

# Simulación Monte Carlo del Modelo de Ising en Diferentes Tipos de Redes

Juan Montoya & Pablo Sánchez

Instituto de Física  
Universidad de Antioquia

9 de octubre de 2025

# Contenido

- 1 Introducción
- 2 Marco Teórico
- 3 Implementación y Topologías
- 4 Resultados: Paramagnetismo
- 5 Resultados: Ferromagnetismo
- 6 Resultados: Ferromagnetismo
- 7 Análisis y Discusión
- 8 Conclusiones

## Modelo de Ising

Sistema magnético con espines  $S_i = \pm 1$  que pueden orientarse en dos direcciones opuestas

### Importancia:

- Transiciones de fase
- Magnetización espontánea

### Soluciones analíticas:

- 1D: No hay transición (Ising, 1925)
- 2D cuadrada: (Onsager, 1944)
- Otros casos: Métodos numéricos

## Objetivo

Estudiar el modelo de Ising en diferentes topologías de red ( $z=2,3,4,8$ ) con dilución magnética usando Monte Carlo

# Marco Teórico: Hamiltoniano

## Hamiltoniano del Modelo de Ising

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i$$

### Parámetros:

- $S_i = \pm 1$ : espín en sitio  $i$
- $J$ : constante de acoplamiento
- $H$ : campo magnético externo
- $\langle i,j \rangle$ : primeros vecinos

### Casos de estudio:

- **Paramagneto**:  $J = 0$
- **Ferromagneto**:  $J > 0$

### Magnetización:

$$m = \frac{1}{n} \sum_i S_i$$

## Dilución magnética

Factor  $q = n/N$ : fracción de sitios ocupados ( $q = 0, 0.5, 0.8$ )

# Método Monte Carlo - Algoritmo de Metropolis

## Distribución de Boltzmann

$$P(\mu) \propto e^{-\beta E_\mu}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

### Algoritmo de Metropolis:

- 1 Seleccionar espín aleatorio
- 2 Calcular  $\Delta E$  al invertir espín
- 3 Si  $\Delta E \leq 0$ : aceptar
- 4 Si  $\Delta E > 0$ : aceptar con  $P = e^{-\beta \Delta E}$
- 5 Repetir hasta equilibrio

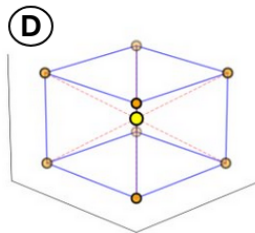
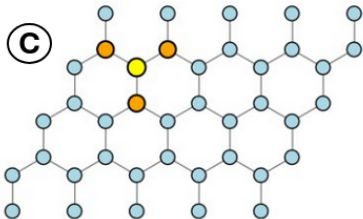
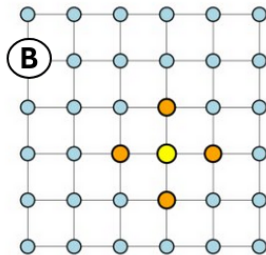
### Parámetros de simulación:

- $L$ : tamaño de red
- Pasos MC: 4000-10000
- Condiciones periódicas
- Optimización: Numba JIT

## Ley de estados correspondientes (Paramagneto)

$$m = \tanh\left(\frac{H}{k_B T}\right)$$

# Visualización de las Topologías de Red



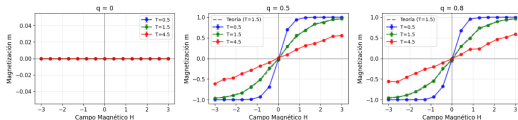
Topología	Dimensión	$z$	Tamaño (L)
Cadena 1D	1D	2	100
Hexagonal (Honeycomb)	2D	3	30
Cuadrada	2D	4	30
BCC (Cúbica Centrada)	3D	8	15

## Características:

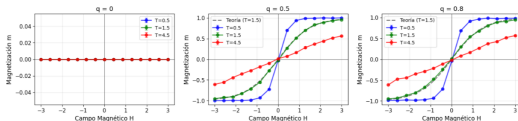
- Condiciones de frontera periódicas
- $z$  = número de coordinación
- Impacto en  $T_c$
- Dilución:  $q \in \{0, 0.5, 0.8\}$

# Paramagnetismo ( $J=0$ ): Curvas $m$ vs. $H$

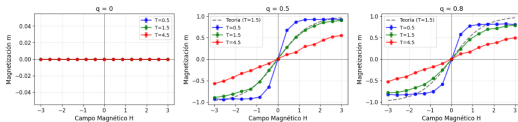
Magnetización vs Campo Externo - Cadena 1D ( $z=2$ )



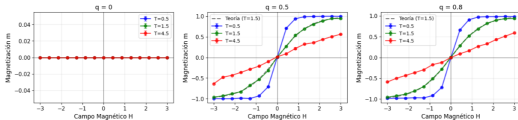
Magnetización vs Campo Externo - Red Hexagonal 2D ( $z=3$ )



Magnetización vs Campo Externo - Red BCC 3D ( $z=8$ )



Magnetización vs Campo Externo - Red Cuadrada 2D ( $z=4$ )



## Observaciones:

- Curvas para  $T_1 < T_2 < T_3$
- Mayor  $T \Rightarrow$  respuesta más lineal

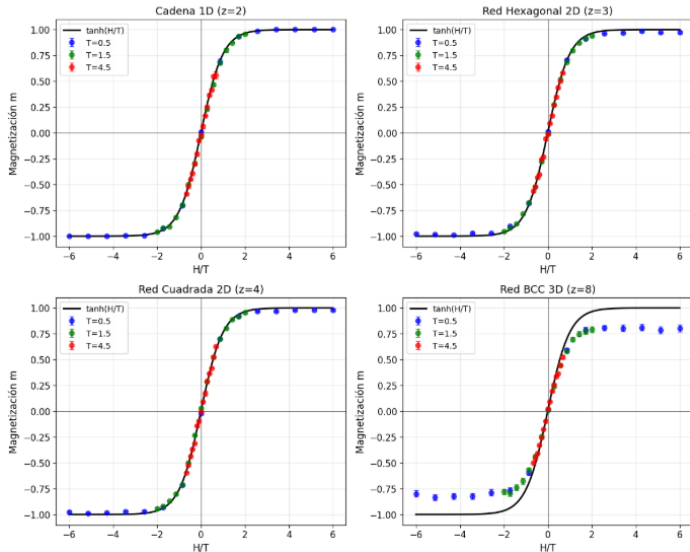
## Validación cuantitativa:

- $R^2 > 0,99$  con teoría



# Ley de Estados Correspondientes

Ley de Estados Correspondientes ( $q=0.8$ )



## Verificación:

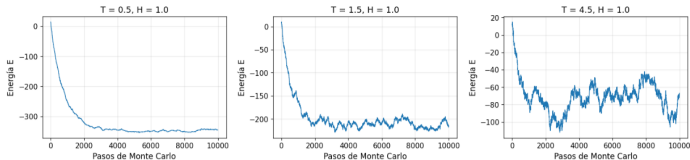
- Todas las curvas se ajustan
- $m = \tanh(H/T)$
- Válido para todas las  $T$
- Independiente de topología

## Métricas:

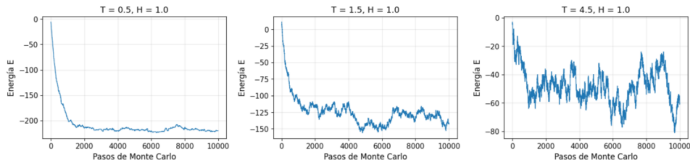
- $R^2$ : 0.9986-0.9995

# Relajación del Sistema: Energía vs. Pasos MC

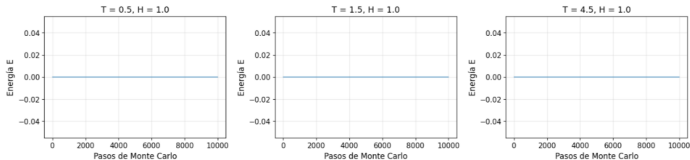
Evolución de la Energía Interna - Red Cuadrada 2D ( $q=0.8$ )



Evolución de la Energía Interna - Red Cuadrada 2D ( $q=0.5$ )



Evolución de la Energía Interna - Red Cuadrada 2D ( $q=0$ )



## Análisis de equilibración:

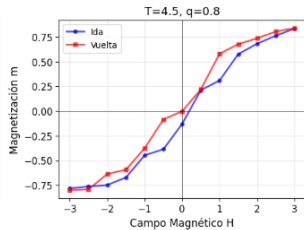
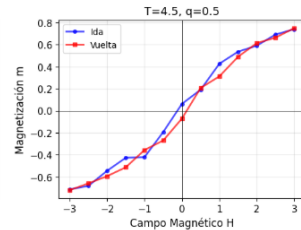
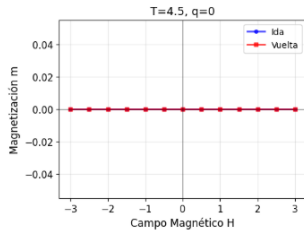
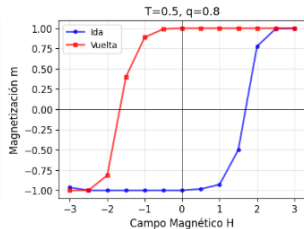
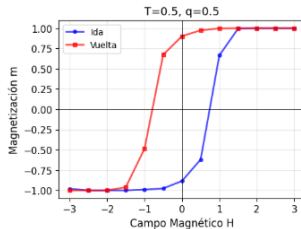
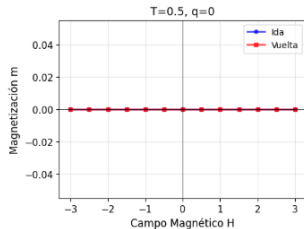
- Estado inicial: aleatorio
- Fluctuaciones térmicas
- Convergente

## Comportamiento:

- Mayor  $z \Rightarrow |E|$  mayor

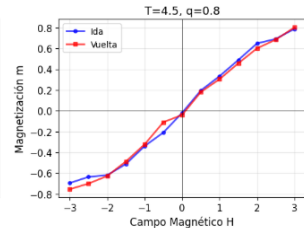
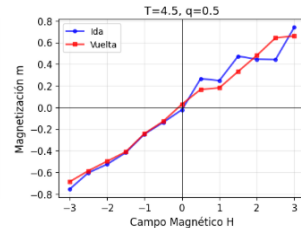
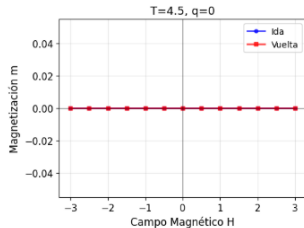
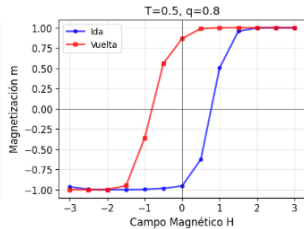
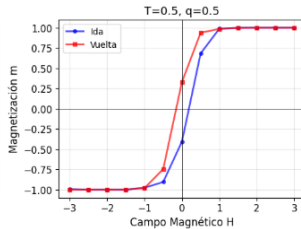
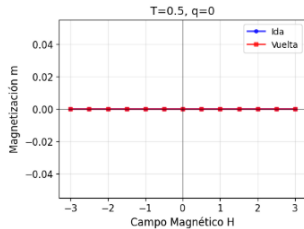
# Ferromagnetismo ( $J=1$ ): Ciclos de Histéresis

Ciclos de Histéresis - Red Cuadrada 2D ( $z=4$ )



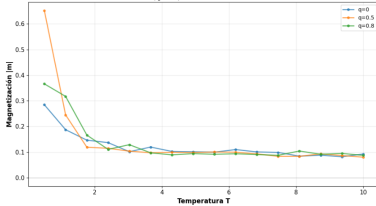
# Ferromagnetismo ( $J=1$ ): Ciclos de Histéresis

Ciclos de Histéresis - Red Hexagonal 2D ( $z=3$ )

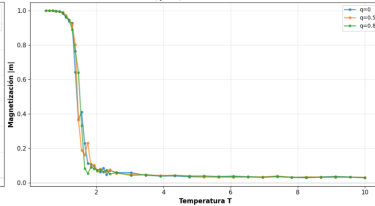


# Magnetización vs. Temperatura: Transición de Fase

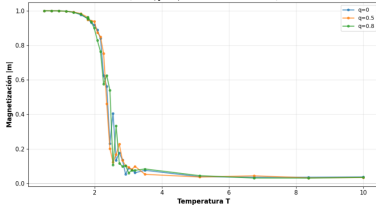
Transición de Fase - Cadena 1D ( $z=2$ )  
( $H=0.0$ ,  $J=1.0$ , Inicio: estado ordenado  $\uparrow$ )



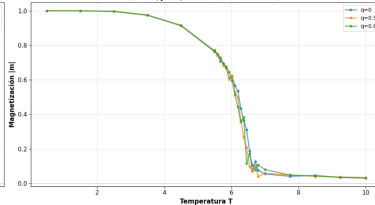
Transición de Fase - Red Hexagonal 2D ( $z=3$ )  
( $H=0.0$ ,  $J=1.0$ , Inicio: estado ordenado  $\uparrow$ )



Transición de Fase - Red Cuadrada 2D ( $z=4$ )  
( $H=0.0$ ,  $J=1.0$ , Inicio: estado ordenado  $\uparrow$ )



Transición de Fase - Red BCC 3D ( $z=8$ )  
( $H=0.0$ ,  $J=1.0$ , Inicio: estado ordenado  $\uparrow$ )



## Observacion:

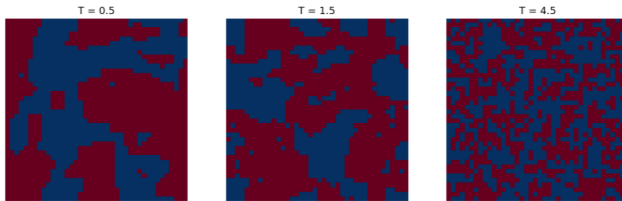
- $T_c$  depende de  $z$  y  $q$

## Temperaturas críticas:

- $z = 2$  (1D): No transición
- $z = 3$ :  $T_c \approx 1,0$
- $z = 4$ :  $T_c \approx 2,27$
- $z = 8$ :  $T_c \approx 6,3$

# Microestados Magnéticos (Snapshots)

Microestados Magnéticos - Red Cuadrada 2D ( $q=1.0, J=1.0$ )



Microestados Magnéticos - Red Cuadrada 2D ( $q=0.5, J=1.0$ )



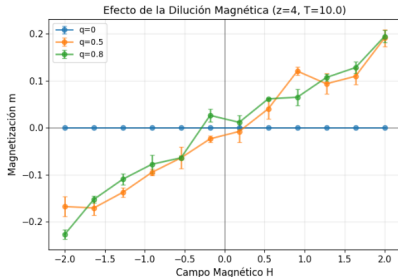
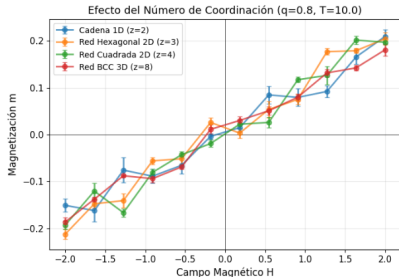
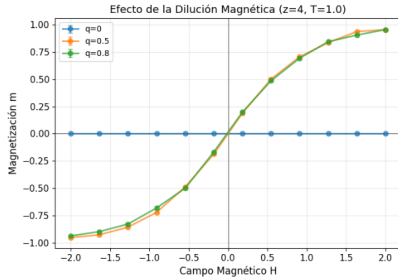
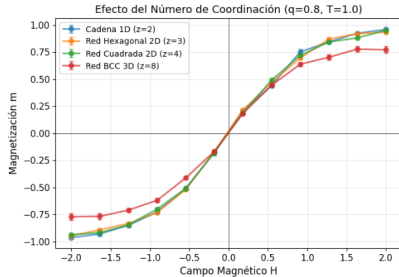
## Configuraciones:

- $\uparrow$ : espín arriba (rojo)
- $\downarrow$ : espín abajo (azul)
- Blanco: sitio desocupado ( $q < 1$ )

## Análisis visual:

- $T \ll T_c$ : Dominios grandes
- $T \gg T_c$ : Configuración aleatoria

# Efecto del Número de Coordinación (z)



## Resultados ( $q = 0,8$ ):

- $z = 2$ : Sin transición
- $z = 3$ :  $T_c \sim 1,0$
- $z = 4$ :  $T_c \sim 2,27$
- $z = 8$ :  $T_c \sim 6,3$

## Paramagnetismo ( $J=0$ ):

- Verificación de  $m = \tanh(H/T)$
- $RMSE < 0,02$ ,  $R^2 > 0,99$
- Ley de estados correspondientes confirmada
- Independiente de  $z$

## Ferromagnetismo ( $J=1$ ):

- Transiciones de fase de 2º orden
- $T_c$  aumenta con  $z$
- $T_c$  disminuye con dilución
- $T_c(\text{cuadrada}) \approx 2.27$

## Histéresis:

- Desaparecen para  $T > T_c$
- Comportamiento físico correcto

## Implementación:

- 4 topologías:  $z=2,3,4,8$
- Algoritmo de Metropolis
- Optimización con Numba



Gracias por su atención