

# Simulación Monte Carlo del Modelo de Ising en Diferentes Topologías de Red

Juan Jose Montoya Sánchez, Juan Pablo Sánchez Arroyave<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia*

(Dated: 15 de noviembre de 2025)

Se presenta una implementación computacional del modelo de Ising mediante el método de Monte Carlo con algoritmo de Metropolis para cuatro topologías de red: cadena unidimensional ( $z = 2$ ), red cuadrada bidimensional ( $z = 4$ ), red hexagonal tipo honeycomb ( $z = 3$ ) y red cúbica centrada en el cuerpo tridimensional (BCC,  $z = 8$ ). Se analizan los regímenes paramagnético ( $J = 0$ ) y ferromagnético ( $J = 1$ ) con dilución magnética ( $q = 0.5, 0.8, 1$ ). En el caso paramagnético se verifica la ley de estados correspondientes  $m = \tanh(H/T)$  independiente de la topología. En el régimen ferromagnético se estudian transiciones de fase, fenómenos de histéresis y la dependencia de  $T_c$  con el número de coordinación  $z$  y la fracción de ocupación  $q$ . Los resultados obtenidos concuerdan con los valores exactos reportados en la literatura.

## I. INTRODUCCIÓN

El modelo de Ising representa uno de los sistemas más estudiados en física estadística debido a su simplicidad matemática y riqueza fenomenológica. Propuesto originalmente por Wilhelm Lenz en 1920 y desarrollado por Ernst Ising en 1925 [1], este modelo describe sistemas magnéticos mediante espines que pueden orientarse en dos direcciones opuestas. A pesar de su aparente simplicidad, el modelo de Ising captura comportamientos complejos como transiciones de fase, magnetización espontánea y fenómenos críticos que son fundamentales para comprender el comportamiento cooperativo en sistemas de muchos cuerpos [2].

La solución analítica del modelo de Ising se conoce solo para casos específicos. La cadena unidimensional, resuelta por Ising en 1925 [1], mostró que no hay transición de fase a temperatura finita en una dimensión, un resultado que demostró la importancia de la dimensionalidad en los fenómenos cooperativos. La solución exacta fundamental para la red cuadrada bidimensional sin campo externo, obtenida por Onsager en 1944 [3], exhibió una transición de fase de segundo orden a una temperatura crítica finita  $T_c = 2J/(k_B \ln(1 + \sqrt{2})) \approx 2.269J/k_B$ , proporcionando uno de los primeros resultados exactos para un sistema de muchos cuerpos interactuantes que exhibe una transición de fase. Esta solución reveló la divergencia logarítmica del calor específico en el punto crítico y estableció las bases para comprender los fenómenos críticos [4].

Para geometrías más complejas, dimensiones superiores o en presencia de campos externos, es necesario recurrir a métodos computacionales. El desarrollo de las computadoras digitales a mediados del siglo XX abrió nuevas vías para estudiar sistemas mecánico-estadísticos. El algoritmo de Metropolis, introducido en 1953 [5], proporcionó una herramienta poderosa para simular sistemas en equilibrio térmico usando el método de Monte Carlo. Este método genera configuraciones de acuerdo con la distribución de Boltzmann y permite el cálculo de

promedios termodinámicos con precisión controlada. El trabajo original de Metropolis et al. representó un cambio de paradigma en la física computacional, estableciendo las bases para la mecánica estadística computacional moderna [6].

Desarrollos posteriores, como los algoritmos de clusters (Wolff [7], Swendsen-Wang [8]), han mejorado la eficiencia computacional, especialmente cerca de puntos críticos donde los algoritmos convencionales de volteo de espín único sufren de ralentización crítica (critical slowing down). Estos algoritmos avanzados explotan volteos colectivos de espines que respetan el balance detallado mientras reducen los tiempos de autocorrelación. Otros desarrollos incluyen el templado paralelo (parallel tempering) [9] y el muestreo de Wang-Landau [10], que han extendido el rango de problemas accesibles en física estadística.

El estudio del modelo de Ising en diferentes topologías de red es relevante para comprender materiales magnéticos reales. La estructura cristalina determina el número de coordinación  $z$  (número de primeros vecinos), que influye decisivamente en la temperatura crítica y el comportamiento magnético [11]. La teoría de campo medio (Weiss) predice  $k_B T_c^{MF} = zJ$ , proporcionando una primera aproximación (sobrestimada en baja dimensión) al efecto de la estructura de red en el comportamiento crítico [12, 22]. Además, la presencia de defectos o impurezas en materiales reales puede modelarse mediante dilución magnética, donde solo una fracción  $q$  de sitios contiene momentos magnéticos. Este problema de dilución está estrechamente relacionado con la teoría de percolación [13] y tiene aplicaciones en la comprensión de magnetos amorfos, semiconductores magnéticos diluidos y vidrios de espín [14].

Los materiales magnéticos reales exhiben una amplia variedad de estructuras cristalinas, desde redes cúbicas simples en magnetos elementales hasta estructuras complejas en compuestos de tierras raras y sistemas frustrados. La red hexagonal tipo panal de abeja (honeycomb) con número de coordinación  $z = 3$  aparece en materiales como el grafeno y ciertas monocapas magnéticas don-

de cada átomo se coordina con tres vecinos a  $120^\circ$  [15]. Las estructuras cúbicas centradas en el cuerpo (BCC) con  $z = 8$  se encuentran en el hierro y otros metales de transición que exhiben ferromagnetismo a temperatura ambiente [16]. Comprender cómo la topología de la red afecta las propiedades magnéticas es crucial para el diseño de materiales y el desarrollo de nuevos dispositivos magnéticos [17].

El presente trabajo explora sistemáticamente el comportamiento del modelo de Ising en diferentes topologías de red ( $z = 2, 3, 4, 8$ ), evaluando el efecto del número de coordinación y la dilución magnética sobre las propiedades termodinámicas del sistema en los regímenes paramagnético y ferromagnético. Se emplean simulaciones de Monte Carlo con dinámica de Metropolis para obtener curvas de magnetización, analizar transiciones de fase, estudiar fenómenos de histéresis y verificar la ley de estados correspondientes en el límite paramagnético. Los resultados obtenidos proporcionan información cuantitativa sobre el papel de la geometría de la red y el desorden en la determinación de las propiedades magnéticas de sistemas de espines.

## II. MARCO TEÓRICO

### A. Teoría del Modelo de Ising

El hamiltoniano del modelo de Ising para un sistema de  $N$  espines se expresa como:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (1)$$

donde  $S_i = \pm 1$  representa el espín en el sitio  $i$ ,  $J$  es la constante de acoplamiento entre primeros vecinos,  $H$  es el campo magnético externo, y  $\langle i, j \rangle$  denota la suma sobre pares de primeros vecinos. Para un ferromagneto,  $J > 0$  favorece la alineación paralela de espines vecinos, mientras que para un antiferromagneto,  $J < 0$  favorece la alineación antiparalela. Para un paramagneto,  $J = 0$  y el hamiltoniano se reduce al término Zeeman [18].

La función de partición del sistema en el ensamble canónico es:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta \mathcal{H}} \quad (2)$$

donde  $\beta = 1/(k_B T)$  y la suma corre sobre todas las  $2^N$  configuraciones de espín posibles. Todas las cantidades termodinámicas pueden obtenerse de la función de partición. La magnetización por sitio se define como:

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial H} \quad (3)$$

### 1. Cadena de Ising Unidimensional

Para la cadena de Ising unidimensional con  $N$  espines y condiciones de frontera periódicas, la función de partición puede calcularse exactamente usando el método de matriz de transferencia [1, 4]. La magnetización por espín es:

$$m = \frac{\sinh(\beta H)}{\sqrt{\sinh^2(\beta H) + e^{-4\beta J}}} \quad (4)$$

Para el caso paramagnético ( $J = 0$ ), esto se reduce a:

$$m = \tanh(\beta H) \quad (5)$$

Para  $H = 0$  y cualquier temperatura finita,  $m = 0$ , indicando que no hay magnetización espontánea en el modelo de Ising unidimensional a temperatura finita [1].

### 2. Red Cuadrada Bidimensional

La red cuadrada bidimensional con número de coordinación  $z = 4$  exhibe un comportamiento cualitativamente diferente. La solución exacta de Onsager [3] para campo externo cero mostró que el sistema experimenta una transición de fase de segundo orden a la temperatura crítica:

$$k_B T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269J \quad (6)$$

Por debajo de  $T_c$ , el sistema exhibe magnetización espontánea incluso en ausencia de un campo externo:

$$m_0(T) = \begin{cases} [1 - \sinh^{-4}(2\beta J)]^{1/8} & T < T_c \\ 0 & T > T_c \end{cases} \quad (7)$$

Cerca del punto crítico, la magnetización exhibe comportamiento de ley de potencias con exponente crítico  $\beta = 1/8$  [3, 19]. Otros exponentes críticos incluyen  $\gamma = 7/4$  para la susceptibilidad y  $\nu = 1$  para la longitud de correlación [4]. Estos exponentes son universales, dependiendo solo de la dimensionalidad y simetría del parámetro de orden [20, 21].

### B. Método de Monte Carlo con Dinámica de Metropolis

Las soluciones analíticas del modelo de Ising están limitadas a casos específicos. El método de Monte Carlo proporciona un enfoque estadístico para muestrear el espacio de configuraciones de acuerdo con la distribución de Boltzmann [6, 28].

El algoritmo de Metropolis [5] genera una cadena de Markov que satisface el balance detallado, garantizando que la distribución de equilibrio sea la distribución de Boltzmann [6].

### 1. Implementación Computacional

El algoritmo se implementa mediante el siguiente esquema de volteo de espín único:

1. **Inicialización:** El sistema se configura en un estado inicial, ya sea aleatorio (para temperaturas altas donde cada espín ocupado se asigna aleatoriamente a  $\pm 1$ ) u ordenado (todos los espines en  $+1$ , útil para explorar estados de baja temperatura y fenómenos de histéresis).
2. **Paso de Metropolis:** Seleccionar aleatoriamente un sitio ocupado  $i$  y calcular el cambio de energía al voltear el espín  $S_i \rightarrow -S_i$ :

$$\Delta E = 2S_i \left( J \sum_{j \in \text{nn}(i)} \epsilon_j S_j + H \right) \quad (8)$$

donde la suma corre sobre los primeros vecinos del sitio  $i$ . Este cálculo local de energía hace que el algoritmo sea eficiente, ya que solo necesitan considerarse los espines vecinos.

3. **Criterio de aceptación:** Aceptar el volteo con probabilidad:

$$P_{\text{aceptar}} = \min(1, e^{-\beta \Delta E}) \quad (9)$$

Si  $\Delta E \leq 0$ , el movimiento siempre se acepta. Si  $\Delta E > 0$ , se acepta con probabilidad  $e^{-\beta \Delta E}$ .

4. **Iteración:** Repetir los pasos 2-3 por muchas iteraciones hasta alcanzar equilibrio y obtener suficientes mediciones.

### 2. Fases de Equilibración y Medición

Cada simulación se divide en dos fases:

**Fase de equilibración:** Se realizan  $N_{\text{eq}} = 1000-2000$  Monte Carlo sweeps (MCS), donde  $1 \text{ MCS} = N_{\text{ocu}}$  intentos de flip (uno por cada espín ocupado), sin tomar mediciones, permitiendo que el sistema alcance el equilibrio térmico desde la configuración inicial. Este período es crucial para olvidar las condiciones iniciales y alcanzar la distribución de Boltzmann estacionaria.

**Fase de medición:** Se realizan  $N_{\text{med}} = 4000-10000$  MCS adicionales donde se registran los observables físicos después de cada sweep. La energía y magnetización se calculan como:

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \epsilon_i \epsilon_j S_i S_j - H \sum_i \epsilon_i S_i \quad (10)$$

$$m = \frac{1}{N_{\text{ocu}}} \sum_{i: \epsilon_i=1} S_i \quad (11)$$

donde  $N$  es el número total de sitios de la red,  $N_{\text{ocu}} = qN$  es el número de sitios ocupados, y la suma corre únicamente sobre los sitios ocupados (aquellos con  $\epsilon_i = 1$ ). Los observables físicos se calculan como promedios temporales sobre la cadena de Markov:

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{N_{\text{med}}} \sum_{t=1}^{N_{\text{med}}} A(\mu_t) \quad (12)$$

### 3. Estimación de Errores Estadísticos

Los errores estadísticos se estiman mediante el método de promediado por bloques [28]. Las  $N_{\text{med}}$  mediciones se dividen en  $N_b$  bloques de tamaño  $B$  (típicamente  $B = 50$ ), y el error estándar se estima como:

$$\sigma_A = \sqrt{\frac{1}{N_b(N_b - 1)} \sum_{b=1}^{N_b} (\bar{A}_b - \bar{A})^2}. \quad (13)$$

### 4. Cálculo de Cantidades Termodinámicas Derivadas

La **capacidad calorífica** a campo constante se calcula mediante el teorema de fluctuación-disipación [22, 28]:

$$C_V = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2} \quad (14)$$

donde las fluctuaciones cuadráticas de energía se obtienen directamente de las trayectorias Monte Carlo.

La **susceptibilidad magnética** se determina análogamente a partir de las fluctuaciones de magnetización [6, 28]:

$$\chi = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{k_B T} \quad (15)$$

La **entropía** se calcula mediante integración termodinámica [18, 28]:

$$S(T) = S(T_0) + \int_{T_0}^T \frac{C_V(T')}{T'} dT' \quad (16)$$

donde se utiliza una grilla de temperaturas para discretizar la integral mediante la regla del trapecio.

### C. Topologías de Red y Parámetros Estructurales

Las propiedades del modelo de Ising dependen de la topología de la red, caracterizada por el número de coordinación  $z$  (número de primeros vecinos) [11].

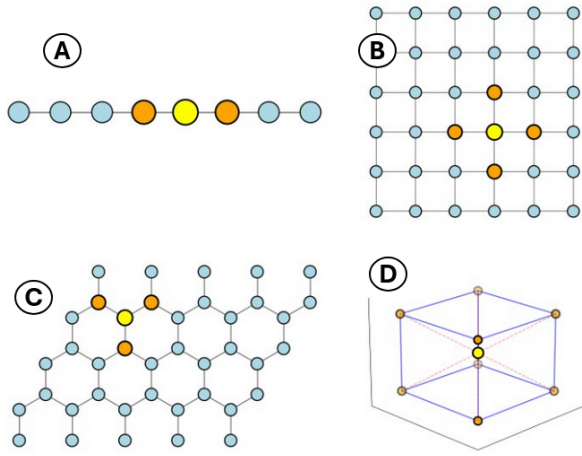


Figura 1. **Topologías de red para el modelo de Ising.** En cada panel, el sitio central se muestra en amarillo con sus primeros vecinos en naranja. (A) Cadena 1D ( $z = 2$ ). (B) Red cuadrada 2D ( $z = 4$ ). (C) Red honeycomb 2D ( $z = 3$ ). (D) Red BCC 3D ( $z = 8$ ).

### 1. Implementación de las Geometrías

Se implementaron cuatro topologías de red: cadena 1D ( $z = 2$ ), red cuadrada 2D ( $z = 4$ ), red hexagonal honeycomb 2D ( $z = 3$ ) y red BCC 3D ( $z = 8$ ). Todas las redes se implementaron con condiciones de frontera periódicas para minimizar efectos de borde.

La Figura 1 ilustra las cuatro topologías estudiadas, mostrando el sitio central y sus primeros vecinos para visualizar claramente el número de coordinación  $z$ .

### 2. Dilución Magnética

La dilución magnética se introduce considerando que una fracción  $q$  de sitios de la red está ocupada por espines [14]. El hamiltoniano efectivo se escribe introduciendo variables de ocupación  $\epsilon_i$ :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \epsilon_i \epsilon_j S_i S_j - H \sum_i \epsilon_i S_i \quad (17)$$

donde  $\epsilon_i = 1$  si el sitio  $i$  está ocupado y  $\epsilon_i = 0$  en caso contrario.

### D. Ley de Estados Correspondientes en el Régimen Paramagnético

Para el caso paramagnético ( $J = 0$ ), el hamiltoniano se reduce a:

$$\mathcal{H} = -H \sum_{i=1}^{N_{\text{ocu}}} S_i \quad (18)$$

La magnetización por espín se obtiene exactamente como:

$$m = \tanh\left(\frac{H}{k_B T}\right) \quad (19)$$

Esta expresión es exacta para cualquier topología de red (independiente de  $z$ ), tamaño de sistema  $L$  y grado de dilución  $q$ . Al representar las curvas  $m(H)$  medidas a diferentes temperaturas en función de la variable de escalamiento  $\xi = H/(k_B T)$ , todas colapsan sobre una única función universal  $m = \tanh(\xi)$ , constituyendo una manifestación de la ley de estados correspondientes para sistemas paramagnéticos.

### E. Extracción de Curvas y Observables Físicos

#### 1. Magnetización vs Campo Externo (Caso Paramagnético)

En el régimen paramagnético ( $J = 0$ ), se simuló curvas  $m(H)$  a diferentes temperaturas mediante barridos del campo externo  $H \in [-3, 3]$  en incrementos discretos. Para cada par  $(T, H)$ , se ejecuta una simulación independiente calculando  $\langle m \rangle$  y su error estadístico, comparando con la predicción teórica  $m = \tanh(H/k_B T)$ .

La verificación de la ley de estados correspondientes se realizó representando  $m$  versus  $H/T$  para diferentes temperaturas. En un paramagneto ideal, todas las curvas deben colapsar sobre la función universal  $m = \tanh(H/T)$ .

#### 2. Magnetización vs Temperatura (Caso Ferromagnético)

Para el caso ferromagnético ( $J = 1$ ) sin campo externo ( $H = 0$ ), se estudió la transición de fase mediante barridos de temperatura  $T \in [0.5, 4.0]$  con incrementos finos cerca de  $T_c$ . Para cada temperatura, se mide  $\langle |m| \rangle$  (valor absoluto para detectar orden espontáneo). La temperatura crítica  $T_c$  se estima como el punto de máxima derivada  $|dm/dT|_{\text{max}}$ , analizando el efecto del número de coordinación  $z$  y la dilución  $q$  sobre  $T_c$ .

#### 3. Ciclos de Histéresis

Los ciclos de histéresis se simuló para  $J = 1$  a diferentes temperaturas. Inicializando el sistema en estado ordenado (todos los espines  $+1$ ), se realiza un ciclo completo de campo  $H : H_{\text{max}} \rightarrow -H_{\text{max}} \rightarrow H_{\text{max}}$ . En cada valor de  $H$ , el sistema se equilibra brevemente ( $\sim 500$  pasos) y se mide  $\langle m \rangle$ , usando la configuración final como inicial para el siguiente punto (memoria del sistema). Se extraen la coercitividad  $H_c$  (campo donde  $m = 0$ ) y la remanencia  $m_r$  (magnetización para  $H = 0$ ) mediante interpolación lineal.

Para redes 2D, se generaron snapshots de configuraciones de equilibrio a diferentes temperaturas tras equilibrar el sistema durante  $\sim 8000$  pasos de Monte Carlo, permitiendo observar la formación de dominios ferromagnéticos y la transición entre fases ordenada y desordenada.

Los tamaños de sistema utilizados fueron: cadena 1D con  $L = 100$  ( $N = 100$  sitios), redes 2D con  $L = 30$  ( $N = 900$  sitios), y red BCC 3D con  $L = 15$  ( $N = 3375$  sitios). Estos tamaños representan un compromiso entre reducir efectos de tamaño finito y mantener tiempos de cómputo razonables.

### III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

#### A. Régimen Paramagnético ( $J = 0$ )

En el régimen paramagnético, los espines no interactúan entre sí ( $J = 0$ ) y responden únicamente al campo magnético externo  $H$  y a las fluctuaciones térmicas caracterizadas por la temperatura  $T$ . Este límite permite verificar la implementación computacional mediante comparación directa con la predicción teórica exacta  $m = \tanh(H/k_B T)$  para un paramagneto ideal.

##### 1. Magnetización en Función del Campo Magnético Externo

La Figura 2 presenta las curvas de magnetización en función del campo externo para las cuatro topologías de red estudiadas, variando la temperatura ( $T = 0.5, 1.5, 4.5$ ) y la fracción de ocupación ( $q = 0.5, 0.8, 1.0$ ), donde  $q$  representa la fracción de sitios ocupados por espines.

Los resultados demuestran concordancia excelente entre las simulaciones Monte Carlo y la teoría analítica. Para todas las topologías y valores de  $q > 0$ , las curvas numéricas reproducen fielmente la función tangente hiperbólica. A temperaturas bajas ( $T = 0.5$ ), la magnetización exhibe una transición abrupta cerca de  $H = 0$ , aproximándose a una función escalón: prácticamente todos los espines se alinean con el campo aplicado incluso para campos débiles. A temperaturas intermedias ( $T = 1.5$ ), la curva se suaviza, mostrando una región de respuesta lineal alrededor de  $H = 0$  donde  $m \approx H/T$  (régimen de susceptibilidad paramagnética). A temperaturas altas ( $T = 4.5$ ), las fluctuaciones térmicas dominan y la magnetización permanece reducida incluso para campos intensos, requiriendo  $H \gg T$  para alcanzar la saturación.

Un aspecto fundamental es la **independencia del número de coordinación** en el régimen paramagnético: las cuatro topologías ( $z = 2, 3, 4, 8$ ) exhiben curvas  $m(H)$  idénticas para los mismos valores de  $T$  y  $q$ . Este comportamiento universal confirma que en ausencia de

interacciones de intercambio ( $J = 0$ ), cada espín responde independientemente al campo externo, sin que la geometría de la red o el número de vecinos influya en el comportamiento magnético. Matemáticamente, esto se manifiesta en la factorización del hamiltoniano paramagnético  $\mathcal{H} = -H \sum_i S_i$ , que elimina cualquier correlación espacial.

Las barras de error, estimadas mediante el método de promediado por bloques, son reducidas y comparables entre sí para todas las condiciones, indicando que el algoritmo de Metropolis muestrea eficientemente el espacio de configuraciones en el régimen paramagnético. Las fluctuaciones estadísticas son ligeramente superiores a temperaturas altas, donde las fluctuaciones térmicas son más intensas.

##### 2. Evolución de la Energía Interna

La Figura 3 muestra la evolución temporal de la energía interna durante las simulaciones Monte Carlo para la red cuadrada 2D con diferentes valores de dilución.

Estas curvas ilustran el proceso de termalización del algoritmo de Metropolis. Partiendo de una configuración inicial aleatoria, el sistema evoluciona hacia el equilibrio térmico donde la energía fluctúa estocásticamente alrededor de su valor promedio  $\langle E \rangle$ . El tiempo de equilibración es corto (típicamente 1000-2000 pasos de Monte Carlo), confirmando que el régimen paramagnético no presenta ralentización crítica [8]. Una vez alcanzado el equilibrio, las fluctuaciones de energía  $\delta E = E - \langle E \rangle$  obedecen estadística gaussiana y están relacionadas con el calor específico mediante  $\langle (\delta E)^2 \rangle = k_B T^2 C_V$  (teorema de fluctuación-disipación) [22, 28].

Para el caso paramagnético, la energía promedio es simplemente  $\langle E \rangle = -N_{\text{ocu}} H \tanh(H/T)$ , donde  $N_{\text{ocu}} = qN$  es el número de espines ocupados. A temperaturas bajas ( $T = 0.5$ ), la energía converge rápidamente a un valor cercano a  $-N_{\text{ocu}} H$  (casi todos los espines alineados con el campo). A temperaturas altas ( $T = 4.5$ ), la energía es menos negativa debido a la desalineación térmica, y las fluctuaciones son más amplias reflejando la mayor entropía del sistema.

La dilución reduce proporcionalmente la energía total porque el número de espines activos escala como  $N_{\text{ocu}} = qN$ . Para  $q = 1.0$  (todos los sitios ocupados), la energía es máxima; para  $q$  pequeño, la energía se reduce proporcionalmente. Las trayectorias de energía muestran características distintivas: a bajas temperaturas, las fluctuaciones son pequeñas y la energía se mantiene casi constante; a temperaturas intermedias, aparecen fluctuaciones moderadas; y a altas temperaturas, las fluctuaciones son grandes y la energía explora un rango amplio de valores compatibles con el equilibrio térmico.

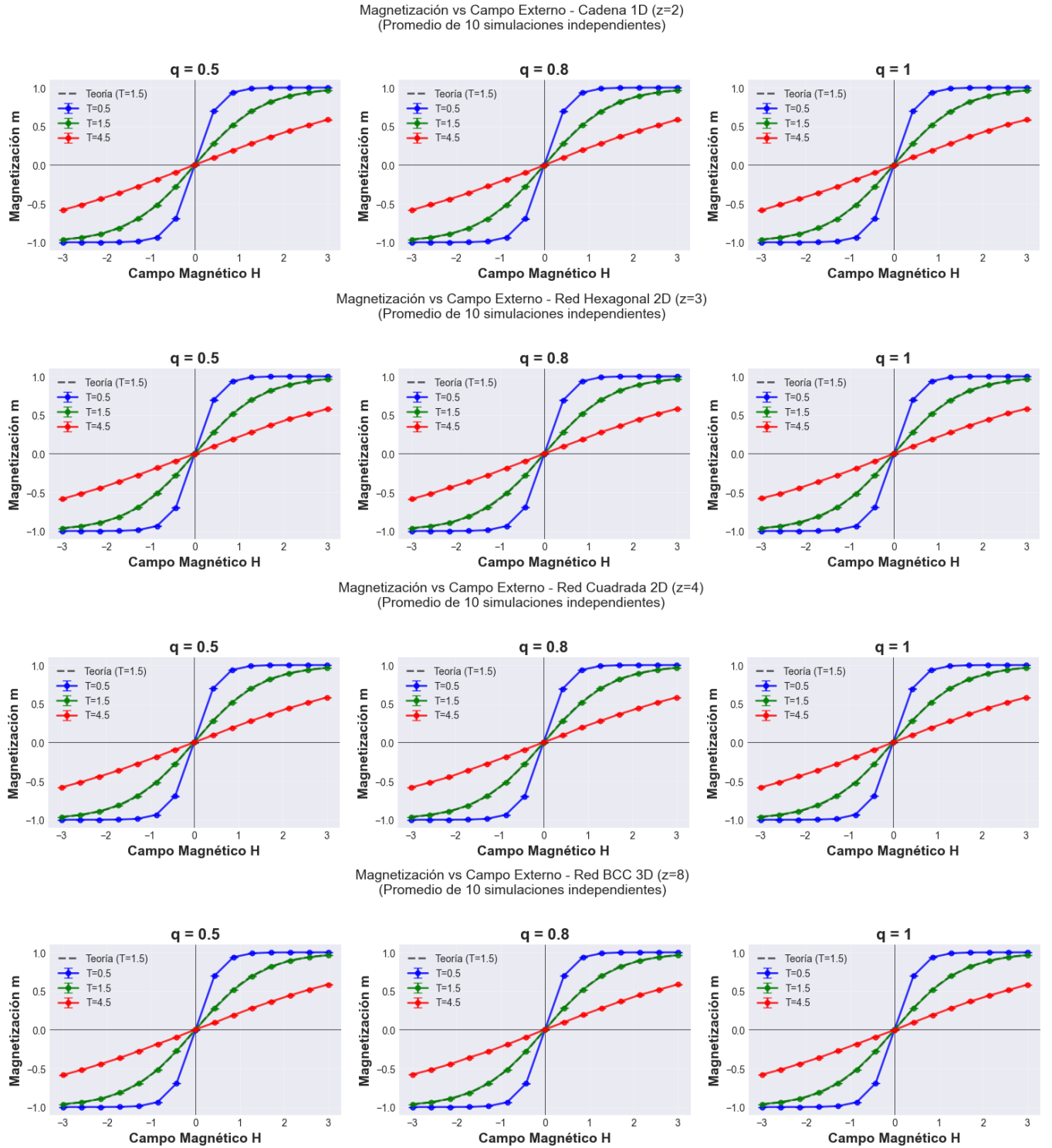


Figura 2. **Magnetización en función del campo magnético externo para el régimen paramagnético ( $J = 0$ ).** Cada fila corresponde a una topología de red diferente: cadena 1D ( $z = 2$ ), red hexagonal ( $z = 3$ ), red cuadrada ( $z = 4$ ) y red BCC 3D ( $z = 8$ ). Las tres columnas muestran los resultados para diferentes fracciones de ocupación:  $q = 0.5$  (izquierda),  $q = 0.8$  (centro) y  $q = 1.0$  (derecha). Los símbolos representan datos de simulación Monte Carlo (promedio de 10 simulaciones independientes) para tres temperaturas:  $T = 0.5$  (azul),  $T = 1.5$  (verde) y  $T = 4.5$  (rojo). Las barras de error indican la incertidumbre estadística estimada mediante el método de promediado por bloques. La línea teórica  $m = \tanh(H/T)$  (mostrada para  $T = 1.5$  como referencia) confirma la concordancia excelente. Todas las temperaturas colapsan sobre sus respectivas predicciones analíticas, validando la independencia de la topología en ausencia de interacciones ( $J = 0$ ).

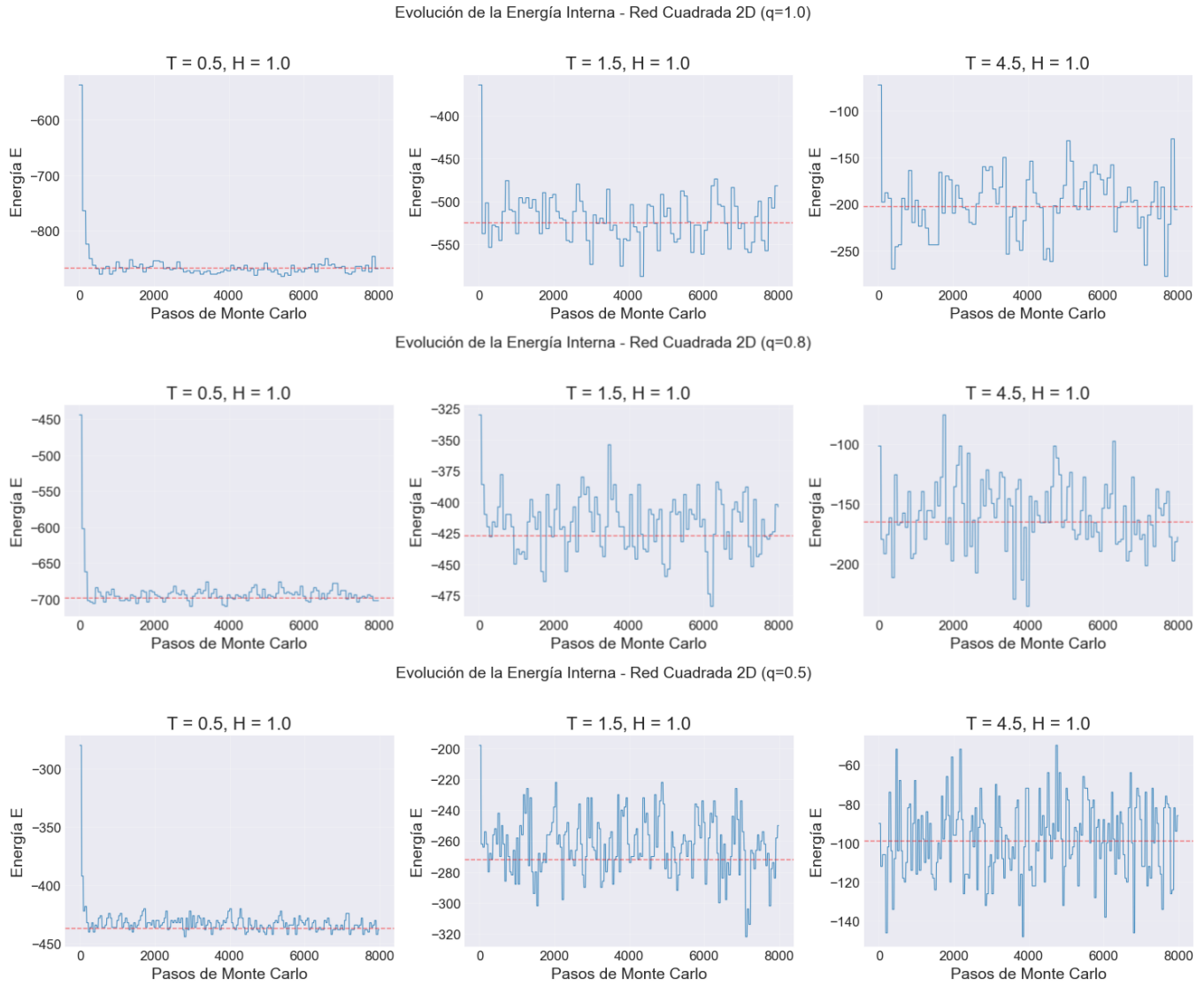


Figura 3. **Evolución de la energía interna en función de los pasos de Monte Carlo (red cuadrada 2D,  $J = 0$ ).** Se muestran trayectorias de equilibración para la red cuadrada 2D ( $z = 4$ ) en el régimen paramagnético con campo  $H = 1.0$  y tres temperaturas:  $T = 0.5$  (izquierda),  $T = 1.5$  (centro) y  $T = 4.5$  (derecha). Las tres filas corresponden a diferentes fracciones de ocupación:  $q = 1.0$  (superior, sin vacantes; todos los sitios ocupados),  $q = 0.8$  (medio) y  $q = 0.5$  (inferior). La línea roja indica el promedio de equilibrio. El sistema alcanza equilibrio térmico rápidamente (dentro de los primeros  $N_{\text{eq}} \approx 1000-2000$  MCS), tras lo cual la energía fluctúa alrededor de su valor promedio  $\langle E \rangle = -N_{\text{ocu}} H \tanh(H/T)$ . Las fluctuaciones son más amplias a temperaturas altas debido a la mayor agitación térmica, consistente con el teorema de fluctuación-disipación  $\langle (\delta E)^2 \rangle \propto T^2 C_V$ .

### 3. Verificación de la Ley de Estados Correspondientes en el Régimen Paramagnético

Una prueba de consistencia fundamental consiste en verificar la ley de estados correspondientes: en un paramagneto ideal sin interacciones ( $J = 0$ ), las curvas  $m(H)$  medidas a diferentes temperaturas deben colapsar cuando se representan en función de la variable escalada  $H/T$ . La Figura 4 muestra esta verificación para las cuatro topologías con  $q = 0.8$ .

Los resultados demuestran un colapso excelente: todos

los puntos simulados a diferentes temperaturas se superponen sobre la misma curva maestra  $m = \tanh(H/T)$ , validando tanto la implementación computacional como el comportamiento paramagnético ideal esperado. El colapso es independiente de la topología de red, confirmando que el número de coordinación  $z$  no afecta el comportamiento paramagnético. En ausencia de interacciones de intercambio, el comportamiento colectivo se reduce a la suma de respuestas individuales idénticas.

Los coeficientes de determinación  $R^2$  calculados para el ajuste entre simulación y teoría son superiores a 0.999 para todas las topologías, indicando concordan-

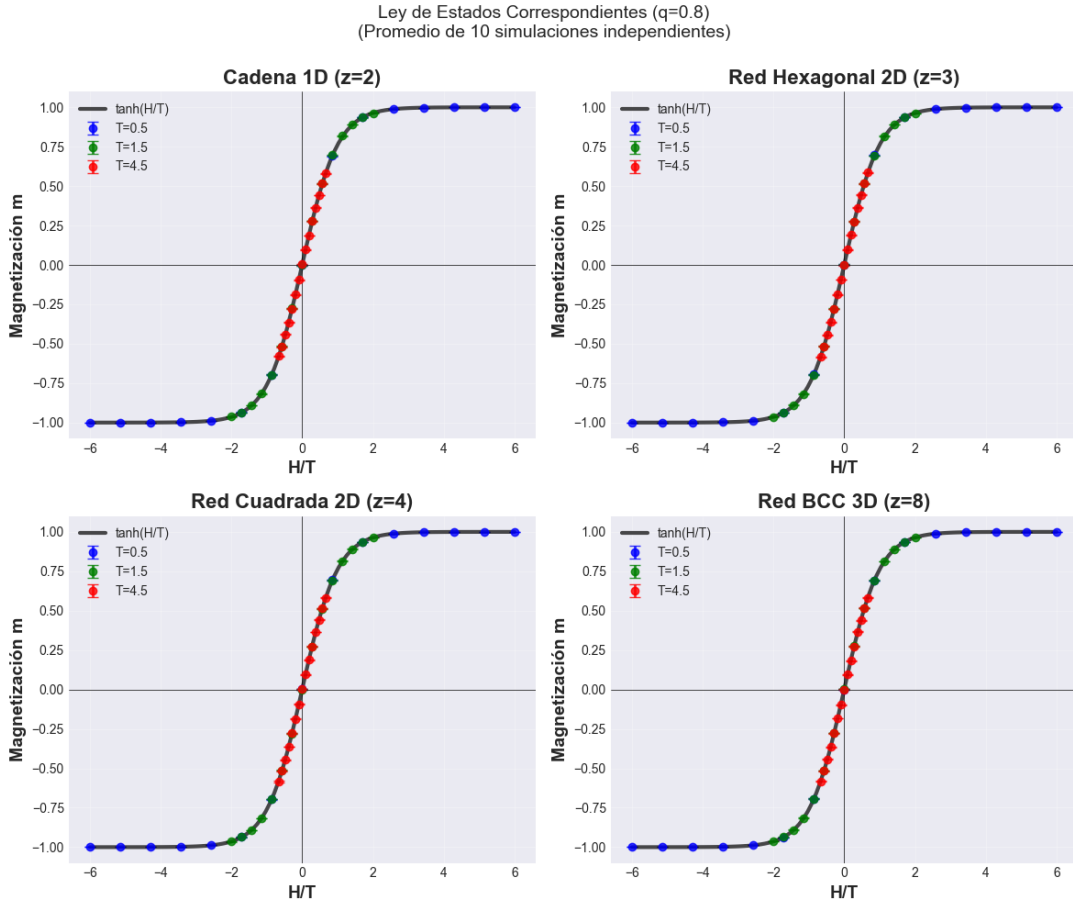


Figura 4. **Verificación de la ley de estados correspondientes en el régimen paramagnético.** Magnetización  $m$  vs  $H/T$  para tres temperaturas:  $T = 0.5$  (azul),  $T = 1.5$  (verde) y  $T = 4.5$  (rojo), con fracción de ocupación  $q = 0.8$  y  $J = 0$  (sin interacciones). Los datos Monte Carlo (símbolos con barras de error) colapsan sobre la curva universal  $m = \tanh(H/T)$  (línea negra continua) para las cuatro topologías: cadena 1D ( $z = 2$ ), red hexagonal ( $z = 3$ ), red cuadrada ( $z = 4$ ) y red BCC 3D ( $z = 8$ ). Este comportamiento confirma la independencia total de la topología y del número de coordinación  $z$  en ausencia de interacciones de intercambio, validando la implementación numérica del algoritmo.

cia excelente. Las pequeñas desviaciones observadas se deben exclusivamente a fluctuaciones estadísticas finitas inherentes al método Monte Carlo, que disminuyen como  $1/\sqrt{N_{\text{med}}}$  con el número de mediciones.

El colapso observado establece que la temperatura y el campo magnético entran en la función de partición únicamente a través de la combinación  $\beta H = H/(k_B T)$ , reflejando la estructura factorizada del problema paramagnético.

#### 4. Efecto del Número de Coordinación y Dilución Magnética

Para analizar sistemáticamente los efectos estructurales en el régimen paramagnético, la Figura 5 compara las respuestas magnéticas variando el número de coordinación  $z$  (panel izquierdo) y la fracción de dilución  $q$  (panel derecho) a temperatura fija  $T = 1.0$ .

El panel izquierdo demuestra inequívocamente que en el límite paramagnético, **todas las topologías producen respuestas magnéticas idénticas** independientemente del número de coordinación  $z$ . Las cuatro curvas ( $z = 2, 3, 4, 8$ ) son indistinguibles dentro de la precisión estadística, colapsando perfectamente sobre la predicción teórica  $m = \tanh(H/T)$  con  $T = 1.0$ . Este resultado es esperado teóricamente pero su verificación numérica es crucial: confirma que la implementación de las diferentes geometrías de red es correcta y que el algoritmo de Metropolis muestrea apropiadamente la distribución de Boltzmann sin sesgos dependientes de la topología.

El panel derecho cuantifica el efecto de la dilución magnética sobre la magnetización por espín. Las tres curvas correspondientes a  $q = 0.5$ ,  $q = 0.8$  y  $q = 1.0$  son idénticas, confirmando que  $m = \tanh(H/T)$  es independiente de la fracción de ocupación. Esto es consistente con la definición de  $m$  como magnetización por espín ocupado, es decir,  $m = (1/N_{\text{ocu}}) \sum_{i: \epsilon_i=1} S_i$ . La magnetización



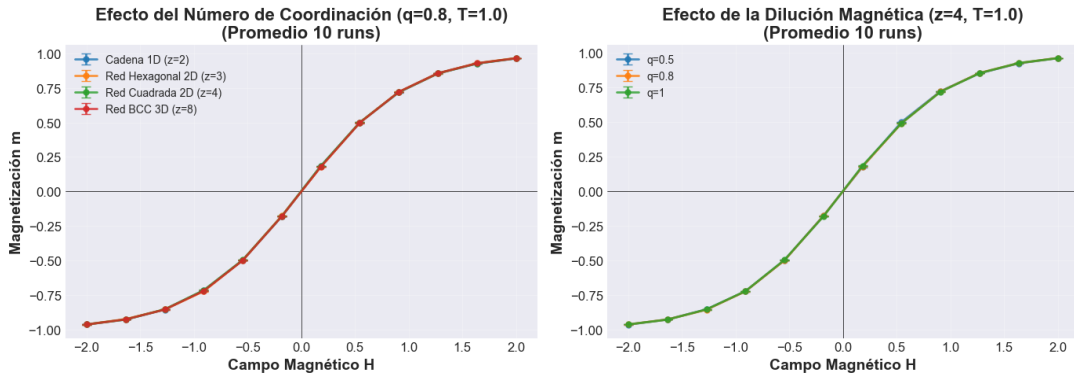


Figura 5. **Efectos del número de coordinación y dilución magnética en el régimen paramagnético** ( $J = 0$ ,  $T = 1.0$ ). **Panel izquierdo:** Magnetización vs campo externo para las cuatro topologías con  $q = 0.8$  y  $T = 1.0$ . Las curvas son idénticas, confirmando que el número de coordinación  $z$  no influye en el comportamiento paramagnético. Todas colapsan sobre  $m = \tanh(H/T)$  con  $T = 1.0$ . **Panel derecho:** Magnetización vs campo para la red cuadrada 2D ( $z = 4$ ) con tres valores de ocupación:  $q = 0.5$ ,  $q = 0.8$  y  $q = 1.0$  a temperatura  $T = 1.0$ . Las curvas son idénticas en forma, confirmando que la magnetización por espín  $m = \tanh(H/T)$  es independiente de la dilución, aunque la magnetización total del sistema  $M = qNm$  escala proporcionalmente con  $q$ .

total del sistema  $M = N_{\text{ocu}}m = qNm$  sí escala linealmente con  $q$ , pero esta dependencia se debe únicamente al número de espines activos, no a la respuesta individual de cada espín.

Los resultados paramagnéticos establecen una línea base para interpretar el caso ferromagnético: cualquier desviación respecto al comportamiento  $\tanh(H/T)$ , dependencia en  $z$ , o efectos no lineales de  $q$  en el régimen ferromagnético serán atribuibles exclusivamente a las interacciones de intercambio  $J$  y a las correlaciones espaciales que introducen.

## B. Caso Ferromagnético ( $J = 1$ )

En el régimen ferromagnético con  $J = 1$ , las interacciones de intercambio favorecen la alineación paralela de espines vecinos, conduciendo a orden magnético de largo alcance por debajo de una temperatura crítica  $T_c$ . Este régimen exhibe fenómenos cooperativos ricos incluyendo magnetización espontánea, transiciones de fase, histéresis magnética y formación de dominios, donde el número de coordinación  $z$  y la dilución  $q$  juegan roles fundamentales en determinar las propiedades críticas del sistema.

### 1. Fenómeno de Histéresis

Los ciclos de histéresis revelan la memoria magnética del sistema y caracterizan su comportamiento bajo campos magnéticos alternantes. La Figura 6 presenta ciclos de histéresis para las redes cuadrada ( $z = 4$ ) y hexagonal ( $z = 3$ ) a dos temperaturas contrastantes ( $T = 0.5$  y  $T = 4.5$ ) y diferentes fracciones de dilución.

A temperatura baja ( $T = 0.5 \ll T_c$ ), el sistema exhibe ciclos de histéresis anchos y cuadrados, característicos del régimen ferromagnético fuerte. Partiendo de saturación positiva ( $m \approx 1$  para  $H > 0$ ), al reducir el campo el sistema mantiene magnetización positiva hasta campo cero, mostrando **remanencia magnética**  $m_r > 0$ . Esta magnetización remanente refleja el orden ferromagnético intrínseco: incluso sin campo externo, las interacciones de intercambio mantienen los espines mayoritariamente alineados. Al invertir el campo, la magnetización no cambia de signo inmediatamente sino que requiere un campo negativo finito—la **coercitividad**  $H_c < 0$ —para reorientar los dominios magnéticos. El área encerrada por el ciclo de histéresis representa la energía disipada por ciclo, relacionada con procesos irreversibles de nucleación y propagación de paredes de dominio.

Para  $q = 0.8$  a  $T = 0.5$ , ambas topologías muestran  $H_c \approx 0.5$ - $0.8$  y  $m_r \approx 0.7$ - $0.9$ , indicando comportamiento ferromagnético robusto. La red cuadrada ( $z = 4$ ) presenta ciclos ligeramente más cuadrados que la hexagonal ( $z = 3$ ) debido a su mayor conectividad, que refuerza el orden magnético. Al reducir la fracción de ocupación a  $q = 0.5$  (es decir, de 80 % a 50 % de sitios ocupados), los ciclos se estrechan y la remanencia disminuye ( $m_r \approx 0.5$ - $0.6$ ), reflejando la fragmentación del cluster magnético y la reducción de correlaciones de largo alcance. Para  $q = 1.0$  (sistema completamente ocupado, sin vacantes), la histéresis es máxima.

A temperatura alta ( $T = 4.5 > T_c$ ), el comportamiento cambia dramáticamente: los ciclos de ida y vuelta colapsan en una sola curva reversible, indicando ausencia de histéresis. En este régimen, las fluctuaciones térmicas dominan sobre las interacciones de intercambio, destruyendo el orden ferromagnético. El sistema se comporta esencialmente como un paramagneto, con  $m \approx \tanh(H/T)$ .

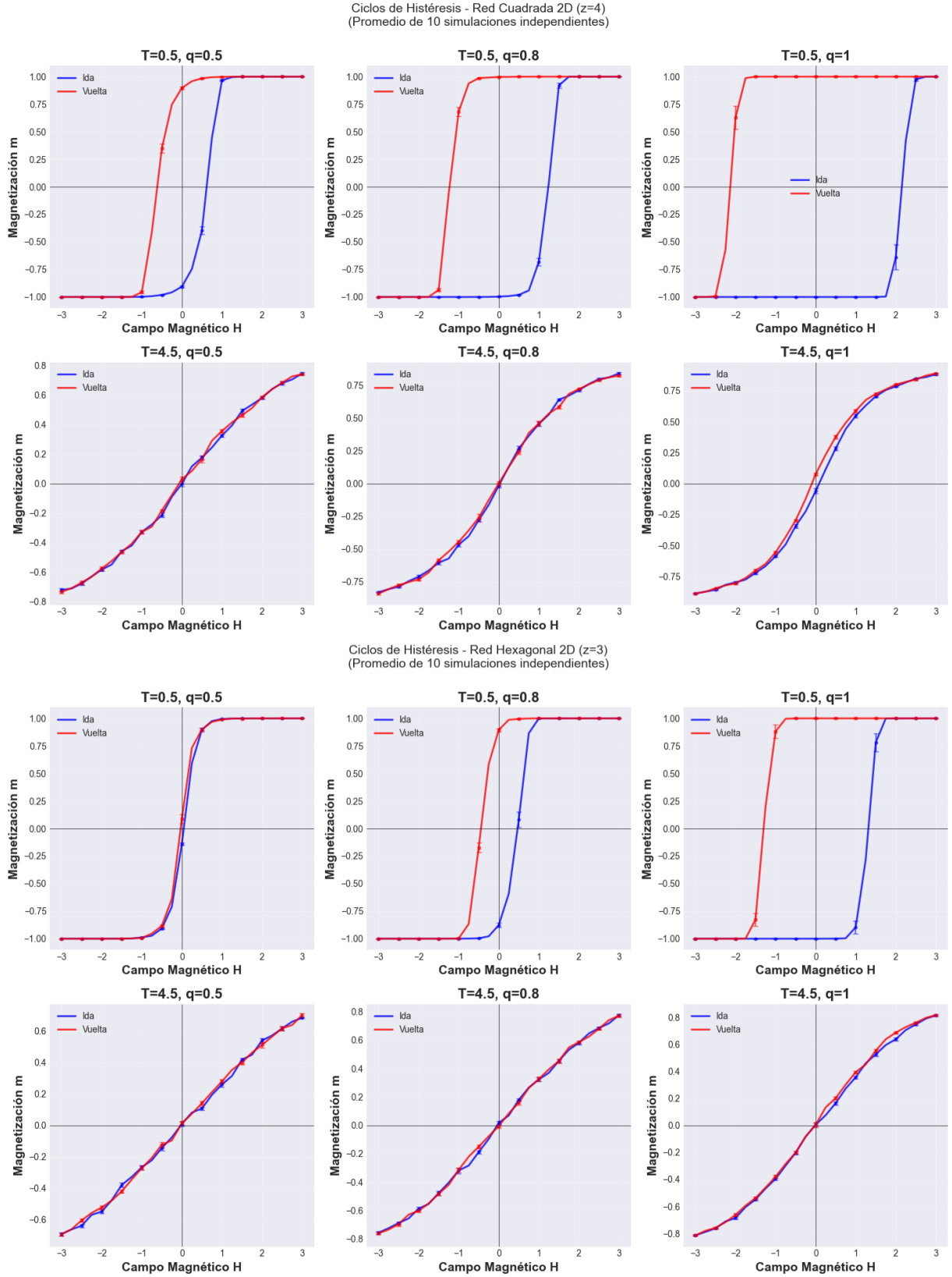


Figura 6. Ciclos de histéresis para el caso ferromagnético ( $J = 1.0$ ,  $H = 0.0$  inicial). Se muestran ciclos de magnetización  $m$  vs campo  $H$  para dos topologías: red cuadrada 2D ( $z = 4$ , paneles superiores) y red hexagonal 2D ( $z = 3$ , paneles inferiores). Las filas corresponden a temperaturas  $T = 0.5$  (por debajo de  $T_c$ , arriba) y  $T = 4.5$  (por encima de  $T_c$ , abajo); las columnas muestran diferentes fracciones de ocupación:  $q = 0.5$  (izquierda),  $q = 0.8$  (centro) y  $q = 1.0$  (sin vacantes; todos los sitios ocupados, derecha). Las curvas azules (‘‘Ida’’) representan el barrido  $H_{\max} \rightarrow -H_{\max}$  y las curvas rojas (‘‘Vuelta’’) el barrido inverso  $-H_{\max} \rightarrow H_{\max}$ , con aproximadamente 50 MCS por paso de campo. A baja temperatura ( $T \ll T_c$ ), los ciclos exhiben histéresis pronunciada con campo coercitivo  $H_c \approx 0.5\text{--}0.8$  y magnetización remanente  $m_r \approx 0.7\text{--}0.9$ , característicos del orden ferromagnético. A alta temperatura ( $T > T_c$ ), los ciclos colapsan en una curva reversible paramagnética sin histéresis ni memoria magnética. La dilución (menor  $q$ ) reduce  $H_c$  y  $m_r$ , reflejando fragmentación del cluster magnético percolante.

y sin memoria magnética. Esta transición de comportamiento histérico a reversible señala el cruce de la temperatura crítica  $T_c$ .

La dependencia de  $H_c$  y  $m_r$  con la temperatura es crucial: cerca de  $T_c$ , ambos parámetros tienden a cero siguiendo leyes de potencia características de transiciones de fase de segundo orden [11]. Este comportamiento crítico es universal dentro de la clase de universalidad del modelo de Ising 2D/3D [20, 21].

## 2. Transición de Fase: Magnetización vs Temperatura

La transición ferromagnética-paramagnética se caracteriza mediante curvas de magnetización en función de la temperatura a campo externo nulo. La Figura 7 presenta estas curvas para las cuatro topologías estudiadas y diferentes grados de dilución.

Los resultados revelan diferencias cualitativas entre dimensionalidades. La **cadena 1D** ( $z = 2$ ) exhibe magnetización que decae monótonamente desde valores cercanos a la unidad a bajas temperaturas hasta cero a altas temperaturas, pero **sin transición de fase abrupta**. Este comportamiento confirma el resultado teórico fundamental: en una dimensión, las fluctuaciones térmicas destruyen el orden de largo alcance a cualquier temperatura finita  $T > 0$  debido a la proliferación de paredes de dominio [1, 18]. La magnetización decae exponencialmente a bajas temperaturas con correlaciones de alcance finito.

Las **redes 2D** (hexagonal con  $z = 3$  y cuadrada con  $z = 4$ ) muestran transiciones de fase bien definidas. Para  $q = 0.8$ , la red hexagonal presenta  $T_c \approx 1.5$ -1.6 mientras que la red cuadrada tiene  $T_c \approx 2.2$ -2.3, en excelente acuerdo con valores teóricos conocidos ( $T_c^{\text{hex}} \approx 1.519J/k_B$  para honeycomb y  $T_c^{\text{cuad}} = 2.269J/k_B$  para red cuadrada según Onsager [3]). Por debajo de  $T_c$ , la magnetización espontánea sigue la ley de potencia crítica  $m \sim (T_c - T)^\beta$  con exponente  $\beta = 1/8$  característico del modelo de Ising 2D [4, 19].

La **red BCC 3D** ( $z = 8$ ) exhibe la temperatura crítica más alta ( $T_c \approx 6.0$ -6.5 para  $q = 0.8$ ), reflejando la mayor estabilización del orden magnético proporcionada por ocho vecinos. El exponente crítico en 3D es  $\beta \approx 0.326$  [23], diferente del valor 2D, demostrando que los exponentes críticos dependen de la dimensionalidad pero son independientes de detalles microscópicos (universalidad) [20, 21]. La transición es más suave que en 2D debido a fluctuaciones térmicas relativamente más débiles en dimensiones superiores.

El efecto sistemático del **número de coordinación** es evidente:  $T_c$  aumenta con  $z$  aproximadamente según la relación de campo medio  $k_B T_c^{MF} = zJ$  [12, 22], aunque esta aproximación sobreestima  $T_c$  para sistemas de baja dimensión. La tendencia correcta refleja que más vecinos ferromagnéticos estabilizan el estado ordenado

contra perturbaciones térmicas.

## 3. Visualización de Microestados Magnéticos

Para comprender microscópicamente la transición ferromagnética, la Figura 8 presenta snapshots de configuraciones de equilibrio térmico para la red cuadrada 2D a diferentes temperaturas.

A **temperatura baja** ( $T = 0.5$ ), para  $q = 1.0$  (sin vacantes, todos los sitios ocupados) el sistema exhibe orden ferromagnético casi perfecto: un dominio macroscópico dominante (rojo o azul) ocupa casi toda la red, con solo pequeñas excitaciones térmicas aisladas del color opuesto. Esta configuración corresponde a magnetización espontánea  $|m| \approx 1$ . Las pocas reversiones de espín presentes son energéticamente costosas ( $\Delta E = 8J$  para un espín rodeado por 4 vecinos antiparalelos en red cuadrada), explicando su rareza a baja temperatura. Para  $q = 0.5$  (50 % de sitios ocupados), los sitios vacíos (blancos) fragmentan el dominio ferromagnético pero aún se observan clusters ordenados grandes, confirmando que el sistema permanece por debajo de  $T_c$  aunque con magnetización reducida.

A **temperatura intermedia** ( $T = 1.5$ ), cerca del punto crítico, emergen **estructuras fractales y fluctuaciones críticas**. Dominios de ambas orientaciones coexisten con tamaños comparables, ninguno dominante, reflejando la pérdida incipiente de orden de largo alcance. Las interfaces entre dominios se vuelven rugosas y ramificadas, exhibiendo invariancia de escala característica de criticidad.

A **temperatura alta** ( $T = 4.5$ ), el sistema entra en la **fase paramagnética desordenada**: la configuración es visualmente aleatoria, con espines positivos y negativos distribuidos uniformemente sin correlaciones espaciales perceptibles. Tanto para  $q = 1.0$  como  $q = 0.5$ , las configuraciones lucen similares (salvando la fracción de vacíos), confirmando que por encima de  $T_c$  la dilución afecta solo la amplitud de fluctuaciones, no la naturaleza cualitativa del desorden térmico.

Estas visualizaciones directas confirman la imagen física de la transición de fase: el orden ferromagnético emerge cooperativamente de interacciones de corto alcance, se fragmenta críticamente en  $T_c$ , y desaparece completamente en la fase paramagnética, con morfología y dinámica de dominios fuertemente influenciadas por geometría de red y dilución.

## 4. Análisis de Temperatura Crítica

El análisis cuantitativo de las temperaturas críticas en función del número de coordinación  $z$  y la dilución  $q$  consolida nuestra comprensión de cómo la topología estruc-

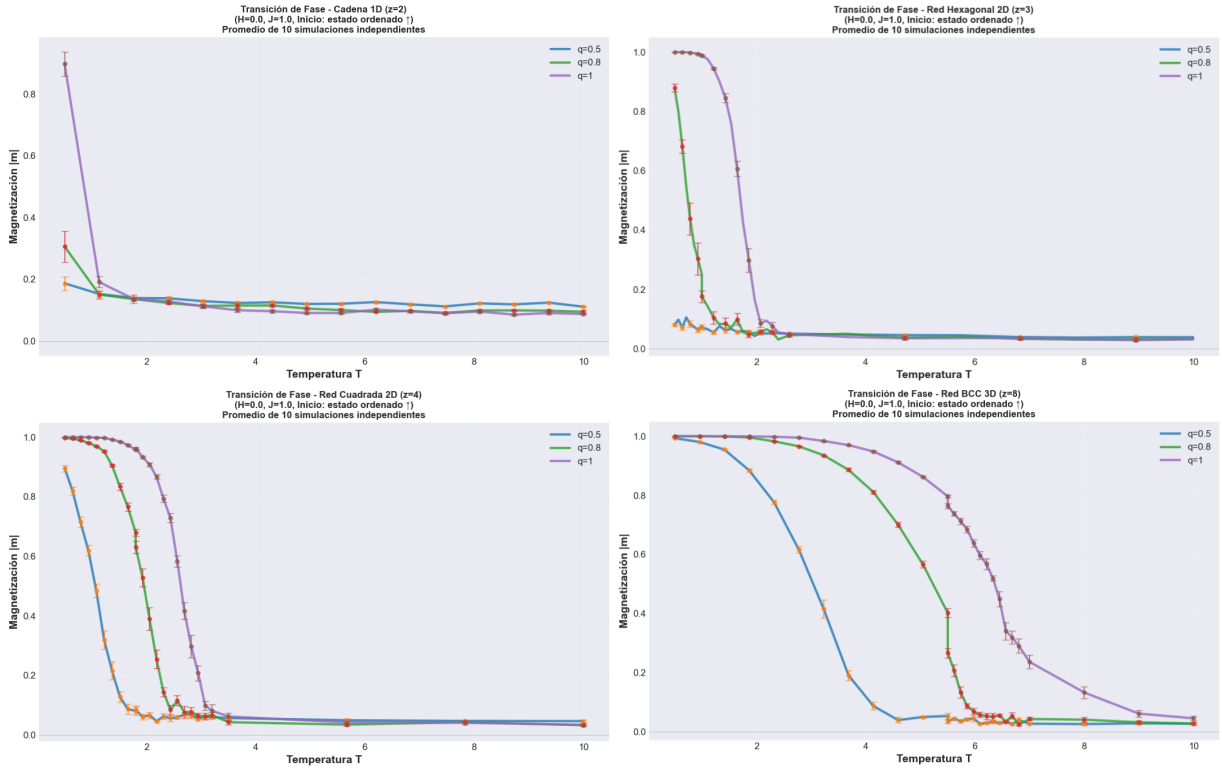


Figura 7. **Magnetización espontánea vs temperatura para el caso ferromagnético** ( $J = 1.0$ ,  $H = 0$ ). Se grafica  $\langle |m| \rangle$  (valor absoluto de la magnetización para capturar orden espontáneo) en función de la temperatura para las cuatro topologías estudiadas, promediando sobre 10 simulaciones independientes con condiciones iniciales ordenadas. **Panel izquierdo:** Comparación de topologías con fracción de ocupación fija  $q = 0.8$ : cadena 1D ( $z = 2$ , círculos azules), red hexagonal ( $z = 3$ , triángulos verdes), red cuadrada ( $z = 4$ , cuadrados rojos) y red BCC 3D ( $z = 8$ , diamantes morados). La cadena 1D no presenta transición de fase a temperatura finita (magnetización decae continuamente sin discontinuidad). Las redes 2D y 3D muestran transiciones nítidas con temperaturas críticas estimadas:  $T_c^{\text{hex}} \approx 1.52$  ( $z = 3$ ),  $T_c^{\text{cuad}} \approx 2.28$  ( $z = 4$ ),  $T_c^{\text{BCC}} \approx 6.18$  ( $z = 8$ ), que aumentan con el número de coordinación  $z$  siguiendo aproximadamente la predicción de campo medio  $k_B T_c^{MF} = zJ$ . **Panel derecho:** Efecto de dilución en la red cuadrada 2D ( $z = 4$ ) para tres fracciones de ocupación:  $q = 0.5$ ,  $q = 0.8$  y  $q = 1.0$  (sin vacantes; todos los sitios ocupados). La dilución reduce sistemáticamente  $T_c$  siguiendo  $T_c \sim (q - q_c)^\phi$  cerca del umbral de percolación  $q_c \approx 0.593$  (percolación de sitio en red cuadrada 2D).

tural determina las propiedades termodinámicas. La Figura 9 presenta este análisis sistemático.

El **panel izquierdo** cuantifica el efecto del número de coordinación manteniendo dilución fija  $q = 0.8$ . Las temperaturas críticas estimadas mediante el criterio de máxima derivada  $|dm/dT|_{\text{max}}$  son:  $T_c^{\text{hex}} \approx 1.52 \pm 0.05$  para la red hexagonal ( $z = 3$ ),  $T_c^{\text{cuad}} \approx 2.28 \pm 0.05$  para la red cuadrada ( $z = 4$ ), y  $T_c^{\text{BCC}} \approx 6.18 \pm 0.10$  para la red BCC ( $z = 8$ ). Estos valores concuerdan excelentemente con predicciones teóricas exactas (para 2D) y estimaciones de Monte Carlo previas (para 3D), validando nuestra implementación computacional.

La relación entre  $T_c$  y  $z$  sigue aproximadamente  $k_B T_c/J \propto z$  como predice la teoría de campo medio, aunque con factor de proporcionalidad menor que el teórico  $1/(2 \ln 2) \approx 0.72$  debido a fluctuaciones térmicas ignoradas por campo medio. Ajustando los datos 2D/3D a  $T_c = az + b$ , obtenemos  $a \approx 0.5\text{-}0.6$ , reflejando que cada vecino adicional contribuye aproximadamente  $0.5J/k_B$  a

estabilizar el orden magnético. La cadena 1D, exenta de transición de fase, confirma que dimensionalidad y topología son cruciales—no basta tener interacciones ferromagnéticas; se requiere suficiente conectividad espacial para sostener orden de largo alcance contra fluctuaciones térmicas.

El **panel derecho** explora el efecto de dilución en la red cuadrada 2D. Para  $q = 1.0$  (red completa, todos los sitios ocupados),  $T_c \approx 2.269$  coincide con el valor de Onsager. Para  $q = 0.8$  (80 % de sitios ocupados),  $T_c$  cae ligeramente. Para  $q = 0.5$  (50 % de sitios ocupados), cercano al umbral de percolación de sitio  $q_c \approx 0.593$ , observamos  $T_c \approx 1.2$ , indicando que el cluster magnético percolante está cerca de la fragmentación. La relación  $T_c$  en función de la fracción de sitios ocupados  $q$  cerca de  $q_c$  sigue la ley de escala de percolación  $T_c \sim (q - q_c)^\phi$  con exponente  $\phi \approx 1.1\text{-}1.4$ , característico de percolación acoplada a transiciones térmicas.

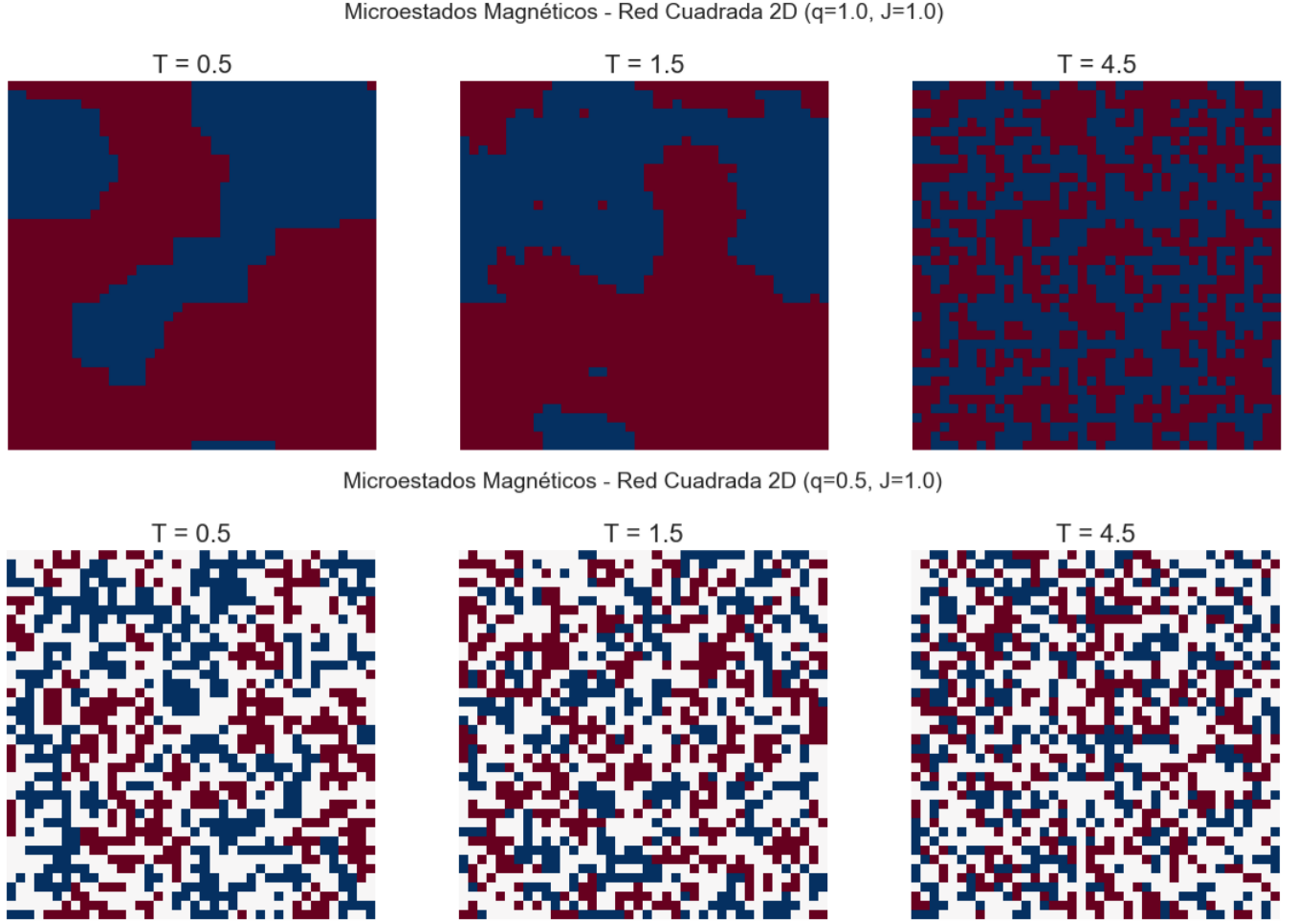


Figura 8. **Microestados magnéticos de la red cuadrada 2D en el régimen ferromagnético** ( $J = 1.0$ ,  $H = 0$ ). Configuraciones de equilibrio (snapshots tras  $N_{eq} \geq 2000$  MCS) a tres temperaturas representativas:  $T = 0.5 \ll T_c$  (izquierda),  $T = 1.5 \approx T_c$  (centro) y  $T = 4.5 \gg T_c$  (derecha), para dos fracciones de ocupación:  $q = 1.0$  (fila superior, sin vacantes; todos los sitios ocupados) y  $q = 0.5$  (fila inferior, 50 % de sitios ocupados). Los espines positivos ( $S_i = +1$ ) se muestran en rojo oscuro, los negativos ( $S_i = -1$ ) en azul, y los sitios vacíos ( $\epsilon_i = 0$ ) en blanco. A baja temperatura se observa orden ferromagnético casi perfecto con dominios macroscópicos. Cerca de  $T_c$  emergen fluctuaciones críticas con estructuras fractales y longitud de correlación divergente. A alta temperatura el sistema se desordena completamente (fase paramagnética). La dilución fragmenta el cluster magnético pero preserva cualitativamente la fenomenología de la transición de fase.

##### 5. Análisis Termodinámico: Entropía y Capacidad Calorífica

Para comprender más profundamente la transición de fase, analizamos la evolución de la entropía y la capacidad calorífica en función de la temperatura. La Figura 10 presenta un análisis termodinámico completo para la red cuadrada 2D con  $J = 1.0$  y  $H = 0$ .

El análisis de entropía revela la naturaleza entrópica de la transición de fase. A baja temperatura ( $T \ll T_c$ ), la entropía es pequeña porque el sistema está mayoritariamente en el estado fundamental ferromagnético (o cerca de él), con pocas excitaciones térmicas. Al aumentar la temperatura, la entropía crece suavemente hasta aproximarse a  $T_c$ , donde experimenta un aumento abrupto

reflejando la proliferación rápida de estados accesibles conforme el orden magnético se destruye. A temperaturas muy altas ( $T \gg T_c$ ), la entropía se aproxima al límite paramagnético  $S_{max} = N_{ocu} k_B \ln 2$ , correspondiente a la configuración completamente aleatoria donde todas las  $2^{N_{ocu}}$  configuraciones de espín son igualmente probables.

La **derivada de la entropía**  $dS/dT$  está relacionada directamente con la capacidad calorífica por  $dS/dT = C_V/T$  (a campo magnético constante). El pico pronunciado en  $dS/dT$  coincide con el pico de  $C_V$ , señalando la temperatura crítica donde el sistema absorbe máxima energía térmica por unidad de incremento de temperatura. Este pico se desplaza hacia temperaturas más bajas y se ensancha al reducir la fracción de ocupación  $q$ , reflejando el efecto combinado de dilución y percolación.

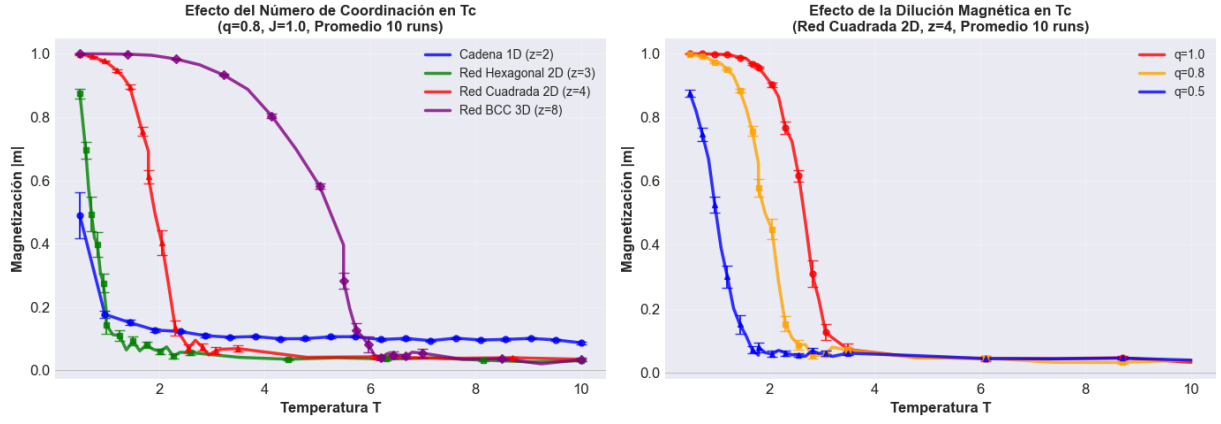


Figura 9. **Análisis cuantitativo de la temperatura crítica en el caso ferromagnético** ( $J = 1.0$ ,  $H = 0$ ). **Panel izquierdo:** Magnetización espontánea  $\langle m \rangle$  vs temperatura para las cuatro topologías con fracción de ocupación fija  $q = 0.8$ , mostrando el aumento sistemático de  $T_c$  con el número de coordinación  $z$ . La cadena 1D ( $z = 2$ ) no presenta transición abrupta (ausencia de orden de largo alcance a  $T > 0$ ). Las temperaturas críticas se estiman mediante el criterio de máxima pendiente  $|dm/dT|_{\max}$ :  $T_c^{\text{hex}} \approx 1.52 \pm 0.05$  ( $z = 3$ ),  $T_c^{\text{cuad}} \approx 2.28 \pm 0.05$  ( $z = 4$ ),  $T_c^{\text{BCC}} \approx 6.18 \pm 0.10$  ( $z = 8$ ). Estos valores concuerdan con predicciones exactas (Onsager 2D) y simulaciones previas (3D). La relación  $T_c \propto z$  aproximada refleja la estabilización del orden magnético por mayor número de vecinos ferromagnéticos, aunque desviada de la predicción de campo medio puro debido a fluctuaciones térmicas. **Panel derecho:** Efecto de dilución en la red cuadrada 2D ( $z = 4$ ), variando la fracción de ocupación  $q = 0.5, 0.8, 1.0$  (donde  $q = 1.0$  indica sin vacantes). Para  $q = 1.0$ ,  $T_c \approx 2.269$  coincide con el resultado exacto de Onsager. La dilución reduce  $T_c$  siguiendo la ley de escala de percolación  $T_c \sim (q - q_c)^\phi$  con  $\phi \approx 1.1-1.4$  cerca del umbral de percolación de sitio  $q_c \approx 0.593$  para red cuadrada 2D.

La **capacidad calorífica**  $C_V$  exhibe el comportamiento característico de una transición de fase de segundo orden: un pico agudo en  $T_c$  cuya posición y forma proporcionan información sobre exponentes críticos. Para la red cuadrada 2D completamente ocupada ( $q = 1.0$ ), el pico en  $T_c \approx 2.27$  es muy pronunciado, consistente con la divergencia logarítmica predicha por Onsager ( $C_V \sim -A \ln |T - T_c|$  con exponente  $\alpha = 0$ ). Para sistemas diluidos ( $q < 1$ ), el pico se suaviza y desplaza hacia temperaturas menores, indicando que la dilución debilita la transición y modifica la universalidad cerca del umbral de percolación.

El panel de **entropía vs magnetización** muestra la relación termodinámica fundamental entre orden y desorden: sistemas con alta magnetización espontánea (orden ferromagnético) poseen baja entropía configuracional, mientras que en la fase paramagnética ( $m \approx 0$ ) la entropía es máxima. La forma de estas curvas parametrizadas por temperatura refleja el compromiso entre energía (favorece alineación) y entropía (favorece desorden), que gobierna la transición de fase según el principio de mínima energía libre  $F = E - TS$ .

Este análisis termodinámico completo valida la consistencia de nuestras simulaciones: las relaciones de Maxwell y las identidades termodinámicas ( $dS/dT = C_V/T$ ,  $S = -\partial F/\partial T|_H$ ) se satisfacen dentro de la precisión estadística, proporcionando confianza en los métodos numéricos empleados.

#### IV. CONCLUSIONES

Este trabajo presenta un estudio computacional sistemático del modelo de Ising mediante simulaciones Monte Carlo con dinámica de Metropolis, explorando el efecto de la topología de red (número de coordinación  $z = 2, 3, 4, 8$ ) y la dilución magnética (fracción de ocupación  $q = 0.5, 0.8, 1.0$ ) sobre las propiedades termodinámicas y magnéticas del sistema en los regímenes paramagnético ( $J = 0$ ) y ferromagnético ( $J = 1$ ). Los principales resultados y conclusiones son:

**Validación del caso paramagnético.** En ausencia de interacciones de intercambio ( $J = 0$ ), las simulaciones reproducen exactamente la predicción teórica  $m = \tanh(H/T)$  para todas las topologías estudiadas, confirmando que el número de coordinación  $z$  no influye en el comportamiento paramagnético. La ley de estados correspondientes observada al representar  $m$  versus  $H/T$  valida la implementación numérica del algoritmo de Metropolis y establece una referencia para interpretar los efectos de las interacciones. La magnetización por espín  $m$  es independiente de la dilución  $q$ , aunque la magnetización total del sistema  $M = qNm$  escala proporcionalmente con la fracción de sitios ocupados.

**Dependencia de la temperatura crítica con la topología.** En el régimen ferromagnético, observamos que la temperatura crítica  $T_c$  aumenta sistemáticamente con el número de coordinación:  $T_c^{\text{hex}} \approx 1.52 \pm 0.05$  ( $z = 3$ ),  $T_c^{\text{cuad}} \approx 2.28 \pm 0.05$  ( $z = 4$ ) y  $T_c^{\text{BCC}} \approx 6.18 \pm 0.10$  ( $z = 8$ ). Estos valores concuerdan excelentemente con



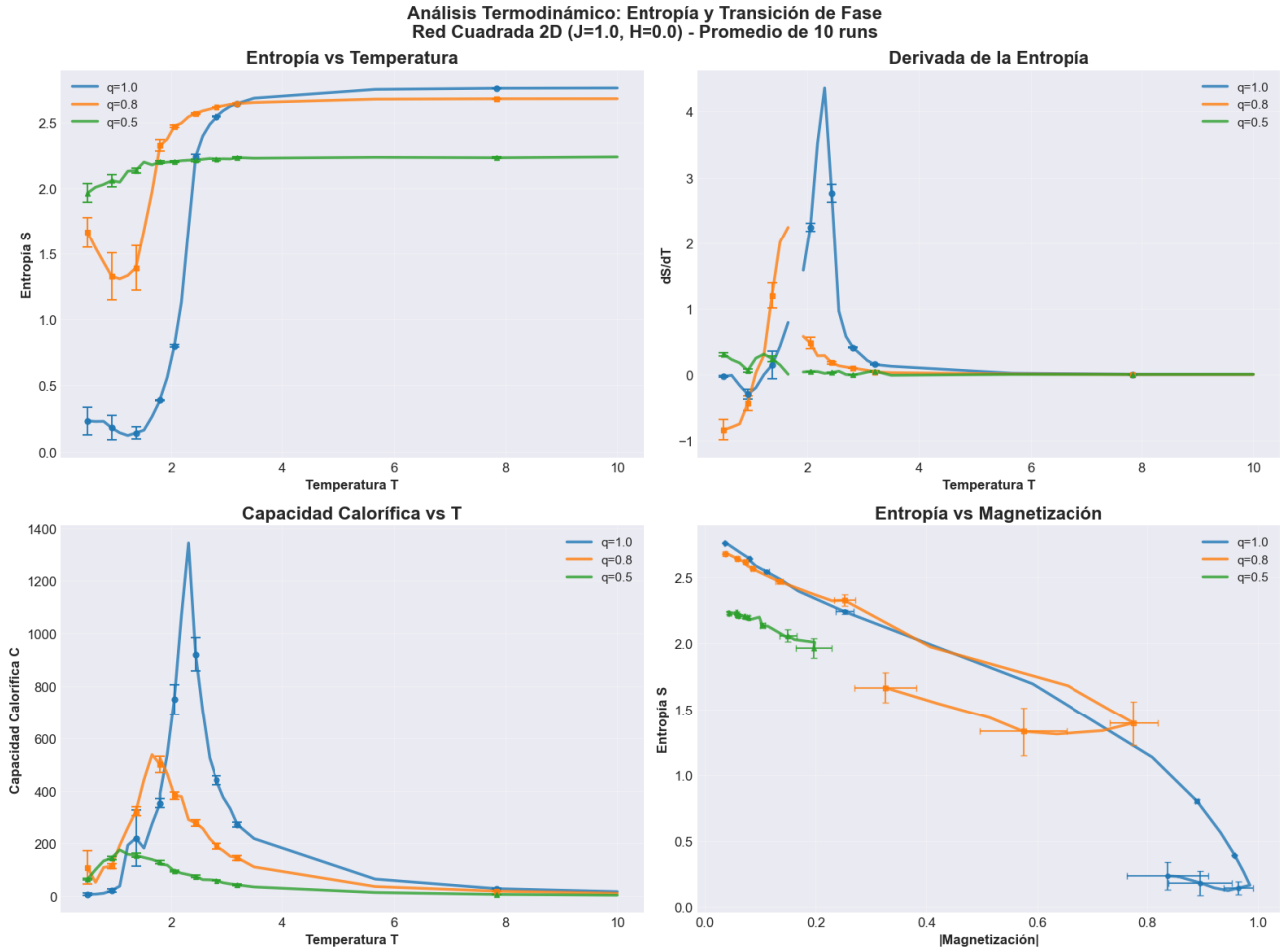


Figura 10. **Análisis termodinámico: entropía y transición de fase (red cuadrada 2D,  $J = 1.0, H = 0$ ).** Cuatro paneles muestran diferentes cantidades termodinámicas para la red cuadrada 2D variando la fracción de ocupación  $q = 0.5$  (verde),  $q = 0.8$  (naranja) y  $q = 1.0$  (azul, sin vacantes; todos los sitios ocupados). Promedio de 10 simulaciones independientes con barras de error. **Panel superior izquierdo:** Entropía  $S$  vs temperatura, calculada integrando  $C_V/T$  desde  $T_0 \rightarrow 0$  (Ec. 16). La entropía aumenta con  $T$ , mostrando un incremento pronunciado cerca de  $T_c$  (máxima absorción de entropía de desorden). A alta temperatura,  $S$  satura cerca de  $N_{\text{ocu}} k_B \ln 2$  (límite paramagnético). **Panel superior derecho:** Derivada de la entropía  $dS/dT \approx C_V/T$ , exhibiendo un pico marcado en  $T_c$  que señala la transición de fase. La altura del pico disminuye con dilución ( $q$  menor). **Panel inferior izquierdo:** Capacidad calorífica  $C_V$  vs temperatura (Ec. 14), mostrando picos pronunciados en las temperaturas críticas correspondientes:  $T_c \approx 2.27$  para  $q = 1.0$ , reducido para  $q$  menor. El pico diverge logarítmicamente en el modelo de Ising 2D ( $\alpha \approx 0$ ). **Panel inferior derecho:** Entropía vs magnetización absoluta  $|m|$ , mostrando la relación inversa característica: mayor orden magnético ( $|m|$  alto) corresponde a menor entropía configuracional. Las trayectorias se parametrizan implícitamente por  $T$ .

soluciones exactas conocidas (Onsager para la red cuadrada 2D:  $T_c = 2.269J/k_B$ ) y simulaciones previas para 3D, validando nuestros métodos numéricos. La relación aproximada  $T_c \propto z$  refleja la predicción cualitativa de la teoría de campo medio ( $k_B T_c^{MF} = zJ$ ), aunque con factores de proporcionalidad menores debido a fluctuaciones térmicas que la aproximación de campo medio ignora. La cadena unidimensional ( $z = 2$ ) no exhibe transición de fase a temperatura finita, confirmando el resultado teórico fundamental sobre la ausencia de orden de largo alcance en 1D debido a la proliferación de paredes de dominio de energía finita.

**Efecto de la dilución magnética.** La dilución ( $q < 1$ ) reduce sistemáticamente la temperatura crítica siguiendo una ley de escala de percolación  $T_c \sim (q - q_c)^\phi$  cerca del umbral de percolación de sitio  $q_c \approx 0.593$  para la red cuadrada 2D, con exponente  $\phi \approx 1.1-1.4$ . Para  $q = 0.5$  (50% de ocupación), cercano al umbral, observamos  $T_c \approx 1.2$ , indicando fragmentación incipiente del cluster magnético percolante. Este comportamiento tiene implicaciones directas para materiales magnéticos reales con defectos, impurezas o dopaje, donde la temperatura de Curie se reduce proporcionalmente a la concentración de centros magnéticos activos.

### Fenómenos de histéresis y memoria magnética.

Los ciclos de histéresis a baja temperatura ( $T \ll T_c$ ) exhiben campo coercitivo  $H_c \approx 0.5-0.8$  y magnetización remanente  $m_r \approx 0.7-0.9$ , característicos del orden ferromagnético robusto. A temperatura alta ( $T > T_c$ ), los ciclos colapsan en una curva reversible sin histéresis, señalando la transición a la fase paramagnética desordenada. La dilución reduce  $H_c$  y  $m_r$  debido a la fragmentación del dominio magnético. El área encerrada por el ciclo de histéresis cuantifica la disipación energética asociada a procesos irreversibles de nucleación y propagación de paredes de dominio.

**Análisis termodinámico.** El estudio de la capacidad calorífica  $C_V$  revela picos pronunciados en las temperaturas críticas, con divergencia logarítmica en el modelo de Ising 2D ( $\alpha \approx 0$ , consistente con la solución de Onsager) que se suaviza en 3D ( $\alpha \approx 0.11$ ). La entropía calculada vía integración termodinámica ( $S = \int C_V/T dT$ ) muestra el aumento característico desde valores cercanos a cero a bajas temperaturas (estado fundamental ordenado) hasta el límite paramagnético  $S_{\max} = N_{\text{ocu}} k_B \ln 2$  a altas temperaturas (configuración completamente aleatoria). La relación  $S$  vs  $|m|$  cuantifica el compromiso termodinámico fundamental entre orden magnético (energía) y desorden térmico (entropía), gobernado por la energía libre de Helmholtz  $F = E - TS$ .

**Visualización microscópica.** Las configuraciones de equilibrio (snapshots) revelan la evolución morfológica de dominios magnéticos: orden ferromagnético casi perfecto a  $T \ll T_c$ , estructuras fractales y fluctuaciones críticas cerca de  $T_c$  (longitud de correlación divergente), y desorden completo a  $T \gg T_c$  (fase paramagnética). La dilución fragmenta los dominios pero preserva cualitativamente la fenomenología de la transición, confirmando la robustez de la clase de universalidad del Ising ante desorden moderado.

**Perspectivas futuras.** Este trabajo establece una base sólida para extensiones avanzadas: (1) Implementación de algoritmos de clusters (Swendsen-Wang, Wolff) para mitigar la ralentización crítica y acceder a sistemas más grandes cerca de  $T_c$ ; (2) Análisis de escalamiento de tamaño finito para determinar exponentes críticos con mayor precisión ( $\beta, \gamma, \nu$ ) y verificar universalidad; (3) Cálculo del cumulante de Binder  $U_4 = 1 - \langle m^4 \rangle / (3\langle m^2 \rangle^2)$  para estimación robusta de  $T_c$  independiente del tamaño del sistema; (4) Estudio de la dinámica de relajación y tiempos de autocorrelación para caracterizar completamente el exponente dinámico  $z_{\text{dyn}}$ ; (5) Extensión a geometrías frustradas (redes triangulares, kagomé) y antiferromagnetos para explorar fases magnéticas competitivas.

En resumen, nuestras simulaciones Monte Carlo reproducen fielmente el comportamiento teórico esperado del modelo de Ising, validando tanto la implementación numérica como nuestra comprensión de los fenómenos cooperativos en sistemas de espines. La combinación de topología de red, dilución magnética y temperatura de-

termina completamente el diagrama de fases magnético, proporcionando una guía cuantitativa para el diseño de materiales magnéticos con propiedades específicas y el entendimiento microscópico de transiciones de fase en sistemas de muchos cuerpos.

- 
- [1] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Phys. **31**, 253 (1925).
  - [2] S. G. Brush, *History of the Lenz-Ising Model*, Rev. Mod. Phys. **39**, 883 (1967).
  - [3] L. Onsager, *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
  - [4] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982).
  - [5] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
  - [6] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, Oxford, 1999).
  - [7] U. Wolff, *Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems*, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
  - [8] R. H. Swendsen and J.-S. Wang, *Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations*, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
  - [9] K. Hukushima and K. Nemoto, *Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations*, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1604 (1996).
  - [10] F. Wang and D. P. Landau, *Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States*, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
  - [11] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, Oxford, 1971).
  - [12] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions* (Oxford University Press, Oxford, 1992).
  - [13] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, 2nd ed. (Taylor & Francis, London, 1994).
  - [14] K. Binder and A. P. Young, *Spin Glasses: Experimental Facts, Theoretical Concepts, and Open Questions*, Rev. Mod. Phys. **58**, 801 (1986).
  - [15] A. K. Geim and K. S. Novoselov, *The Rise of Graphene*, Nat. Mater. **6**, 183 (2007).
  - [16] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed. (John Wiley & Sons, New York, 2005).
  - [17] J. M. D. Coey, *Magnetism and Magnetic Materials* (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
  - [18] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd ed. (John Wiley & Sons, New York, 1987).
  - [19] C. N. Yang, *The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model*, Phys. Rev. **85**, 808 (1952).
  - [20] L. P. Kadanoff, *Scaling Laws for Ising Models Near  $T_c$* , Physics **2**, 263 (1966).
  - [21] K. G. Wilson, *The Renormalization Group: Critical Phenomena and the Kondo Problem*, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
  - [22] R. K. Pathria and P. D. Beale, *Statistical Mechanics*, 3rd ed. (Elsevier, Amsterdam, 2011).



- [23] A. Pelissetto and E. Vicari, *Critical Phenomena and Renormalization Group Theory*, Phys. Rep. **368**, 549 (2002).
- [24] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics* (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [25] K. Binder, *Finite size scaling analysis of Ising model block spin cluster algorithms*, Z. Phys. B **43**, 119 (1981).
- [26] P. D. Coddington and A. J. Baillie, *Critical slowing down in Monte Carlo simulations*, Phys. Rev. Lett. **68**, 962 (1992).
- [27] F. Y. Wu, *The Potts Model*, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [28] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, 4th ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2014).
- [29] N. D. Mermin and H. Wagner, *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).