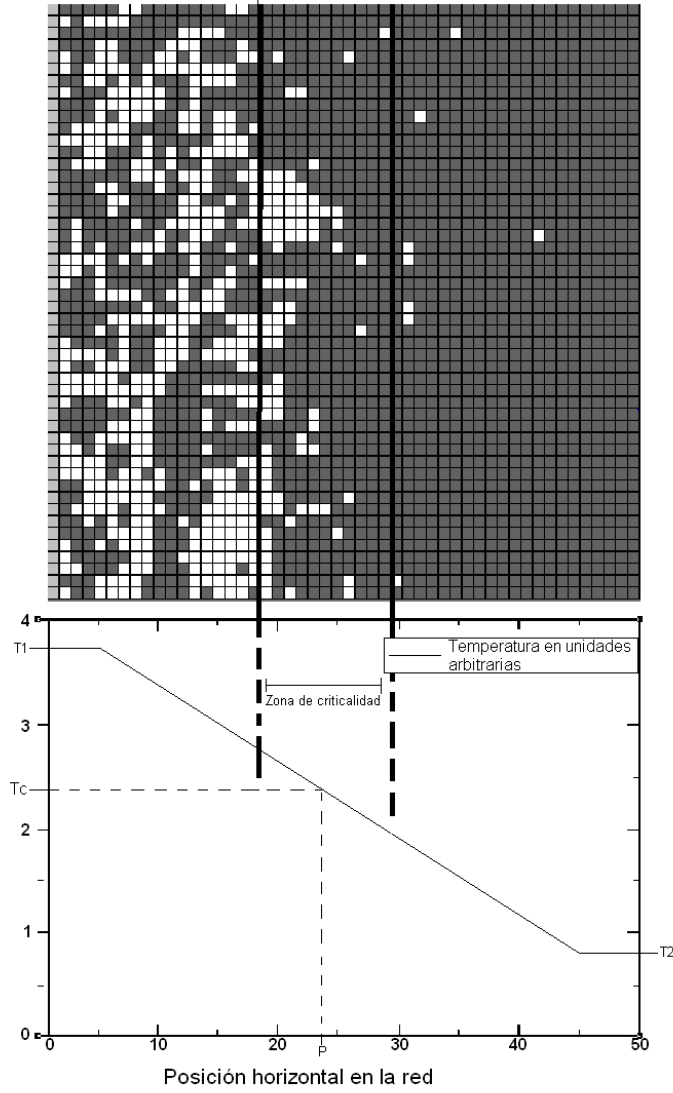
Estos hechos planteados hacen que el algoritmo de Metropolis aplicado a un sistema de Ising reproduzca los resultados analíticos explicados brevemente en 2.8, en los que se tiene que por debajo de la temperatura crítica  $T_c$  el sistema se ordena espontáneamente, mientras que por encima se desordena. De hecho, la temperatura crítica que se halla por este método computacional es la misma que la dada por la expresión analítica (45).

Además de la concordancia con la teoría, es importante destacar que en un sistema magnético anisotrópico real, el débil acoplamiento entre momentos dipolares y las vibraciones de red produce transiciones en los dipolos[5]. Esto hace que el de Metropolis sea un buen algoritmo a la hora de querer modelar experimentos con sistemas ferromagnéticos mediante simulaciones computacionales. A diferencia de lo explicado para el algoritmo de Metropolis general, en este trabajo no se fijó una única temperatura para toda la red. Tal como se describió con anterioridad, lo que se hizo en este caso fue definir un gradiente térmico en la dirección longitudinal entre las temperaturas  $T_1$  y  $T_2$ , asignándole a cada columna de la red una temperatura dada por la ecuación (48). Por lo tanto, es de esperar que si la temperatura crítica  $T_c$  está entre  $T_1$  y  $T_2$ , luego de suficientes pasos efectuados por la simulación, algunas partes del sistema estén ordenadas y otras desordenadas. En la figura 6 se muestra una imagen del sistema simulacional donde se puede apreciar el desorden creciente con el aumento de  $T$ . Acompaña un gráfico del gradiente térmico.

A partir de la iniciación de la simulación y cada ciertos intervalos de tiempo, se fueron guardando las configuraciones y midiendo las diferentes cantidades relevantes para caracterizar el estado del sistema. Debido a la presencia del gradiente térmico, que le da diferente probabilidad de transición a partículas que no se hallen en la misma columna, todas las cantidades definidas son cantidades *por columna*. Es decir, para cada posición en  $i$  se midió un perfil de la variable física requerida, pero no se sumaron contribuciones de distintas columnas.

Un aspecto a tener en cuenta al forzar el gradiente en el Modelo de Ising y utilizar el algoritmo de Metropolis es que se está trabajando con un sistema fuera del equilibrio. Físicamente lo que se tiene no es una muestra con sus extremos en contacto con focos térmicos, sino más bien un sistema con toda su superficie en contacto con una fuente térmica con una distribución de temperaturas dada por (48). De esta forma, cada columna está en equilibrio con la sección de la fuente térmica en contacto con ella, pero no con las otras columnas de la red de Ising.

Existe un algoritmo que trata este problema desde otro punto de vista, desarrollado originalmente por Michael Creutz[16]. El mismo no posee la temperatura como un parámetro fijo, sino que simula un sistema de energía constante agregando un grado de libertad extra que entrega o toma energía de los spines cuando estos cambian sus orientaciones. La temperatura se encuentra entonces como una función de la cantidad de energía promedio almacenada fuera de la red por el grado de libertad extra. Si bien este método puede ser usado para tratar sistemas en contacto con focos térmicos



**Figura 6.** Diagrama de la red de Ising usada en las simulaciones (arriba), seguida de un gráfico del perfil de temperaturas en función de la posición horizontal en la red (abajo). Los cuadrados negros corresponden a spines con valor  $s_{i,j} = 1$  y los blancos a spines con  $s_{i,j} = -1$ . La columna de cuadrados grises corresponde a los spines definidos como 0 para romper condiciones de contorno periódicas en la dirección del gradiente. En la cuadrícula puede apreciarse que la zona más cercana a  $T_2$  está ordenada, mientras que la zona cercana a  $T_1$  está desordenada. Esto es así porque se eligió  $T_1 > T_c > T_2$ . La dirección del gradiente es la opuesta a la que se usó en la sección resultados, donde la elección fue  $T_1 < T_c < T_2$ . En la zona de la red demarcada con dos líneas gruesas ocurre el comportamiento crítico del sistema. El punto  $P$  en el gráfico es la posición de la temperatura crítica.

en sus extremos[17], en este trabajo se quiso implementar un gradiente por método de Metropolis para así conocer su versatilidad ante condiciones de temperatura no uniforme.

## 4. Resultados obtenidos

### 4.1. Las funciones estudiadas

Se realizaron simulaciones en diferentes tamaños, desde  $L = 300$  hasta  $L = 1600$ . Como ya se ha señalado, un sistema de tamaño  $L$  consta de  $N = L^2$  spines, equiespaciados formando una red cuadrada.

Debido a la presencia del gradiente en la dirección longitudinal, todas las funciones estudiadas fueron perfiles en la columna. Por ejemplo, el perfil del momento  $n$  de la magnetización en la columna  $i$  ( $1 \leq i \leq L$ ) se definió como:

$$m_i^n(T(i), L, t) = \left( \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L s_{i,j}(t) \right)^n, \quad (51)$$

donde la dependencia de la temperatura  $T$  con la posición  $i$  es la dada por la ecuación (48). El tiempo  $t$ , por su parte, se refiere al número de pasos de Monte Carlo previos al muestreo de los datos, por lo que es una variable discreta. Nótese que ante el cambio de orientación de uno de los spines, el valor de la suma dentro de (51) varía en 2.

Todas las funciones caracterizadas en este trabajo son combinaciones de los momentos del perfil de magnetización por columna. A partir de aquí expresiones como  $m(T)$ ,  $\chi(T)$ , etc., se referirán a los perfiles por columna de las correspondientes funciones, y  $T$  indicará la temperatura a la que se encuentra la columna que se esté estudiando. Por lo tanto, si se tiene por ejemplo  $m(T_a)$  y  $m(T_b)$ , estas dos funciones son el perfil de magnetización para dos columnas diferentes, una a  $T_a$  y la otra a  $T_b$ .

Los perfiles de magnetización y sus momentos se normalizaron de tal manera que valieran 1 en el estado de orden total. La temperatura se definió en las unidades donde  $J/k_B = 1$ , por lo que es adimensional.

### 4.2. Dinámica de tiempos cortos

#### 4.2.1. Detalles técnicos de las simulaciones

Para las mediciones de los perfiles de funciones termodinámicas en el régimen de tiempos cortos se tuvo que tener especial cuidado con las condiciones iniciales. Esto se debe a que las leyes de potencias explicadas en 2.7 dependen de cuáles son las características del sistema antes de ser inicializada la simulación. A saber, se utilizaron tres tipos de condiciones diferentes:

1. Condiciones iniciales ordenadas. Los perfiles de magnetización inicial por columna son  $m_i \equiv 1, \forall i$  (donde con  $i$  se refiere a la posición horizontal en la red) y todos los spines tienen la misma orientación.
2. Condiciones iniciales totalmente desordenadas. Los perfiles de magnetización inicial son  $m_i \equiv 0, \forall i$ , y los spines de cada columna están desordenados entre ellos.

3. Condiciones de magnetización inicial pequeña. Los perfiles de magnetización iniciales son  $m_i \equiv m(t=0), \forall i$ , con  $m(0) \ll 1$ . Los spines están desordenados, pero existe un cierto orden en cada columna que produce el perfil inicial deseado.

Las condiciones iniciales ordenadas se usaron para caracterizar el comportamiento dinámico en cercanías de la temperatura crítica del perfil de magnetización, su derivada logarítmica, y el perfil del cumulante  $U_2(t)$ . De las simulaciones con condiciones iniciales desordenadas, por su parte, se obtuvo información de la dinámica de tiempos cortos de las fluctuaciones del perfil de magnetización. Por último, de la dinámica desde condiciones iniciales de magnetización  $m(0) \ll 1$  se caracterizó el incremento crítico inicial.

Se midieron directamente los perfiles de magnetización, y sus momentos segundo y cuarto. Por medio de la observación de las series temporales se vio que la dinámica de tiempos cortos como ley de potencias en el punto crítico ocurría en el intervalo de tiempo entre los 100 y aproximadamente  $\sim 2000$  pasos de Monte Carlo. La cota superior de dicho intervalo dependía del tamaño de la red, teniendo valores más grandes para  $L$  mayores. Alcanzado ese tiempo el comportamiento resultaba ser exponencial, tal como se indica en [14].

En las simulaciones donde se estudia la evolución temporal del sistema no se pueden hacer promedios en el tiempo, por lo que las fluctuaciones tienden a ser significativas y pueden influir en el resultado. De manera de eliminar ese problema se hacen promedios de ensamble, es decir, se inicializan muchas simulaciones diferentes y luego se promedia entre todos los resultados. Para lograr valores distintos en las simulaciones computacionales por método de Monte Carlo basta con cambiar la semilla con la que se pone a trabajar al generador de números aleatorios. Bajo estas consideraciones, en este trabajo cada serie temporal se promedió unas 5000 veces y así se eliminaron artefactos debidos a fluctuaciones y se dio más precisión a los resultados.

Debido al hecho de que el tiempo que tarda el sistema en relajar depende del tamaño, es importante tener en cuenta que en el estudio de la dinámica de tiempos cortos los resultados para distintos valores de  $L$  deben tratarse por separado.

Finalmente se operó sobre los perfiles conseguidos mediante las simulaciones, para obtener los perfiles por columna de las funciones cuyas leyes de potencias con el tiempo en  $T_c$  fueron descriptas en 2.7.

#### 4.2.2. Resultados

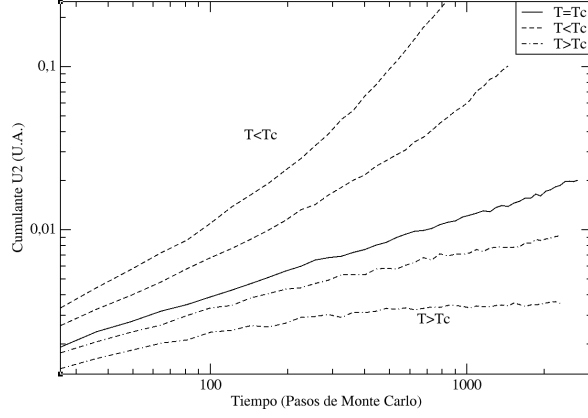
La temperatura crítica del sistema puede encontrarse, en el régimen de tiempos cortos, como la correspondiente a la distribución de puntos medidos de la evolución temporal del perfil de una función dada que tenga un comportamiento lo más parecido posible a una ley de potencias [1]. Esta búsqueda cualitativa se hace con gráficos de escala doble logarítmica, ya que de esta manera la curva crítica es la que tiene una forma lineal.

En la figura 7 se muestra el resultado obtenido en este trabajo, para el cumulante  $U_2(t)$  partiendo de una configuración totalmente ordenada, en una red de tamaño  $L = 1000$ .

La temperatura crítica encontrada por este método resulta ser:

$$T_c = 2,2691(3),$$

que dentro de la incertidumbre coincide con el valor para la temperatura crítica del Modelo de Ising en dos dimensiones (ver (2.8)). Dicha incertidumbre se calculó usando la propia diferencia de temperaturas entre perfiles. Se encontró que para las simulaciones en el régimen de tiempos cortos,



**Figura 7.** Perfiles del cumulante de segundo orden  $U_2$  para distintas temperaturas. La curva negra tiene una forma lineal, por lo que corresponde a una temperatura cercana a  $T_c$ .

todos los perfiles de funciones termodinámicas tenían su comportamiento dinámico crítico en esa temperatura.

En la figura 8 se muestra el resultado obtenido para la temperatura crítica hallada con el cumulante en todas los perfiles estudiados del sistema con condición inicial totalmente ordenanda. Los mismos son el perfil de magnetización, el de su derivada logarítmica, y el del cumulante  $U_2$ . Cada uno cuenta con su correspondiente ajuste de ley de potencias, que devuelve el valor del respectivo exponente crítico de dinámica de tiempos cortos. Las incertidumbres se calcularon realizando ajustes a los datos de los perfiles provenientes de las columnas adyacentes a la de la temperatura crítica. Se usó una red de tamaño  $L = 1000$ .

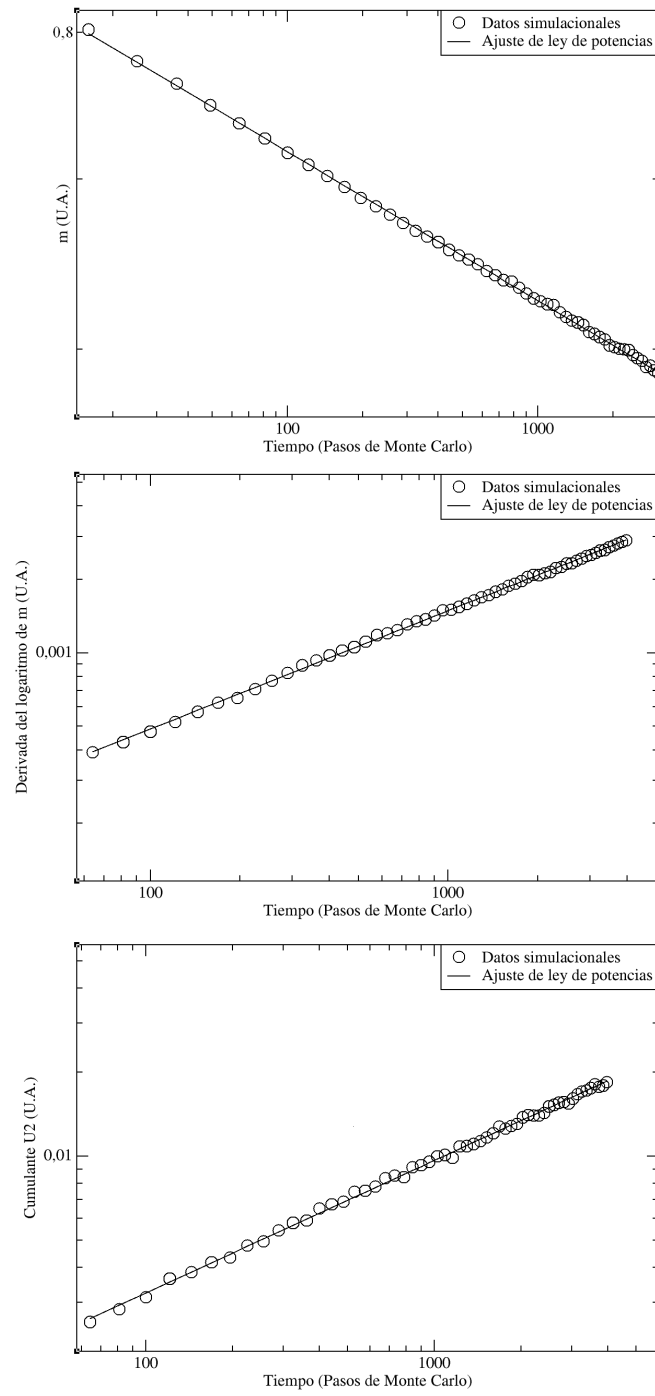
Los resultados obtenidos para los exponentes del perfil de magnetización, la derivada logarítmica, y el cumulante de segundo orden, respectivamente, son:

$$\begin{aligned}\frac{\beta}{\nu z} &= 0,058(1), \\ \frac{1}{\nu z} &= 0,4851(4), \\ \frac{d}{z} &= 0,474(6).\end{aligned}$$

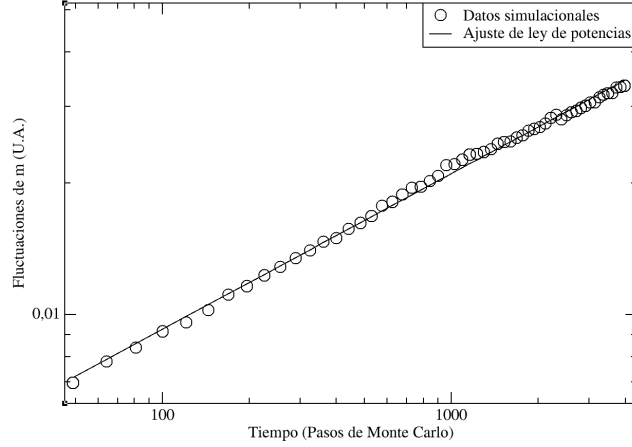
Remitirse a la sección 2.7 para obtener detalles de la deducción dde estos exponentes.

Para la dinámica de tiempos cortos desde una condición inicial totalmente desordenada también se comprobó que la temperatura crítica encontrada anteriormente correspondía a una ley de potencias en el tiempo. Sin embargo, dado que desde una condición inicial desordenada los perfiles de magnetización fluctúan alrededor de cero sin ningún comportamiento particular, la comprobación se hizo usando el perfil del segundo momento,  $m^2(t)$ .

Se calcularon los perfiles de las fluctuaciones de la magnetización,  $\Delta m^{(2)}(t) = \langle m^2(t) \rangle - \langle m(t) \rangle^2$ , que como se ha señalado a lo largo de este trabajo, son proporcionales a los perfiles de susceptibilidad magnética. En la figura 9 se muestra el resultado obtenido para el perfil correspondiente a la temperatura crítica, en una red de tamaño  $L = 1000$ , con su respectivo ajuste de leyes de potencias que da el valor del exponente dinámico crítico presentado en la ecuación (41). Las incertidumbres se determinaron de la misma manera que en el caso de condiciones iniciales ordenadas.



**Figura 8.** Gráficos de los perfiles de magnetización, derivada logarítmica y cumulante de segundo orden para la temperatura crítica desde una condición inicial totalmente ordenada.



**Figura 9.** Gráfico del perfil de las fluctuaciones de la magnetización para la temperatura crítica desde una condición inicial totalmente desordenada.

El valor del exponente encontrado es:

$$\frac{\gamma}{\nu z} = 0,3570(4).$$

Se estudió además el crecimiento crítico inicial, ocurrido cuando la condición a  $t = 0$  consiste en perfiles de magnetización con valor  $m(0) \ll 1$ . Para eso se realizaron simulaciones con distintos perfiles iniciales, y para cada uno se determinó el valor del exponente dinámico  $\theta$  (introducido en 2.7) correspondiente. La columna en la que se encontró la criticalidad corresponde nuevamente a la temperatura hallada con los otros métodos. En la figura 10 se muestra un gráfico de los datos del perfil de magnetización en  $T_c$  para distintos perfiles iniciales. Vienen acompañados por sus respectivos ajustes de ley de potencias, que dan como resultado diferentes valores para el exponente  $\theta$ .

Dado que el exponente  $\theta$  se definió mediante un desarrollo de  $m(0) \rightarrow 0$  (ecuación (34)), su exacto valor debe conseguirse extrapolando a  $m(0) \rightarrow 0$  los  $\theta$  conseguidos con los ajustes a los datos de las simulaciones. En la figura 11 se exhibe el resultado de la extrapolación lineal.

El valor de  $\theta$  así conseguido es:

$$\theta = 0,196(6),$$

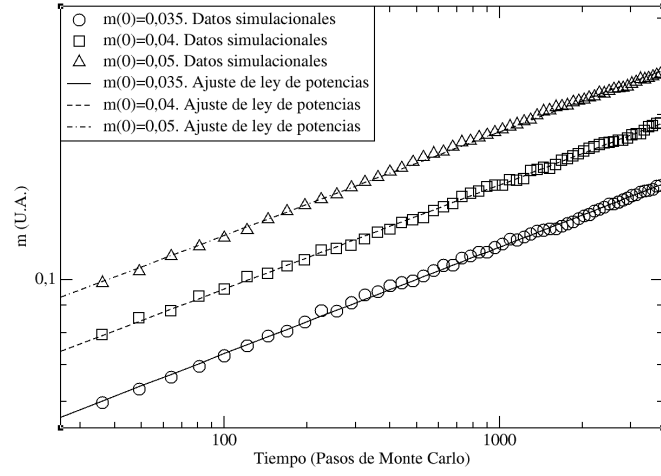
donde las incertidumbres se calcularon haciendo extrapolaciones de los valores de exponente para los perfiles de magnetización de las columnas adyacentes a la crítica.

### 4.3. Régimen estacionario

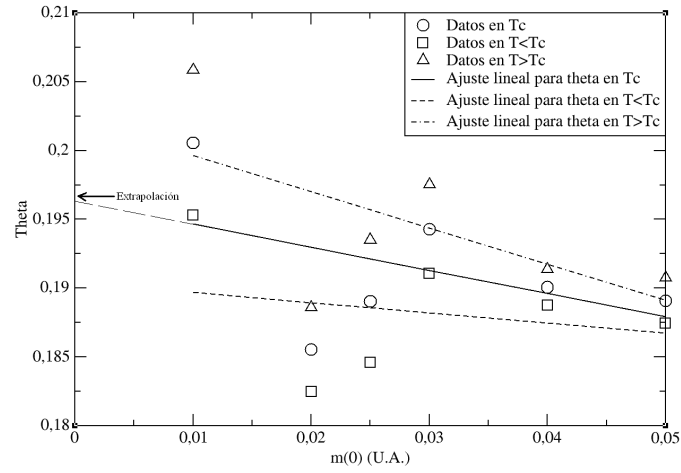
#### 4.3.1. Detalles técnicos de las simulaciones

Se midieron el perfil de magnetización por columna, y sus momentos segundo y cuarto. Dado que un sistema con magnetización  $m$  tiene el mismo tipo de orden que uno con  $-m$ , se estudiaron los módulos de dichos perfiles.

Debido a que se deseaba estudiar sistemas en régimen estacionario, cada simulación debió contar con una gran cantidad de pasos de Monte Carlo previos a la colecta de datos. Analizando las



**Figura 10.** Gráfico del perfil de magnetización para la temperatura crítica en función del tiempo, en una red de tamaño  $L = 1000$  y para diferentes valores de los perfiles de magnetización inicial  $m(0)$ .



**Figura 11.** Ajuste lineal de los valores de  $\theta$  encontrados (círculos) en función de los  $m(0)$  correspondientes. Las curvas mínima y máxima se hicieron a partir de los valores de  $\theta$  calculados para las columnas adyacentes a la de la temperatura crítica (rombos y cuadrados) y se usaron para estimar la incertidumbre.



series temporales se determinó que tras  $5 \cdot 10^5$  pasos el valor del perfil de magnetización y sus momentos fluctuaba con apartamientos pequeños alrededor de un valor medio, que dependía de la tempearuta a la que se encontraba la columna estudiada. Por lo tanto, para cada función se midieron y promediaron todos los valores que iba tomando en el intervalo de tiempo entre  $5 \cdot 10^5$  y  $10^6$  pasos. A esto se le denomina promedio temporal de la función.

De manera de contar con resultados dotados de una mayor precisión estadística se realizó además un promedio de ensamble. Es decir, promedios temporales provenientes de distintas simulaciones con las mismas características pero con una distribución inicial diferente<sup>16</sup> promediados entre ellos. Las temperaturas de los bordes derecho e izquierdo del sistema se eligieron de tal manera que la temperatura crítica del Modelo de Ising en dos dimensiones ( $\sim 2,269$  en unidades en las que  $J/k_B = 1$ ) estuviera entre ellas. Se usaron  $T_1 = 0,64$  y  $T_2 = 3,4$ , estableciendo las primeras 5 columnas a  $T_1$  y las últimas 5 a  $T_2$ . La distribución térmica en la red se definió mediante la expresión (48). Nótese que esta elección produce imágenes opuestas a la mostrada en la figura 6, ya que ahora la zona de desorden se encuentra a la derecha del gráfico, y la de orden, a la izquierda. Las temperaturas medidas son aquellas que cumplen con la relación (48), o sea, hay una columna del sistema a esa temperatura. Para estudiar perfiles de funciones evaluados en temperaturas que se encuentren en el intervalo entre las de dos columnas, debe hacerse una interpolación entre valores de los perfiles calculados a temperaturas medidas.

#### 4.3.2. Resultados

Los perfiles de magnetización por columna obtenidos muestran, como es de esperar, un comportamiento ordenado en las zonas por debajo de la zona crítica, y un comportamiento desordenado en las zonas encima de la misma. En la figura 12 se exhibe el resultado obtenido para algunos tamaños. En temperaturas altas se pueden apreciar los efectos por confinamiento que mantienen distinta de cero la magnetización.

La mencionada zona crítica es la parte del sistema donde el comportamiento no puede definirse como de orden o desorden predominante. La temperatura crítica se encuentra en el interior del intervalo de temperaturas que definen dicha zona. Como se puede apreciar en la figura 12, ese rango está ubicado en la parte central del sistema, y corresponde al intervalo de temperaturas entre  $T \sim 2,0$  y  $T \sim 2,5$ .

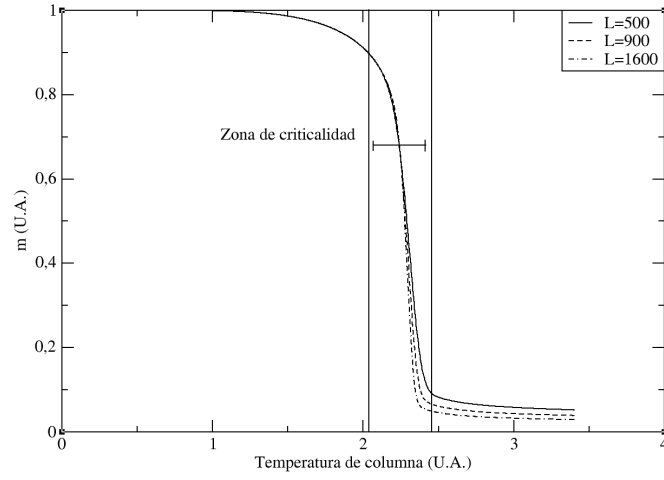
Se midieron también los perfiles segundo y cuarto de la magnetización, detallados juntos en la figura 13 para el tamaño de  $L = 1000$ .

De manera de encontrar la temperatura crítica se graficaron, para cada tamaño, los perfiles de los cumulantes  $U_2$  y  $U_4$  en función de la temperatura de columna. Se buscaron entonces los puntos de intersección de las curvas, que tal como se inidica en 2.5, corresponden a la temperatura crítica del sistema. En la figura 14 se muestra el resultado obtenido para ambas funciones en cercanías de la zona crítica.

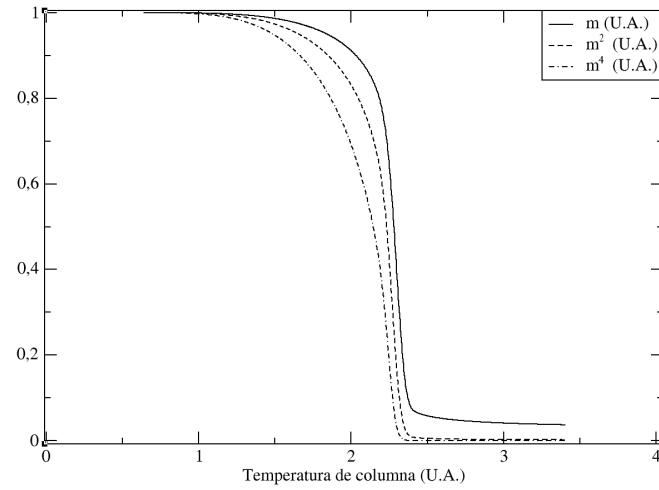
Si bien a primera vista curvas de la figura 14 parecen intersectarse todas en un mismo punto, un acercamiento muestra que la temperatura correspondiente al cruce entre los perfiles de cumulante de dos tamaños diferentes aumenta para tamaños mayores. Se asume que esto se debe al efecto de contribuciones de órdenes superiores en la dependencia de las funciones con  $L$ , tales como las mostradas en la ecuación (9).

Dado que lo que se quiere es encontrar la temperatura crítica extrapolada a un sistema de tamaño infinito, se graficaron los puntos de intersección  $T_{int}(L_1, L_2)$  encontrados en las gráficas en función del co-

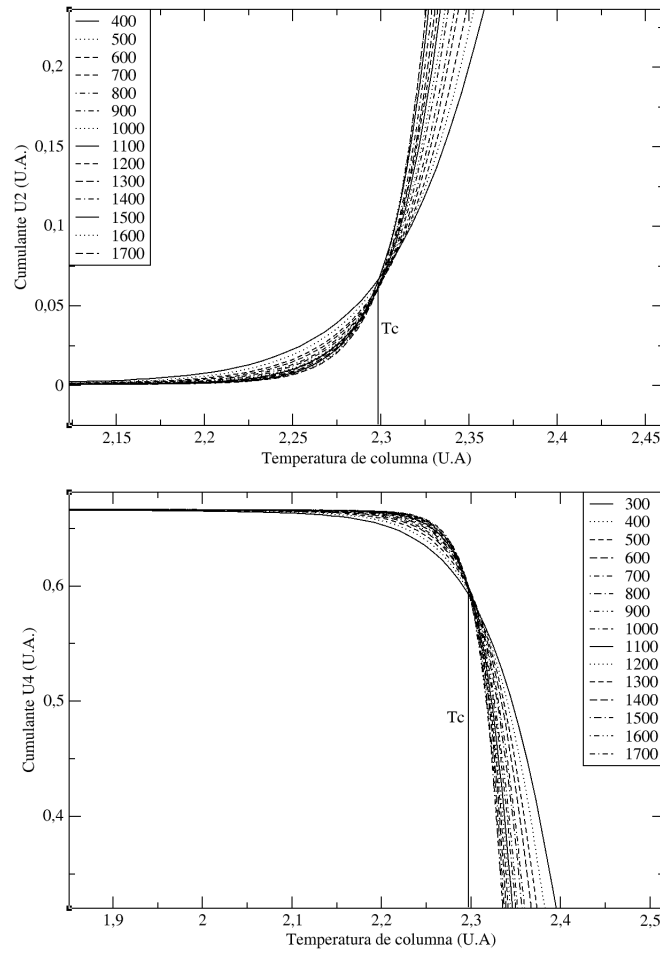
<sup>16</sup>Como se dijo antes, esto se consigue eligiendo distintas semillas para inicializar el generador de números aleatorios.



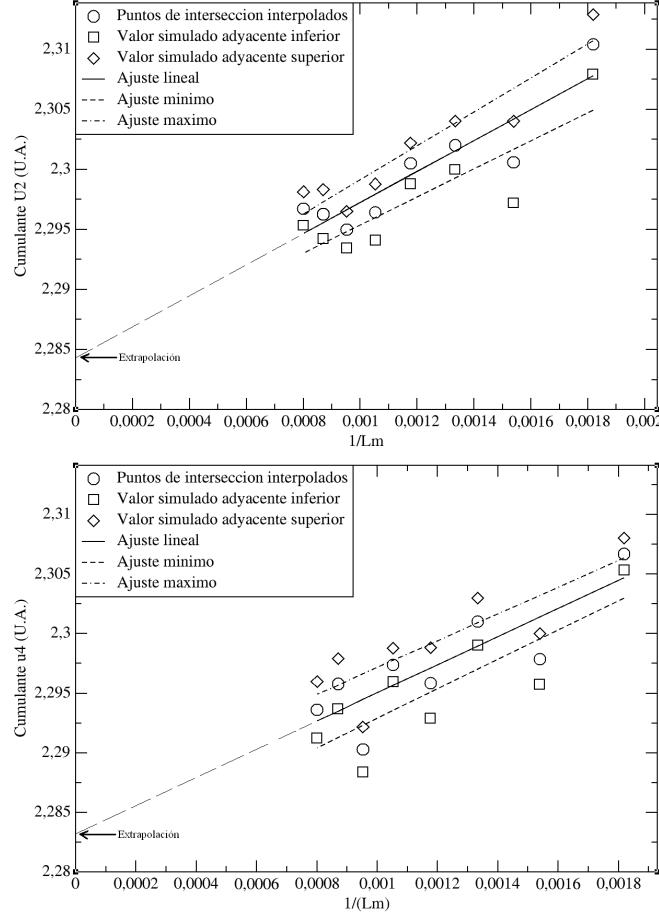
**Figura 12.** Gráfico del perfil de magnetización en función de la temperatura de columna para distintos tamaños. Entre líneas se demarca la zona del sistema donde ocurren los efectos de criticalidad. Nótese que cuanto mayor es el tamaño , menores son los efectos por confinamiento a temperaturas altas.



**Figura 13.** Gráfico del perfil de magnetización  $m$ , y sus momentos  $m^2$  y  $m^4$ , en función de la temperatura de columna, para una red de tamaño  $L = 1000$ .



**Figura 14.** Gráficos de los perfiles de cumulantes  $U_2$  y  $U_4$ , en función de la temperatura, para distintos tamaños. En ambos gráficos puede apreciarse que las curvas se cruzan en la zona crítica. Las curvas fueron realizadas con interpolaciones entre los datos de las simulaciones.



**Figura 15.** Extrapolación a tamaño infinito de las temperaturas de intersección  $T_{int}(L_1, L_2)$  de los perfiles de los cumulantes  $U_2$  y  $U_4$ , en función del cociente  $1/L_M = 2/(L_1 + L_2)$ . La curva del medio es el ajuste lineal a los valores interpolados de cruce entre curvas, representados por círculos. Los cuadrados y rombos son los datos de la simulación más cercanos a las intersecciones, con sus respectivos ajustes lineales. Los mismos se usaron para estimar las incertidumbres en el resultado extrapolado.

ciente  $1/L_M = 2/(L_1 + L_2)$ , donde  $L_1$  y  $L_2$  son dos tamaños consecutivos de los simulados. Luego se extrapoló linealmente el valor de temperatura de intersección para  $1/L_M \rightarrow 0$  que correspondería a la temperatura crítica de tamaño infinito.

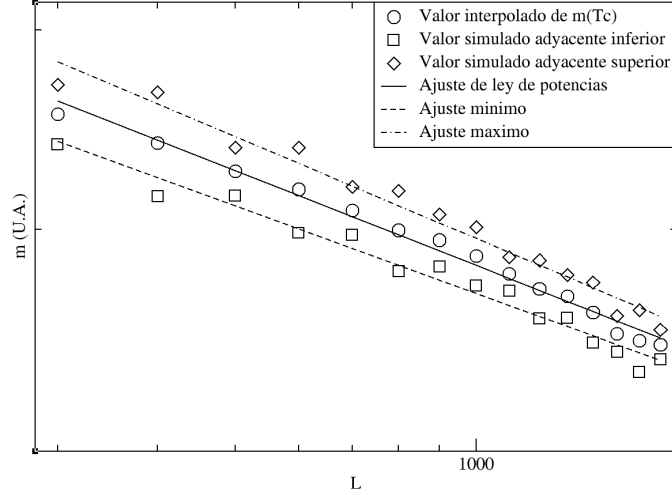
Por lo general los datos de cumulantes simulados no cayeron exactamente en los de puntos de intersección  $T_{int}(L_1, L_2)$ , por lo que dichos puntos debieron ser interpolados. Se utilizaron las distancias entre las intersecciones halladas y los datos simulados más cercanos para estimar la incertidumbre del resultado. En la figura 15 se muestran los gráficos de las extrapolaciones.

El valor de  $T_c$  obtenido extrapolando los puntos de corte de las curvas del perfil de  $U_2$  es:

$$T_c = 2,284(1),$$

mientras que el obtenido con  $U_4$  es:

$$T_c = 2,283(3).$$



**Figura 16.** Gráfico en escala doble logarítmica de los valores del perfil de magnetización interpolados para la temperatura crítica en función del tamaño del sistema. Se muestran además los valores de perfil de magnetización para las temperaturas simuladas más cercanas a la interpolada. Cada distribución cuenta con su ajuste de ley de potencias.

Las incertidumbres se calcularon como se explica arriba.

Independientemente de la búsqueda de la temperatura crítica del sistema, se estudió el comportamiento del perfil magnetización por columna  $m(T)$  en la zona de criticalidad. Como ya se dijo en 2.5, en  $T_c$  dicho comportamiento debe obedecer una ley de potencias dependiente de  $L$ , que en escala doble logarítmica es

$$\ln(m(L, T_c)) = -\frac{\beta}{\nu} \ln(L) + \ln(\tilde{m}(0)). \quad (52)$$

Por lo tanto, gráficos de  $\ln(m)$  en función de  $\ln(L)$  deben dar un comportamiento lineal en cercanías de  $T_c$ , con pendiente  $-\beta/\nu$ .

De los datos de las simulaciones de distintos tamaños se interpolaron valores del perfil de magnetización para diferentes puntos en la zona de comportamiento crítico del sistema. Se buscó entonces la temperatura para la cual se cumplía con mayor veracidad la relación lineal (52). En la figura 16 se muestra un gráfico con el resultado obtenido.

La distribución de puntos central en la gráfica corresponde a la interpolación del perfil de magnetización en función de  $L$  para la temperatura con la que mejor se aproxima la ecuación (52), con su correspondiente ajuste de ley de potencias que devuelve el valor del exponente crítico. Las otras dos distribuciones corresponden a los perfiles de magnetización determinados directamente de los puntos obtenidos con la simulación, para las temperaturas medidas superior e inferior a la interpolada. Con sus respectivos ajustes se definió la incertidumbre en el resultado. De esta forma, los valores determinados para el exponente  $\beta/\nu$  (deducido en la sección 2.5) y la temperatura  $T_c$  son:

$$\begin{aligned} \frac{\beta}{\nu} &= 0,125(9), \\ T_c &= 2,282(3). \end{aligned} \quad (53)$$

#### 4.4. Los exponentes críticos del Modelo de Ising en gradiente térmico

De los datos obtenidos con las simulaciones de dinámica de tiempos cortos y del sistema en estado estacionario surgen seis ecuaciones que combinándolas se pueden encontrar los tres exponentes estáticos  $\nu$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ , los dos exponentes dinámicos  $\theta$  y  $z$ , y la dimensionalidad del sistema  $d$ . Los exponentes fueron definidos en el marco teórico, aunque debe hacerse la aclaración de que a diferencia de lo desarrollado allí, los exponentes encontrados en este trabajo no son los de las funciones, sino de los perfiles por columna de las mismas. Los resultados son:

$$\begin{aligned}\nu &= 0,96(7), \\ \beta &= 0,120(2), \\ \gamma &= 0,736(1), \\ \theta &= 0,196(6), \\ z &= 2,16(4).\end{aligned}$$

Adicionalmente fue posible determinar la dimensionalidad  $d$  del sistema:

$$d = 1,02(8).$$

En todos los casos las incertidumbres se determinaron por el método de derivadas parciales a partir de las incertidumbres en los exponentes encontrados en las dos secciones anteriores. En la discusión se expone un análisis de estos resultados y se los compara con los valores provenientes de la bibliografía.

#### 4.5. Otra forma de encontrar la temperatura crítica

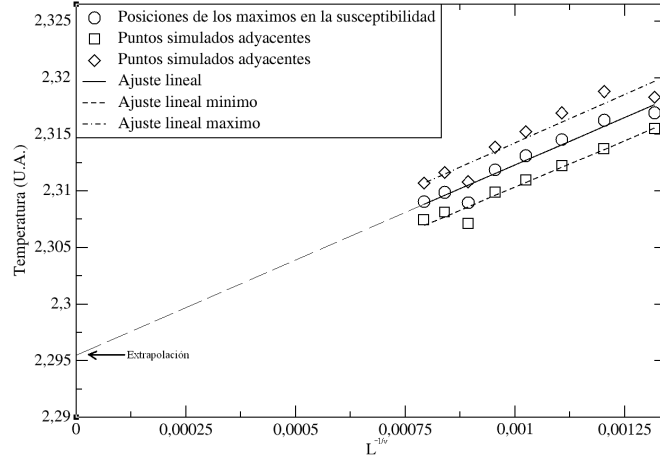
Habiendo hallado todos los valores de los exponentes críticos, es posible encontrar la temperatura crítica del sistema con un nuevo método. Utilizando la ecuación (24), que establece que

$$T_c(L) = T_c(\infty) + cte L^{-\frac{1}{\nu}}, \quad (54)$$

y conocido el valor de  $\nu$ , se puede hacer un gráfico de la temperatura pseudo-crítica de tamaño finito  $T_c(L)$  en función de  $L^{-1/\nu}$ , y extrapolar el valor de la temperatura crítica de tamaño infinito. Los valores de la temperatura pseudo-crítica pueden ser hallados midiendo las posiciones en temperatura de los máximos de los perfiles de susceptibilidad magnética en régimen estacionario en función del tamaño. En la figura 17 se muestra un gráfico para las posiciones de algunos máximos de la susceptibilidad, en función del cociente  $L^{-1/\nu}$ . El ajuste lineal del medio extrapola a  $T_c(\infty)$ , mientras que los ajustes mínimo y máximo otorgan las incertidumbres.

g El valor encontrado es:

$$T_c = 2,296(1) \quad (55)$$



**Figura 17.** Valores de las posiciones en temperatura de los máximos del perfil de susceptibilidad magnética (círculos), junto con los valores de perfil para las temperaturas adyacentes (cuadrados y rombos). El ajuste lineal central se usó para extrapolar  $T_c$ , mientras que de los lados para estimar la incertidumbre en ese valor.

## 5. Discusión

El exponente crítico  $\nu$  asociado a la divergencia de la longitud de correlación en el punto crítico dio como resultado un valor que dentro de la incertidumbre concuerda con el exponente predicho por la teoría[1] para el Modelo de Ising en dos dimensiones,  $\nu = 1$ . Algo similar puede decirse para el exponente crítico de la magnetización  $\beta$ , que si bien su intervalo de incerteza está afuera del valor teórico  $\beta = 0,125$ , concuerda en un 96 % con este.

El valor encontrado para  $\gamma$  concuerda en un 98 % con  $\gamma = 0,75$ , que corresponde a dicho exponente calculado mediante la relación  $d\nu - 2\beta = \gamma$  para  $d = 1$  con los exponentes críticos del Modelo de Ising de dos dimensiones. Este valor de la dimensionalidad del sistema se ve confirmado directamente por el resultado de  $d$  calculado a partir del exponente dinámico del perfil del cumulante  $U_2$ , que dentro de la incertidumbre concuerda con  $d = 1$ .

Los exponentes dinámicos  $z$  y  $\theta$  resultaron ambos, dentro de la incertidumbre calculada, concordes con los valores  $\theta = 0,191(1)$  y  $z = 2,166(7)$ , encontrados mediante simulaciones para el Modelo de Ising en dos dimensiones por Okano et al[2] y Wang et al[3]. Esto muestra que el método del gradiente es exitoso a la hora de tratar sistemas en el régimen de evolución temporal en el estado crítico.

De estos resultados se puede inferir que los perfiles de funciones termodinámicas en el Modelo de Ising en dos dimensiones con gradiente térmico se comportan cada uno como sistemas de dimensión  $d = 2$ , donde existe una transición de fase orden-desorden caracterizada por los exponentes críticos dinámicos y estacionarios. Sin embargo, el hecho de que la dimensionalidad del perfil sea  $d = 1$  dentro del rango de incertidumbres muestra que se está trabajando con un sistema de una dimensión, lo que es esperable ya que cada perfil es la contribución de una sola columna del sistema. Pero si se tiene en cuenta que en el Modelo de Ising de una dimensión no existe la fase ordenada para ninguna temperatura  $T > 0$ [4]<sup>17</sup>, se concluye que en los perfiles de columna la existencia de interacción entre

<sup>17</sup>En un sistema de Ising de una dimensión de tamaño finito existe un cierto orden dado por efectos de confinamiento, pero de todas formas no hay una transición de fase que separe dos tipos de comportamiento distintos.

los spines con sus vecinos de la derecha e izquierda (que están a diferente temperatura) es suficiente para garantizar una transición de fase. Además, la concordancia entre exponentes críticos sugiere que la clase de universalidad de la transición de fase del problema de Ising en dos dimensiones y la de los perfiles en situación de gradiente perpendicular a ellos es la misma.

Sería interesante estudiar el caso de simulaciones computacionales con gradiente térmico unidireccional en un sistema de Ising en tres dimensiones, para así saber si se sigue respetando la relación encontrada para dos dimensiones. En este sistema cada perfil tendría que comportarse en el punto crítico como un sistema con  $d = 3$ , pero con una dimensión efectiva  $d = 2$ .

La temperatura crítica encontrada para el sistema en régimen de tiempos cortos comprende dentro de su intervalo de incertidumbres al valor  $T_c \sim 2,2692$  del Modelo de Ising en dos dimensiones. Por otro lado, los resultados conseguidos para esta cantidad con la extrapolación a tamaño infinito de los cruces de cumulantes  $U_2$  y  $U_4$ , y con el análisis de escala del perfil de magnetización no concuerdan dentro del intervalo de incertidumbres con ese valor. Tampoco lo hace la estimación realizada a partir de las posiciones de los máximos de perfil de susceptibilidad magnética. Sin embargo no se puede decir que todos estos resultados sean inexactos, ya que en promedio difieren sólo en un 2% con el conseguido en régimen de tiempos cortos.

Las diferencias en los resultados para  $T_c$  calculado por régimen estacionario y por régimen de tiempos cortos pueden deberse a que en el primero hay que realizar extrapolaciones para encontrar la temperatura crítica. Por ejemplo, para calcular  $T_c$  a partir del cruce de cumulantes, se extrapoló a cero linealmente en función de  $1/L_m$ , cuando en realidad la verdadera dependencia con el tamaño medio es desconocida. En el régimen de tiempos cortos, en cambio, la posibilidad de encontrar la temperatura crítica directamente a partir de la curva de evolución temporal que más se asemeje a una ley de potencias aumenta la veracidad en el resultado, ya que no se deben hacer extrapolaciones.

Por otro lado, en el régimen estacionario las correlaciones espaciales son importantes, y pueden llegar a ser del orden del tamaño del sistema, provocando efectos de confinamiento que influirían en el valor de  $T_c$ . Además, si los tamaños trabajados son muy chicos, los efectos de superficie se vuelven relevantes y pueden provocar errores en los resultados.

Otra hipótesis para la discrepancia entre los valores obtenidos de  $T_c$  por régimen estacionario y el valor del Modelo de Ising en dos dimensiones, es que como la temperatura crítica no es una de las variables universales del problema, la misma puede sufrir un corrimiento debido al gradiente térmico. En el caso del gradiente, la transición de fase se produce en el espacio entre la zona de orden y la de desorden, mientras que en el Modelo de Ising corriente la transición ocurre al llevar a  $T$  a su valor crítico. Estos dos casos no son exactamente el mismo, lo que podría ocasionar una diferencia en los valores de las  $T_c$  correspondientes a cada uno.

Para poder saber con veracidad si estas hipótesis sobre el valor de  $T_c$  son válidas, se deberían realizar simulaciones en tamaños más grandes, de manera de disminuir los efectos de superficie.

## 6. Conclusión

Se estudió un ferromagneto de Ising bidimensional en estado de gradiente térmico, y se vio que efectivamente en una parte del sistema ocurre una transición de fase orden-desorden al fijar las temperaturas de los extremos como  $T_1 < T_c < T_2$ , donde  $T_c$  es la temperatura crítica del modelo a temperatura constante en dos dimensiones. Al poder encontrar todos los exponentes críticos se vio que el algoritmo de Metropolis es útil a la hora de caracterizar la transición de fase ocurrida en la



zona cercana a  $T_c$  en un sistema de estas características. Por lo tanto, la imagen de un ferromagneto en contacto con un foco térmico provisto de gradiente es correcta para estudiar sistemas donde no haya uniformidad espacial en el parámetro de control.

En el futuro sería interesante caracterizar la zona crítica del sistema, midiendo el ancho de la interfase en función del tamaño de la muestra, o estudiando la función de correlación espacial entre columnas. También se podría estudiar lo ocurrido para distintos tamaños en un sistema donde el gradiente térmico, y no las temperaturas de los extremos, sea constante para todo  $L$ .

Por otro lado, también sería interesante utilizar el algoritmo microcanónico de Creutz[16] para generar el gradiente térmico en el Modelo de Ising, y así estudiar por ese método la transición de fase predicha y comparar los resultados con los obtenidos en este trabajo.

## Referencias

- [1] Albano, E. V., Bab, M. A., Baglietto, G., Borzi, R. A., Grigera, T. S., Loscar, E. S., Rodriguez, D. E., Rubio Puzzo, M. L., y Saracco, G. P., *Study of Phase Transitions from Short-Time Non-Equilibrium Behaviour*, Reports on Progress in Physics 74 (2011).
- [2] Okano, K., Schülke, L., Yamagishi, K., y Zheng, B., *Universality and scaling in short-time critical dynamics* Nuclear Physics B 485, 727-46 (1997).
- [3] Wang, F. G. y Hu, C. K., *Universality in dynamic critical phenomena* Physical Review E 56, 2310-2313 (1997).
- [4] Huang, K., *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons (1987).
- [5] Binder, K., *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, Springer-Verlag (1984).
- [6] Loscar, E. S., Guisoni, N., y Albano, E. V., *Proposal and applications of a method for the study of irreversible phase transitions* Physical Review E 80, 051123 (2009)
- [7] Guisoni N., Loscar, E. S., y Albano, E. V., *Phase diagram and critical behavior of a forest-fire model in a gradient of immunity* Physical Review E 83, 011125 (2011)
- [8] Pathria, R. K., *Statistical Mechanics. Second Edition*, Butterworth Heinemann (1997).
- [9] Kadanoff, L. P., *Statistical Physics. Statics, Dynamics and Renormalization*, World Scientific (2000).
- [10] Cardy, J., *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge University Press (1996).
- [11] Stanley, H. E., *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press (1971).
- [12] Baglietto, G., *Transiciones de fase en sistemas de partículas autopropulsadas*, Tesis doctoral (2011).
- [13] Binder, K., *Applications of Monte Carlo Methods to Statistical Physics*, Reports on Progress in Physics 60 (1997).
- [14] Zheng, B., *Monte Carlo of Short-Time Critical Dynamics*, International Journal of Modern Physics B, Vol. 12, No 14 (1998).
- [15] Onsager, L., *Crystal Statistics: A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*, Physical Review, Vol. 65, No 3 y 4 (1944).
- [16] Creutz, M., *Microcanonical Monte Carlo Simulation*, Physical Review Letters, Vol. 50, No 19 (1983).
- [17] Neek-Amal, M., Moussavi, R., y Sepangi, H. R., *Monte Carlo simulation of size effects on thermal conductivity in a two-dimensional Ising system*, Physica A 371 (2006).