

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

Juan Montoya & Melanny Silva & Pablo Sánchez

Instituto de Física
Universidad de Antioquia

14/11/2025

Contenido

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

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 ΔE 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

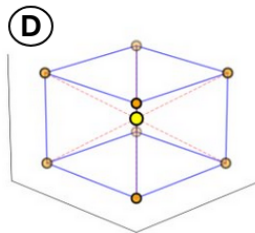
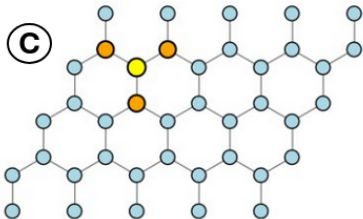
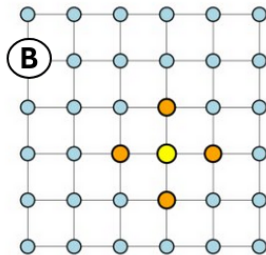
Parámetros de simulación:

- 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



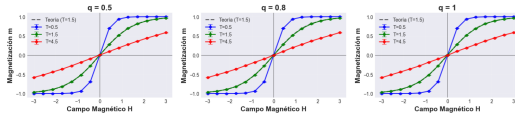
Topología	Dimensión	z	Tamaño (L)
Cadena 1D	1D	2	100
Hexagonal (Honeycomb)	2D	3	30
Cuadrada	2D	4	30
BCC (Cúbica Centrada)	3D	8	15

Características:

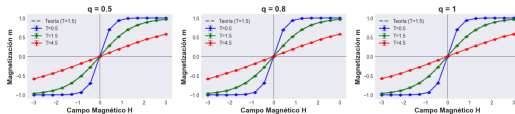
- Condiciones de frontera periódicas
- z = número de coordinación
- Impacto en T_c
- Dilución: $q \in \{0, 0.5, 0.8\}$

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

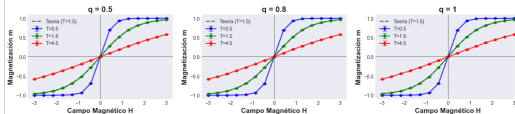
Magnetización vs Campo Externo - Cadena 1D ($z=2$)
(Promedio de 10 simulaciones independientes)



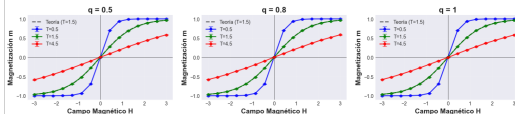
Magnetización vs Campo Externo - Red Hexagonal 2D ($z=3$)
(Promedio de 10 simulaciones independientes)



Magnetización vs Campo Externo - Red Cuadrada 2D ($z=4$)
(Promedio de 10 simulaciones independientes)



Magnetización vs Campo Externo - Red BCC 3D ($z=8$)
(Promedio de 10 simulaciones independientes)



Observaciones:

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

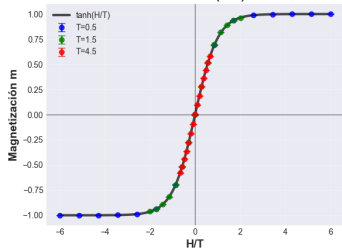
Validación cuantitativa:

- $R^2 > 0,99999$ con teoría

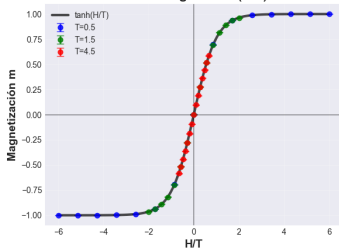
Ley de Estados Correspondientes

Ley de Estados Correspondientes ($q=0.8$)
(Promedio de 10 simulaciones independientes)

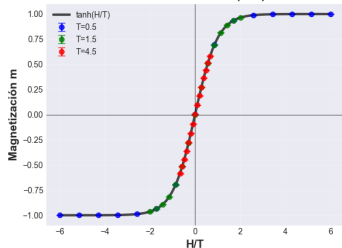
Cadena 1D ($z=2$)



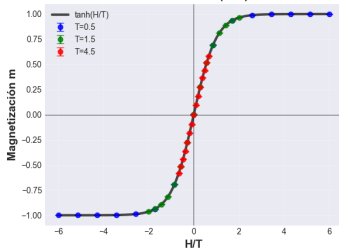
Red Hexagonal 2D ($z=3$)



Red Cuadrada 2D ($z=4$)



Red BCC 3D ($z=8$)



Verificación:

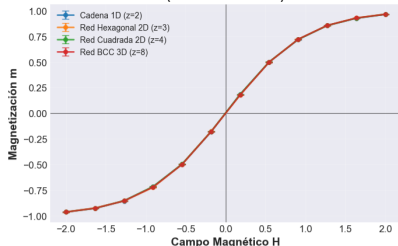
- Todas las curvas se ajustan
- $m = \tanh(H/T)$
- Válido para todas las T
- Independiente de topología

Métricas:

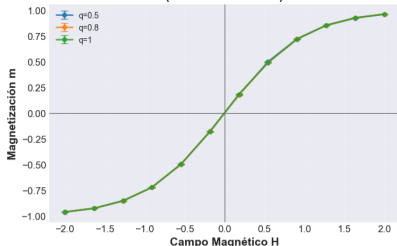
- $R^2: 0.999995$

Efecto del Número de Coordinación (z)

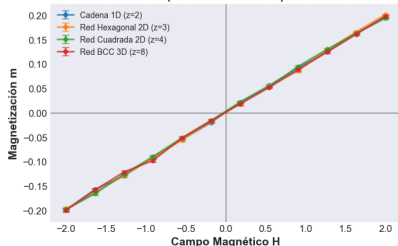
Efecto del Número de Coordinación ($q=0.8$, $T=1.0$)
(Promedio 10 runs)



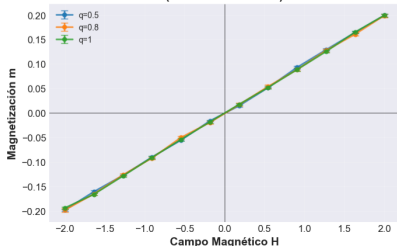
Efecto de la Dilución Magnética ($z=4$, $T=1.0$)
(Promedio 10 runs)



Efecto del Número de Coordinación ($q=0.8$, $T=10.0$)
(Promedio 10 runs)

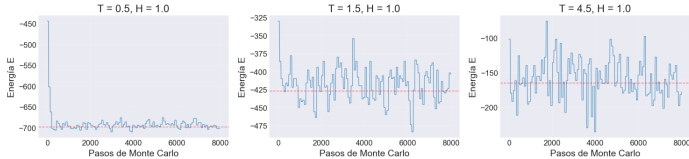


Efecto de la Dilución Magnética ($z=4$, $T=10.0$)
(Promedio 10 runs)

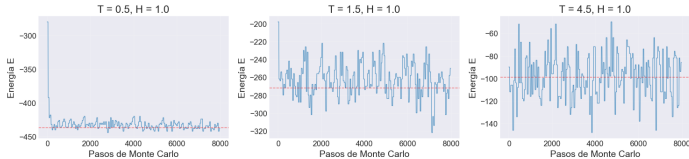


Relajación del Sistema: Energía vs. Pasos MC

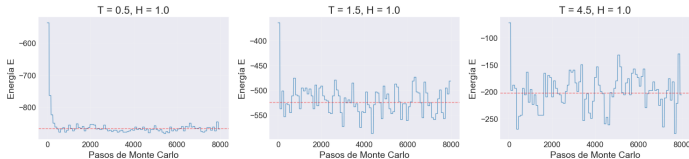
Evolución de la Energía Interna - Red Cuadrada 2D ($q=0.8$)



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



Evolución de la Energía Interna - Red Cuadrada 2D ($q=1.0$)



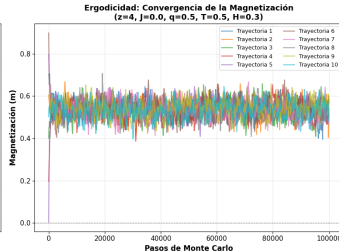
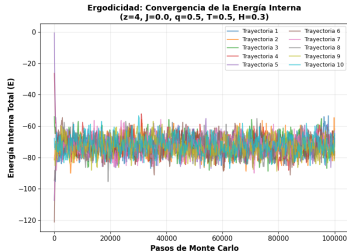
Análisis de equilibración:

- Estado inicial: aleatorio
- Fluctuaciones térmicas
- Convergente

Comportamiento:

- Mayor $z \Rightarrow |E|$ mayor

Relajación del Sistema: Energía vs. Pasos MC - Ergonocidad



Análisis de equilibración:

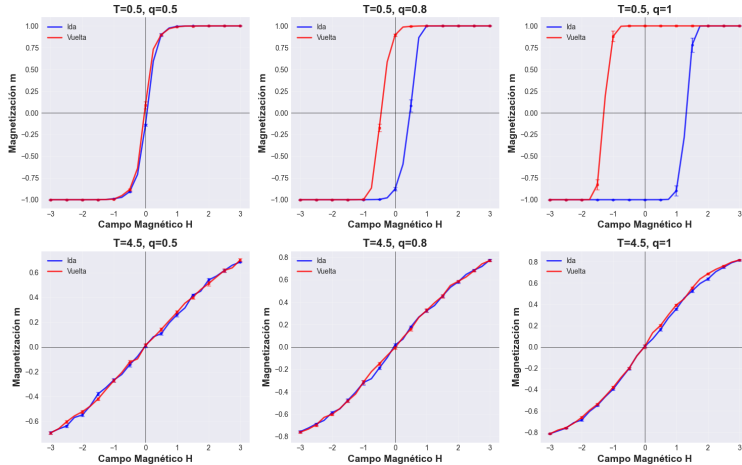
- Estado inicial: aleatorio
- Fluctuaciones térmicas
- Convergente

Comportamiento:

- Mayor $z \Rightarrow |E|$ mayor

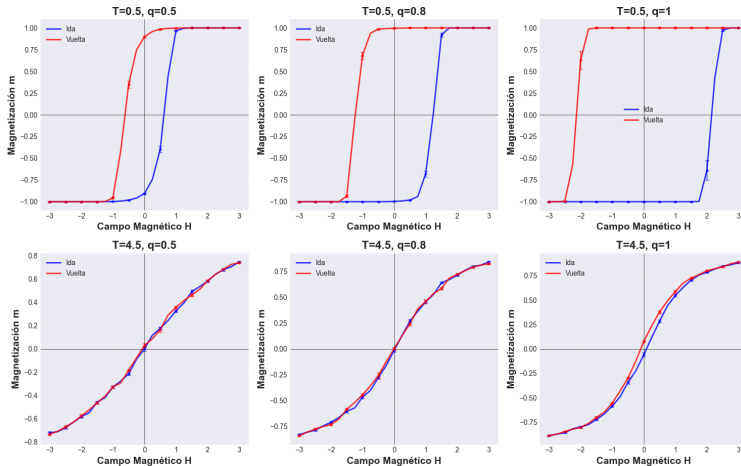
Ferromagnetismo ($J=1$): Ciclos de Histéresis

Ciclos de Histéresis - Red Hexagonal 2D ($z=3$)
(Promedio de 10 simulaciones independientes)

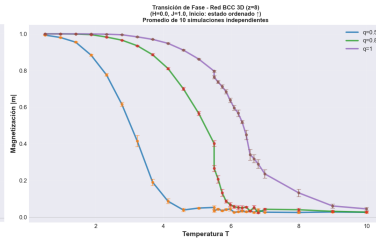
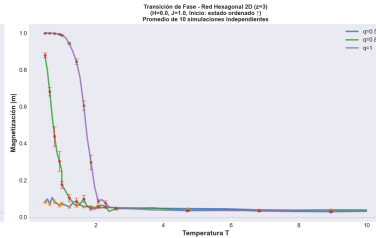
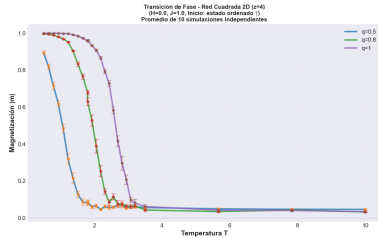
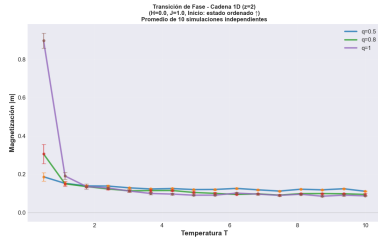


Ferromagnetismo ($J=1$): Ciclos de Histéresis

Ciclos de Histéresis - Red Cuadrada 2D ($z=4$)
(Promedio de 10 simulaciones independientes)



Magnetización vs. Temperatura: Transición de Fase



Observacion:

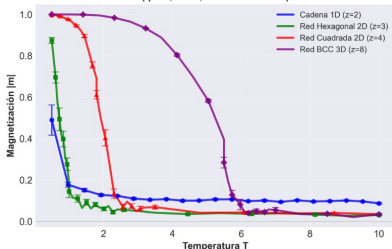
- T_c depende de z y q

Temperaturas críticas:

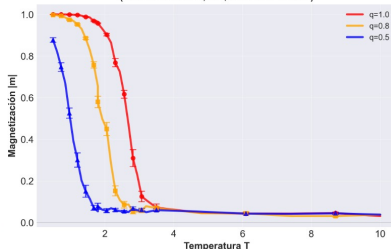
- $z = 2$ (1D): No transición
- $z = 3$: $T_c \approx 1,0$
- $z = 4$: $T_c \approx 2,27$
- $z = 8$: $T_c \approx 6,3$

Efecto del Número de Coordinación (z)

Efecto del Número de Coordinación en T_c
($q=0.8$, $J=1.0$, Promedio 10 runs)



Efecto de la Dilución Magnética en T_c
(Red Cuadrada 2D, $z=4$, Promedio 10 runs)

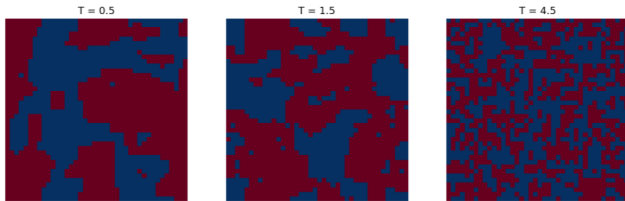


Resultados ($q = 0.8$):

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

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:

- ↑: espín arriba (rojo)
- ↓: espín abajo (azul)
- Blanco: sitio desocupado ($q < 1$)

Análisis visual:

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

Paramagnetismo ($J=0$):

- Verificación de $m = \tanh(H/T)$
- $R^2 > 0,99999$
- Ley de estados correspondientes confirmada
- Independiente de z y q

Ferromagnetismo ($J=1$):

- Transiciones de fase de 2º orden
- T_c aumenta con z
- T_c disminuye con dilución
- $T_c(z=4) \approx 2.27$

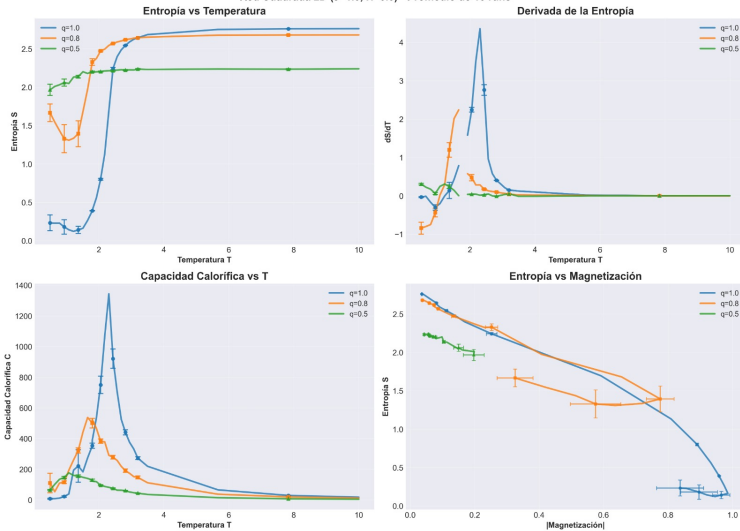
Histéresis:

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

Implementación:

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

Análisis Termodinámico: Entropía y Transición de Fase
Red Cuadrada 2D ($J=1.0$, $H=0.0$) - Promedio de 10 runs



Gracias por su atención