

# Miniproyecto # 1. Densidad de Estados

César Antonio Hoyos Peláez

email [cantonio.hoyos@udea.edu.co](mailto:cantonio.hoyos@udea.edu.co)

Instituto de Física, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

Curso: Física Estadística

Profesor: Dr. Johans Restrepo Cardenas

Semestre 2023 - II

10 de septiembre de 2023

## Resumen

En este trabajo se emplea un modelo de Ising bidimensional en sistemas con diferentes tamaños de red, incluyendo tamaños de  $N = 2 \times 2, 3 \times 3, 4 \times 4, 5 \times 5..$ . Para cada uno de estos sistemas, se determinan todos los microestados posibles. Luego, para cada configuración, se calcula su energía. Adicionalmente, se introduce el concepto de densidad de estados y se calcula contando la cantidad de microestados para cada valor de energía. Esto revela una distribución gaussiana de los datos alrededor de cero.

También se realizan pruebas numéricas para verificar expresiones, en primer lugar utilizando la función de partición canónica, se demostró que es más eficiente calcularla sumando sobre las energías en lugar de sumar sobre cada microestado individualmente. Así mismo, se demuestra una expresión de forma numérica que aproxima el cálculo de la función de partición mediante el teorema del valor medio, claramente como las mallas usadas en este trabajo no se comparan con el límite termodinámico los resultados no fueron satisfactorios. Además, con base en la función de partición se hizo el cálculo del valor medio de la energía y el valor medio de la energía al cuadrado, permitiendo esto generar curvas de calor específico que facilitan el estudio del fenómeno de transición de un estado ferromagnético a un estado paramagnético determinado por la temperatura de Curie.

**Palabras claves:** Modelo de Ising, teoría de colectividades, densidad de estados, función partición, calor específico.

## 1. Introducción

Un fenómeno fascinante en el ámbito de la física es la magnetización de un objeto al entrar en contacto con un imán, como una llave u otro material metálico. Este proceso resulta en la atracción mutua entre los objetos y se conoce como "magnetización espontánea".

Durante sus investigaciones sobre el ferromagnetismo, los científicos Wilhelm Lenz y su estudiante doctoral Ernst Ising desarrollaron un modelo que les permitió estudiar de manera efectiva este fenómeno y describir los procesos asociados a la magnetización espontánea de los materiales [1].

El Modelo de Ising, conocido por su papel en la descripción del comportamiento de materiales ferromagnéticos, se fundamenta en variables discretas que representan los momentos dipolares magnéticos o espines. Estos espines se distribuyen en una estructura de red con una organización periódica en todas las direcciones, lo que posibilita las interacciones entre cada espín y sus vecinos. En esencia, el modelo de Ising se relaciona con la física de las transiciones de fase, que se manifiestan cuando pequeñas variaciones en parámetros como la temperatura o la presión desencadenan efectos significativos a una escala macroscópica, en otras palabras, se refieren a cambios en el estado del sistema desde una perspectiva cualitativa [1].

Por otro lado, la base de la física estadística en el contexto del equilibrio se fundamenta en la teoría de colectividades. Esta teoría implica trabajar con un número extremadamente grande de réplicas del sistema, cada una de ellas en cualquier configuración posible, es decir, en un microestado compatible con el estado macroscópico del sistema. En primer lugar, se encuentra la colectividad microcanónica, que se emplea para describir sistemas aislados cuyo estado termodinámico está definido por la energía, el volumen y la cantidad de partículas. Aunque esta colectividad resulta útil para una descripción detallada y matemáticamente precisa de la cantidad de microestados en un gas ideal, lo que a su vez facilita el cálculo de la entropía y, posteriormente, de las propiedades termodinámicas del sistema, presenta algunas limitaciones notables. Por ejemplo, mantiene la energía constante en el sistema y carece de una técnica genérica para calcular la cantidad de microestados [2].

Para abordar sistemas estadísticos más realistas, se introduce la colectividad canónica. En esta colectividad, se modelan sistemas en contacto con un reservorio que contiene una energía mucho mayor que la energía del sistema en sí. Esto permite que las fluctuaciones en la energía del sistema tengan un valor medio constante en el tiempo. Es importante destacar que, en el límite termodinámico y bajo ciertas aproximaciones, ambos formalismos convergen y arrojan los mismos resultados macroscópicos, como se observa en sistemas como el oscilador armónico y el sistema de dos niveles [1].

Adicionalmente, el modelo de colectividad canónica, en relación con el Modelo de Ising y su contacto con un baño térmico a temperatura constante, encuentra una amplia gama de aplicaciones, este se ha aplicado con éxito a problemas de relevancia social, como la segmentación urbana, cambios en el idioma y la dinámica de opiniones [3]. Un ejemplo específico se refiere a las diversas opiniones de los empresarios en Alemania con respecto al futuro económico, donde existen opiniones tanto optimistas como pesimistas [4]. Además, se ha utilizado para explicar la segregación racial en los Estados Unidos, como se detalla en un artículo escrito por el premio Nobel de Economía, Thomas Schelling [5]. Para un estudio más detallado de las diversas aplicaciones del modelo de Ising, un artículo publicado por Adam Lipowski realiza un análisis más detallado sobre cada una de las aplicaciones más excitantes de este modelo [6].

## 2. Marco teórico

El punto inicial para describir el modelo de Ising, es considerar un conjunto regular de puntos espaciados uniformemente en una una, dos o tres dimensiones. En este trabajo, solo se desarrolla el sistema para dos dimensiones (veáse Figura 1). Para cada punto de la red se asocian dos estados posibles dados por los valores  $\sigma_i = \pm 1$ , asociados al momento magnético de cada partícula. Una asignación que considere cada uno de los estados posibles en cada punto de la red, se denota como configuración o microestado. Dado que solo hay dos estados posibles y los grados de libertad del sistema son dados por la dimensión de la red, entonces se tienen en total  $2^N$  configuraciones posibles, donde  $N = nxn$ , con  $n$ : representando el número de filas o columnas de la malla. Por ejemplo, para sistemas donde  $n = 2$  se tienen  $2^4 = 16$  configuraciones posibles; mientras que, un sistema con  $n = 5$  se tienen  $2^5 = 33554432$  de microestados. Por esta razón, modelar sistemas muy grandes (gran cantidad de partículas del orden del número de Avogadro) tiene un gran complicación desde los algoritmos desarrollados para el modelo de Ising. Por esta razón, debido a las limitaciones computacionales en este trabajo solo se extiende el desarrollo hasta sistemas con alrededor de 33 millones de configuraciones posibles.

Para el sistema a describir, es importante asociar un Hamiltoniano, que de cuenta de la energía total y gobierne la dinámica del sistema. El Hamiltoniano para el modelo de Ising, asume que las interacciones son de poco alcance y solo se da con vecinos cercanos, adicionalmente se asume que no hay presencia de campo externo aplicado. Por tanto, este viene dado por:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$$

Donde  $J_{ij}$  representa la integral de intercambio, la cual no tiene significado clásico, pero una aproximación al concepto es pensar que da cuenta del área de superposición de las funciones de onda asociadas a dos electrones (considerados como partículas idénticas). En el caso ferromagnético se tiene que  $J_{ij} = 1$ . Por tanto, el Hamiltoniano que describirá el sistema del modelo de Ising bajo el ensamble canónico será (Sistema de partículas conectado a baño termico):

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \tag{1}$$

Sobre un sistema de red como el de la Figura 1 se pueden aplicar dos tipos de condiciones de frontera: condiciones de fronte libres (f.b.c; por sus siglas en inglés free boundary conditions) o condiciones de frontera periódicas (p.b.c; por sus siglas en inglés periodic boundary conditions), cada una de estas tiene una aplicación determinada y dependiendo del sistema a describir se aplica una u otra. Por un lado, las p.b.c son utilizadas para aproximar propiedades de sistemas muy grandes (bulk system), mientras que las f.b.c son utilizadas para describir sistemas pequeños como los de nanopartículas, en adición se muestra un ejemplo de como calcular cada una y el valor de la energía total para esa configuración.

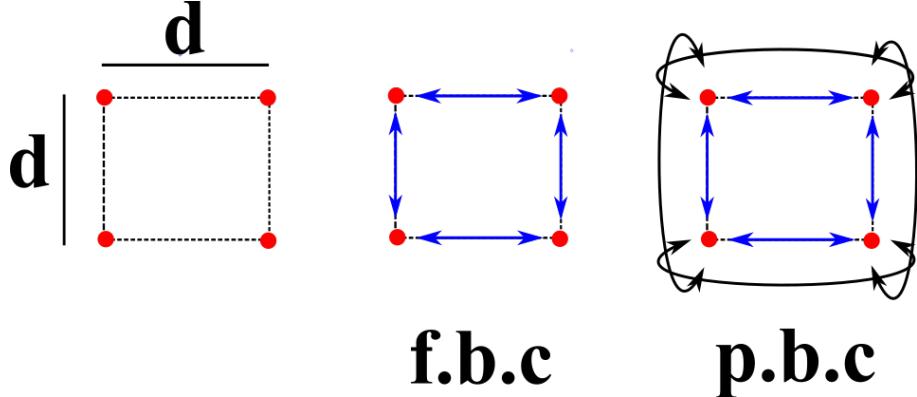


Figura 1: Malla de  $2 \times 2$  para el modelo de Ising. La primera figura muestra una red en donde hay 4 partículas donde los puntos rojos pueden representar valores de  $\pm 1$ . La segunda figura, muestra las interacciones que se dan con vecinos cercanos cuando se utiliza f.b.c. La tercera figura, muestra las interacciones que se dan con vecinos bajo el modelo p.b.c.

En este trabajo se implementan las p.b.c, por tanto con base en la Figura 1 si se supone que todas las partículas tienen espín 1, entonces se tiene un valor de energía de  $E = -8$ .

Una vez calculada la energía para cada microestado posible, se introduce el concepto de densidad de estado, que representa la cantidad de microestados por cada valor de energía, usualmente denotado como  $\Omega(E)$ . Luego, después de tener una distribución de puntos que representa la cantidad de microestados por cada valor de energía, esto se puede ajustar a una distribución normal, la cual viene dada por la expresión:

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2)$$

Donde  $-\infty < x < \infty$ ,  $\mu$  representa la media y  $\sigma^2$  la varianza, la cual da cuenta de que tanto se dispersan los datos respecto a la media [7].

Por otro lado, en este trabajo se hace un estudio sobre la función de partición. Esta es el punto de partida para el cálculo de información macroscópica del sistema, la utilidad de esta función es la capacidad que tiene para facilitar el cálculo de propiedades termodinámicas, generalmente en primer lugar se identifica el potencial termodinámico y este se define en términos de la función de partición. Esta es aplicable a sistemas con cualquier número de grados de libertad [2]. En este trabajo, se realiza una prueba numérica de la expresión para la función de partición y un análisis sobre el costo computacional de cada definición. La expresión a mostrar es la siguiente:

$$Z(\beta) = \sum_{\sigma} \exp(-\beta E(\sigma)) = \sum_E \Omega(E) \exp(-\beta E) \quad (3)$$

Donde  $\beta = \frac{1}{K_B T}$  con  $K_B$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura.

Con base en la definición de la función de partición, una aplicación de esta es poder encontrar el valor medio de la energía  $\langle E \rangle$ . Para esto, se define en primer lugar la distribución de probabilidad:

$$P(E) = \frac{\exp(-\beta E)}{Z(\beta)}$$

La expresión anterior representa la probabilidad de encontrar un sistema que está en contacto con un baño térmico a una temperatura T con energía E. Para encontrar la energía interna se parte de la definición de promedio ponderado :

$$\langle E \rangle = \sum_i P(E_i)E = \sum_{[E]} \frac{\exp(-\beta E)}{Z(\beta)} E$$

Con base en esta expresión, es fácil mostrar que:

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (4)$$

Si se introduce la definición de la parte derecha de la Ec. 3 en la Ec. 4 se obtiene:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{[E]} E \Omega(E) \exp(-\beta E)}{\sum_{[E]} \Omega(E) \exp(-\beta E)} \quad (5)$$

Así mismo, se puede mostrar la siguiente igualdad:

$$\langle E^2 \rangle = \sum_{[E]} E^2 \frac{-\beta E}{Z(\beta)} = \frac{1}{Z(\beta)} \frac{\partial^2 Z(\beta)}{\partial \beta^2} = \frac{\sum_{[E]} E^2 \Omega(E) \exp(-\beta E)}{\sum_{[E]} \Omega(E) \exp(-\beta E)} \quad (6)$$

Finalmente, se hace un calculo numérico para encontrar el calor específico a volumen constante. Para encontrar este, se parte de la definición termodinámica para el calor específico a volumen constante y se tiene en cuenta que  $\frac{\partial T}{\partial \beta} = -\frac{1}{K_B \beta^2}$

$$C_V = \frac{1}{N} \left( \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right) |_V \quad (7)$$

$$= \frac{1}{N} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} \quad (8)$$

$$= -\frac{K_B \beta^2}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} \left( -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) \quad (9)$$

$$= -\frac{K_B \beta^2}{N} \left( -\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} + \frac{1}{Z^2} \left( \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 \right) \quad (10)$$

$$= \frac{K_B \beta^2}{N} \left( -\left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \right) \quad (11)$$

Con base en la Ec. 4 y la Ec. 6 se tiene que:

$$C_V = \frac{K_B \beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (12)$$

**N = 2x2**

Micro-estado	Energía
[1 1 1 1]	-8
[1 1 1 -1]	0
[1 1 -1 1]	0
[1 1 -1 -1]	0
[1 -1 1 1]	0
[1 -1 1 -1]	0
[1 -1 -1 1]	0

**(a)**

**N = 3x3**

Micro-estado	Energía
[1 1 1 1 1 1 1 1 1]	-18
[1 1 1 1 1 1 1 1 -1]	-10
[1 1 1 1 1 1 1 -1 1]	-10
[1 1 1 1 1 1 1 -1 -1]	-6
[1 1 1 1 1 1 -1 1 1]	-10

**(b)**

**N = 4x4**

Micro-estado	Energía
[1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1]	-32
[1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 -1]	-24
[1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 -1 1]	-24
[1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 -1 -1]	-20

**(c)**

Figura 2: Microestado y energía según la Ec. 1, solo se muestra un fragmento de los resultados.

(a) 16 microestados, (b) 512 microestados, (c) 65536 microestados.

### 3. Resultados y discusión

En primer lugar, se aplican p.b.c para encontrar todos los micro-estados posibles en redes  $N = 2x2, 3x3, 4x4$  haciendo uso de la Ec. 1. Para el caso  $N = 5x5$  el costo computacional fue alrededor de 23 minutos sin imprimir en consola los microestados, por tanto, solo se hace un análisis hasta mallas de dimensión 25. En la Figura 2 se muestra un ejemplo de los resultados.

Posteriormente, se calcula la densidad de estados  $\Omega(E)$  agrupando los microestados por cantidad según el valor de energía, es decir, teniendo en cuenta la degenerancia. Los resultados de este proceso se pueden observar en la Figura 3.

**N = 2x2**

Energía	Número de Microestados
-8	2
0	12
8	2

**(a)**

**N = 3x3**

Energía	Número de Microestados
-18	2
-10	18
-6	48
-2	198
2	144
6	102

**(b)**

**N = 4x4**

Energía	Número de Microestados
-32	2
-24	32
-20	64
-16	424
-12	1728
-8	6688
0	28524
-4	13568
4	13568
8	6688
...	
12	1728
24	32
28	64
32	2

**(c)**

Figura 3: Energía y cantidad de microestados para cada red. (a) Sistema  $N = 2x2$ , (b) Sistema  $N = 3x3$ , (c) Sistema  $N = 4x4$ .

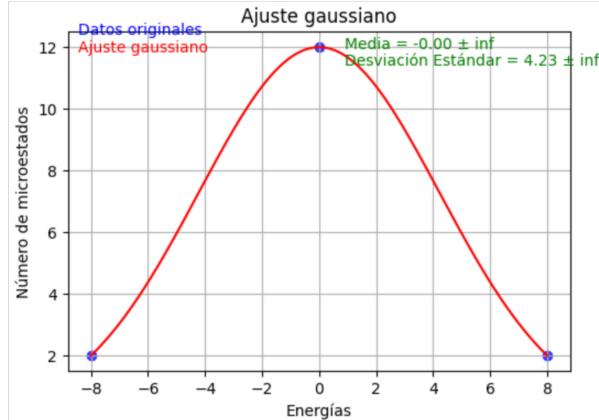
Luego, se grafica la densidad los valores correspondientes a cada energía en el eje independiente, y en el eje dependiente la cantidad de microestados. Posterior a esto, mediante la librería curvefit de python se ajustan estos datos a la gaussiana dada por la Ec. 2, adicionalmente se obtiene la media y el valor de la desviación estandar cada una con su respectivo error y se evalúa el coeficiente de determinación  $R^2$  el cual determina la calidad del ajuste, teniendo como 1 su máximo de correlación entre el ajuste y los datos reales.

El ajuste de la Figura 4 muestra que la desviación estándar del sistema aumenta con el número de partículas, mientras que el error disminuye. Esto significa que, al tener más partículas, el sistema tiene más microestados posibles, pero también más variabilidad alrededor de la media. Así mismo, se evidencia que el valor medio de energía para cualquier sistema siempre está centrado en el origen. En el límite cuando  $N$  tiende a infinito, al extenderse el número de microestados sobre valores posiles de energía, el sistema se verá como un continuo, dando origen así a bandas de energía, en este caso ya no habría una mayor cantidad de microestados en un valor de energía que en otro.

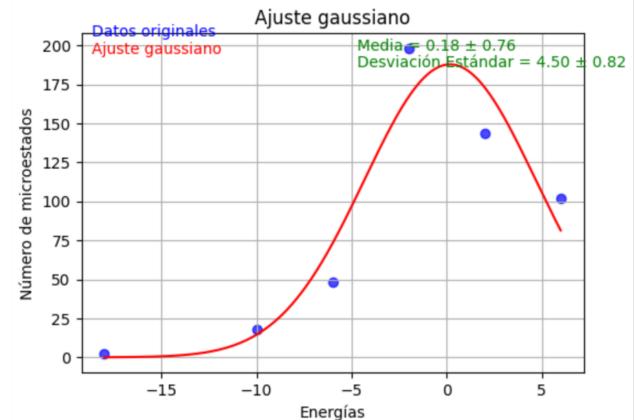
Adicionalmente, en este trabajo se hizo un cálculo numérico para verificar la Ec. 3 para diferentes valores de temperatura. Demostrar la equivalencia numérica de ambas expresiones no es complicado, ya que la parte derecha derivada de la parte izquierda al tener en cuenta la degenerancia. En este trabajo, más allá de la comprobación numérica se hizo un análisis de convergencia del algoritmo (véase Figura 5). Se demostró entonces que  $Z_1$  gasta alrededor de 4500 operaciones de más que  $Z_2$  para alcanzar el mismo valor, lo cual conlleva un gran costo computacional.

Luego, se hace un barrido en temperaturas en el intervalo  $[0, 10]$  para encontrar el valor medio de la energía dado por la Ec. 4, el comportamiento se puede observar en la Figura 6. De esta gráfica, se evidencia que a medida que se incrementa la temperatura, la energía promedio del sistema también lo hace.

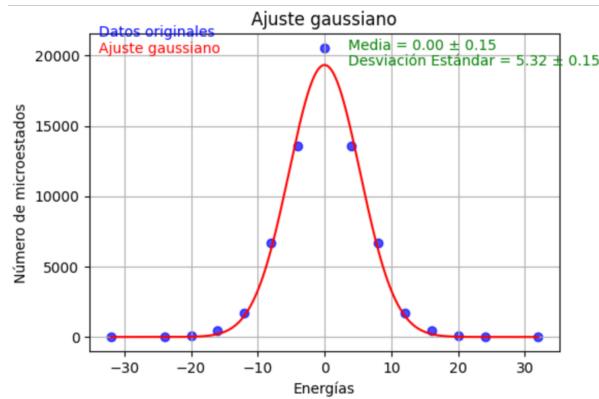
En última instancia, utilizando la Ec. 12, se efectúa un cálculo numérico que determina la capacidad calorífica en relación con la temperatura. El punto en el que se observa el máximo en las curvas indica la temperatura de Curie. Esta temperatura representa la característica de un material que exhibe magnetización espontánea en ausencia de un campo magnético externo. En la Figura 7 se evidencia que a medida que se aumenta el número de espines en la red la temperatura de Curie va disminuyendo, hasta alcanzar en un sistema de  $N = 5 \times 5$  una temperatura de  $T_C = 2,41K$ . En el límite termodinámico, es decir, cuando se considera grandes redes de partículas se puede encontrar que el valor teórico de la temperatura de Curie es  $T_C = 2,26K$  asumiendo que la constante de Boltzmann es igual a la identidad [8]. Dado que en este trabajo no se cuenta con gran poder de computo, se tiene un error relativo porcentual de  $e_r \approx 7\%$ .



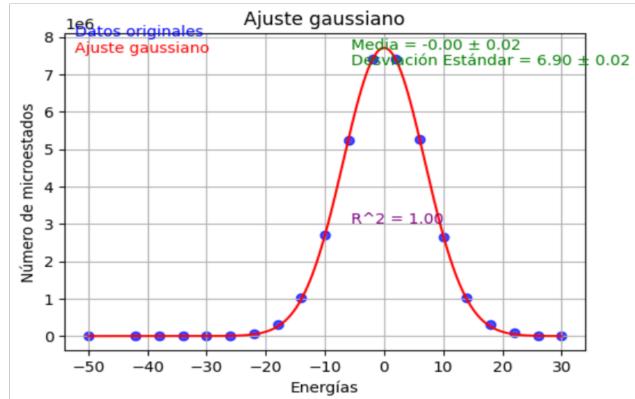
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 4: Ajuste gaussiano con curvefit para curvas de número de microestados versus energías. (a) Sistema  $N = 2 \times 2$ , (b) Sistema  $N = 3 \times 3$ , (c) Sistema  $N = 4 \times 4$ , (d) Sistema  $N = 5 \times 5$ .

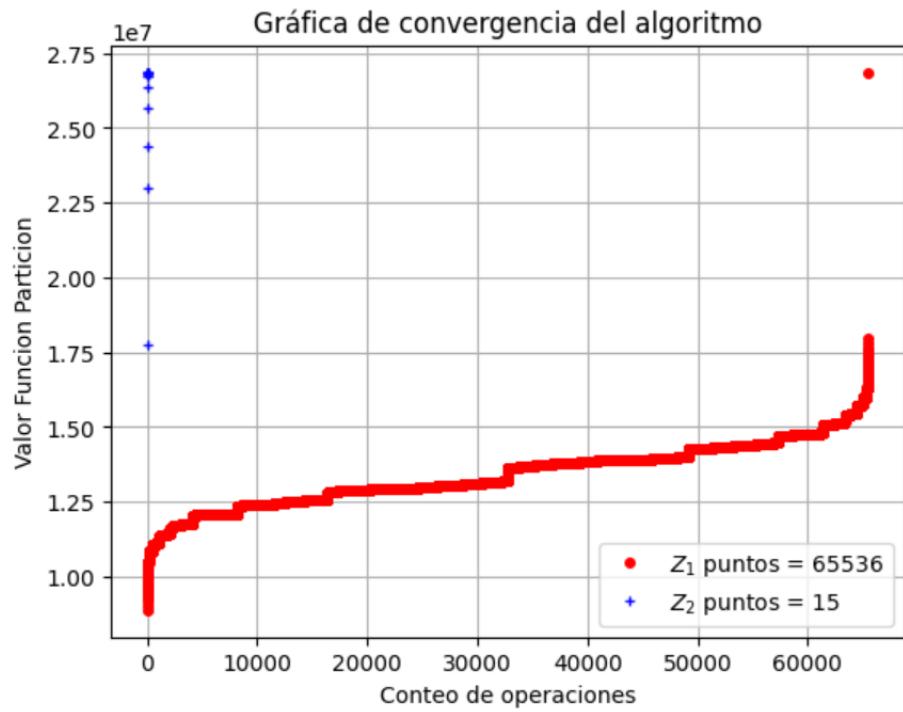


Figura 5: Curva para demostrar el costo computacional entre dos definiciones de la función partición para una red  $N = 4 \times 4$ .  $Z_1 = \sum_{\sigma} \exp(-\beta E(\sigma))$  y  $Z_2 = \sum_E \Omega(E) \exp(-\beta E)$

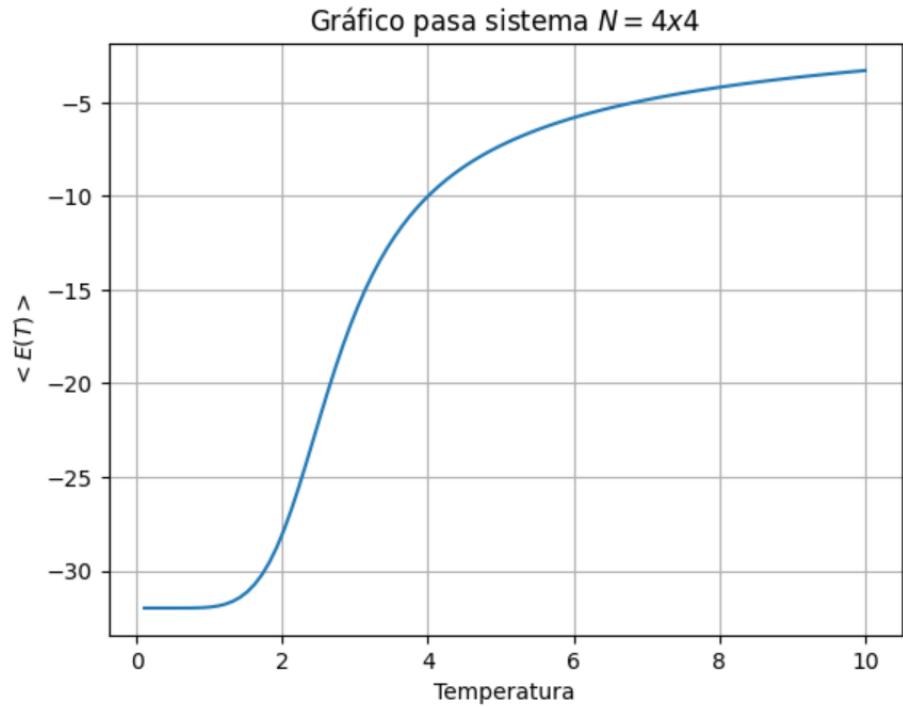


Figura 6: Valor medio de la energía en función de la temperatura

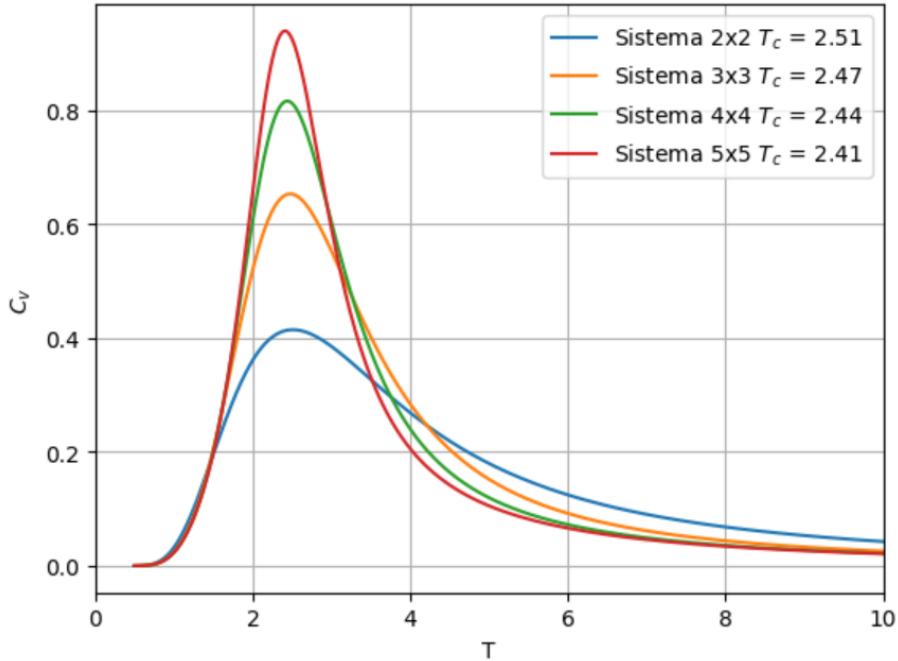


Figura 7: Gráfica de calor específico versus temperatura. El pico máximo de cada curva representa la temperatura de Curie.

## 4. Conclusiones

En este trabajo se implementó la teoría de colectividades, en particular el ensamble canónico para el modelo de Ising, con el cual se hicieron simulaciones sobre posibles microestados en un sistema y densidad de estados. Con base en esto, se hicieron ajustes con gaussianas a curvas de número de microestados versus energías mostrando así que a mayor cantidad de configuraciones en el sistema se hace mayor la desviación estándar, lo que implica mayor dispersión en los datos.

Así mismo, se introdujo el concepto de función de partición y se demostró que para un cálculo en menor tiempo es importante tener en cuenta la densidad de estados. También se demostró, en una curva de energía interna versus temperatura que; a medida que se incrementa la temperatura, la energía promedio del sistema también aumenta.

Finalmente, se evalúo mediante la varianza que representa las fluctuaciones de energía del sistema un cálculo que permitió determinar un valor para la temperatura de Curie de  $T_C = 2,41K$ . Este valor, hace alusión a la temperatura crítica para que haya una transición de fase entre un sistema ferromagnético a un sistema paramagnético, perdiendo así su magnetización espontánea.

## Referencias

- [1] Cipra, B. A. (1987). An introduction to the Ising model. *The American Mathematical Monthly*, 94(10), 937-959.
- [2] Ortín Rull, J. y Sancho Herrero, J. M. (2006). *Curso de Física Estadística*. Publicacions I Edicions De La Universitat De Barcelona.
- [3] Stauffer, D. (2008). Social applications of two-dimensional Ising models. *American Journal of Physics*, 76(4), 470-473.
- [4] Hohnisch, M., Pittnauer, S., Solomon, S., and Stauffer, D. (2005). Socioeconomic interaction and swings in business confidence indicators. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 345(3-4), 646-656.
- [5] Schelling, T. C. (1971). Dynamic models of segregation. *Journal of mathematical sociology*, 1(2), 143-186.
- [6] Lipowski, A. (2022). Ising Model: Recent Developments and Exotic Applications. *Entropy*, 24(12), 1834.
- [7] Širca, S. (2016). *Probability for physicists*. Berlin: Springer.
- [8] Landau, R. H., Páez, M. J., and Bordeianu, C. C. (2015). *Computational physics: Problem solving with Python*. John Wiley and Sons.