

Estudio del modelo de Ising en dos dimensiones empleando simulaciones computacionales

Nieto Pérez, Marco, Regal Sevilla, Mateo, Ainoo Pérez, Debinamaca, Molina O'Brien, Marcos, Mompó Ruiz, Lluís, Osa Bonillo, Matilde, (Grupo 6)

^aEscuela Técnica Superior de Ingeniería de Telecomunicación, Valencia,

Abstract

En este artículo se deducen las expresiones analíticas para la energía media, magnetización, susceptibilidad magnética y calor específico por partícula en función de la temperatura partiendo de las hipótesis de Lars Onsager sobre el modelo propuesto por Ernest Ising. Posteriormente, se ha verificado la validez de dichos cálculos simulando una red de espines computacionalmente, para los casos en que el campo magnético externo es nulo o bien presenta valores positivos. Por último, se discuten los resultados obtenidos y se aportan las conclusiones pertinentes, además de una idea general de cómo se comporta el sistema.

1. Contexto e introducción

El modelo de Ising es un problema formulado originalmente por el físico Wilhem Lenz en 1920, resuelto por su estudiante Ernest Ising en su tesis en 1924 [1]. Su importancia se debe a que fue uno de los primeros modelos resueltos de manera exacta para un sistema interactuante, permitiendo dar una descripción del ferromagnetismo y de las transiciones de fase. La solución exacta para el caso de dos dimensiones fué obtenida por Lars Onsager en 1944 [2]. Actualmente, su importancia trasciende el campo de la física estadística y ha sido aplicado a otras áreas tales como la biología.

2. Resolución analítica

La deducción de la función de partición para el modelo de Ising bidimensional requiere de una amplia gama de herramientas matemáticas, y por su extensión se va a desarrollar en el apéndice A. En dicha sección se deduce la expresión analítica de $\ln Z/N$ para el caso en que $J = 1$, idéntica salvo por la notación a la ecuación (109b) presentada por Lars Onsager en su artículo *Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition* publicado en 1944 [2].

Para nuestro trabajo, se va a tomar como punto de partida una expresión más general para el caso de campo magnético externo nulo [3], aunque esencialmente posee la misma forma que la ecuación deducida.

$$Z = [\sqrt{2} \cosh(2K)]^N \exp \left[\frac{N}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \ln \left(1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2(\phi)} \right) d\phi \right] \quad (1)$$

Con $\kappa = 2 \sinh(2K) / \cosh^2(2K)$ y $K = \beta J$. Calculamos la energía interna, definida como $E = -\partial \ln Z / \partial \beta$ [4]. Podemos intercambiar la derivada con la integral, aplicar la regla de la cadena y derivar con respecto de κ el integrando antes de integrarlo respecto de ϕ . Aplicando dicho método, se llega a la siguiente expresión para la energía por partícula (E/N):

$$e = -2J \tanh(2K) + \frac{\kappa}{\pi} \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \beta} \right) \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2(\phi) d\phi}{(1 - \kappa^2 \sin^2(\phi)) \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2(\phi)}} \quad (2)$$

Racionalizando el integrando, podemos sustituir la integral por $(-\pi/2 + K_1(\kappa))/\kappa^2$, donde $K_1(\kappa)$ es la integral elíptica completa de primera clase de módulo κ definida como:

$$K_1(\kappa) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2(\phi)}} \quad (3)$$

Hallando que $(\partial \kappa / \partial \beta) / \kappa = 2J(\coth(2K) - 2 \tanh(2K))$

Llegamos a la siguiente expresión para la energía por partícula en función de la integral elíptica $K_1(\kappa)$:

$$e = -2J \tanh(2K) + \frac{2J}{\pi} (\coth(2K) - 2 \tanh(2K)) \left(\frac{-\pi}{2} + K_1(\kappa) \right) \quad (4)$$

Desarrollando $\coth(2K)$ y $\tanh(2K)$ en términos $\cosh(2K)$ y $\sinh(2K)$, y aplicando la relación $\cosh^2(x) - \sinh^2(x) = 1$, escribimos la energía por partícula en su forma final:

$$e = -2J \tanh(2K) - \frac{J(\sinh^2(2K) - 1)}{\cosh(2K) \sinh(2K)} \left(\frac{2}{\pi} K_1(\kappa) - 1 \right) \quad (5)$$

Se ha graficado la expresión anterior en función de la temperatura (ver fig. 1) Podemos calcular la capacidad calorífica por partícula partiendo de la expresión anterior y teniendo en cuenta la expresión $c = (\partial e / \partial T)$. Por su extensión, no se va a incluir en este documento, pero se puede observar su expresión en el código proporcionado como anexo y su gráfica en la fig. 1.

La magnetización se define como $M = -(\partial F / \partial B)$, siendo B la intensidad del campo magnético, producto de la permitividad magnética y el campo externo aplicado. Para el modelo de Ising bidimensional, su expresión fué presentada por Onsager en una conferencia pero su deducción no fue publicada. Fue el físico

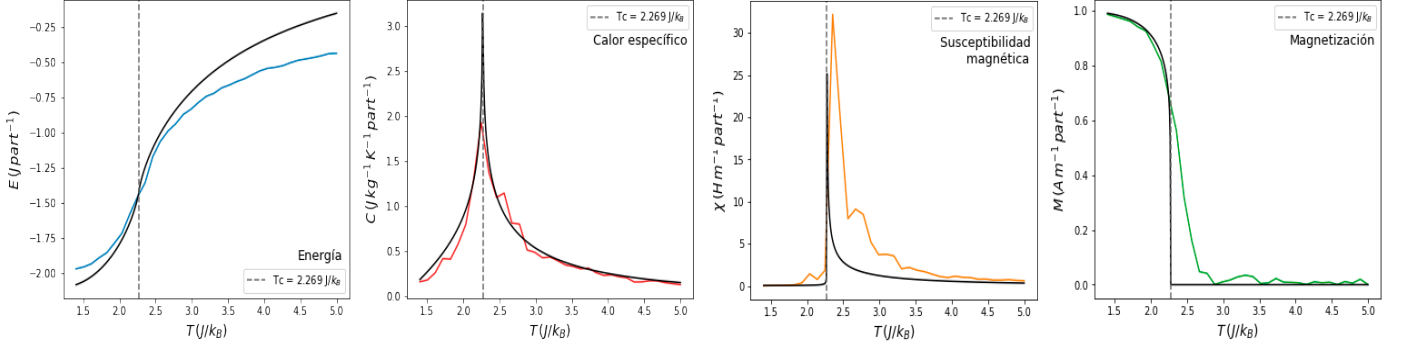


Figure 1: Dependencias de la energía, calor específico, susceptibilidad magnética y magnetización respecto de la temperatura por partícula. Se ha remarcado la abscisa donde teóricamente se da la temperatura crítica, $T_c = 2.269 J/k_B$. Los cálculos han sido realizados para una red cuadrada de espines de lado $L = 20$ y empleando un total de $700 \times N = 2,8 \times 10^5$ iteraciones.

C.N. Yang, ganador del nobel de física en 1957 quien publicó en 1952 una deducción analítica de dicha expresión [5]:

$$m(T) = \begin{cases} [1 - \sinh^{-4}(2K)]^{\frac{1}{8}} & \text{si } T \leq T_c \\ 0 & \text{si } T > T_c \end{cases} \quad (6)$$

Donde $T_c = 2 / \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2.269 J/k_B$.

Para el caso de la susceptibilidad magnética, χ , definida como $\chi = (\partial M / \partial B)$, también se han realizado estudios al respecto y existen artículos bibliográficos determinando su expresión. Podemos escribirla como [4][6]:

$$\chi(T) = \frac{N\mu^2}{k_B T_c} \times \begin{cases} C_- \left[\frac{T - T_c}{T_c} \right]^{-\frac{7}{4}} & \text{si } T \leq T_c \\ C_+ \left[\frac{T - T_c}{T_c} \right]^{-\frac{7}{4}} & \text{si } T > T_c \end{cases} \quad (7)$$

Donde C_+ y C_- toman los valores 0.96258 y 0.02554, respectivamente. Ambas magnitudes han sido graficadas en función de la temperatura (ver fig. 1).

Cabe mencionar que, a diferencia del caso unidimensional, no existen expresiones analíticas para las magnitudes anteriores para el caso en que se aplica un campo magnético externo H , por lo que su determinación solo puede ser realizada mediante simulaciones numéricas.

3. Simulaciones computacionales

Para simular el comportamiento de una red de espines, se ha empleado el algoritmo de Metropolis-Hastings [7]. Consiste en tomar una configuración aleatoria inicial ($\sigma_i = \pm 1$) y modificar en cada iteración del método el valor de un espín tomado de forma aleatoria. Tras recalcular la variación de energía después de realizar dicho cambio, si $\Delta E \leq 0$ aceptamos el cambio y en caso de que $\Delta E > 0$ aceptaremos el cambio con una probabilidad $p = e^{-\beta \Delta E}$. Dichas iteraciones se repiten un número lo suficientemente grande para que el sistema visite una gran cantidad de configuraciones en su espacio de fases asociado.

El cálculo numérico de las expresiones se realiza de forma idéntica al caso unidimensional. Ya se dedujeron las expresiones en un trabajo anterior [8], por lo que en este nos limitaremos a presentarlas e indicar las diferencias a tener en cuenta en este caso.

3.1. Magnetización media

Estimamos computacionalmente la magnetización del sistema como:

$$\overline{M} = \frac{1}{n} \sum_{K=1}^n \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(K)} \quad (8)$$

Donde N es el número total de espines, n el número de iteraciones del método, $K = 1, 2, \dots, n$ el número de configuraciones ensayadas y $\sigma_i^{(K)}$ el valor del espín i en la configuración K . En el caso bidimensional, en lugar de tomar cada espín como elementos de una lista, se deberán tomar como elementos de una matriz de tamaño $L \times L$. Se ha obtenido una estimación de la magnetización en función de la temperatura (ver fig. 1). El caso en que el campo externo no es nulo se calcula de manera idéntica (ver fig. 2).

Además, se ha graficado la configuración de los espines para cuatro diferentes momentos de tiempo: antes de empezar a iterar (configuración inicial), tras 1/10 de las iteraciones de Montecarlo, tras 1/2 de las iteraciones y por último la configuración final. Se ha graficado la evolución para el sistema en dos temperaturas distintas: una de ellas inferior a T_c ($T < 2.269$), y la otra superior a T_c ($T > 2.269$) (ver fig. 3).

3.2. Energía media

La expresión de la energía media puede escribirse como

$$\overline{E} = \frac{1}{n} \sum_{K=1}^n H_{(H=0)}^{(K)} \quad (9)$$

Para el caso bidimensional, el hamiltoniano en cada iteración toma la forma [9]:

$$H_{(H=0)}^{(K)} = -J \left[\sum_i^L \sum_j^L \sigma_{i,j}^{(K)} \sigma_{i+1,j}^{(K)} + \sum_i^L \sum_j^L \sigma_{i,j}^{(K)} \sigma_{i,j+1}^{(K)} \right] \quad (10)$$

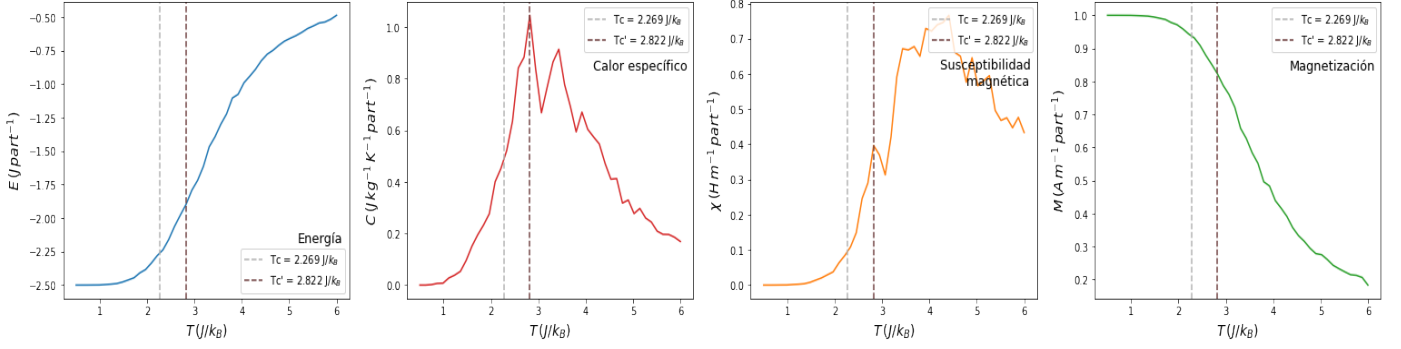


Figure 2: Dependencias de la energía, calor específico, susceptibilidad magnética y magnetización respecto de la temperatura por partícula para campo externo $H = 0.5$. Se ha remarcado la abscisa donde teóricamente se da la temperatura crítica, además de una estimación para la nueva. Los cálculos han sido realizados para una red cuadrada de espines de lado $L = 20$ y empleando un total de $700 \times N = 2,8 \times 10^5$ iteraciones.

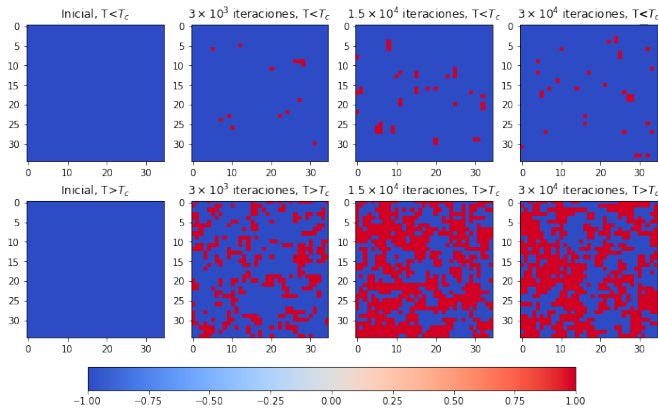


Figure 3: Configuración de espines a lo largo de las iteraciones, partiendo de una malla de espines alineados para un valor de $T < T_c$ (fila superior) y para un valor de $T > T_c$ (fila inferior). La gráfica ha sido generada con una malla de $L = 35$ y 3×10^4 iteraciones.

Donde $\sigma_{i,j}^{(K)}$ es el valor del espín en la fila i y columna j de la matriz en la configuración K . Se ha hallado una aproximación a la curva de la energía media en función de la temperatura (ver fig. 1). Para el caso en que se introduce un campo externo H , debe añadirse al hamiltoniano anterior el término $-H \sum_i \sum_j \sigma_{i,j}^{(K)}$. Nuevamente, se ha graficado también la dependencia con la temperatura para este caso (ver fig. 2).

3.3. Capacidad calorífica

Se puede calcular la capacidad calorífica como:

$$\bar{C} = \frac{1}{k_B T^2} \left[\left(\frac{1}{n} \sum_{K=1}^n H_{(H=0)}^{(K)} \right)^2 - \left(\frac{1}{n} \sum_{K=1}^n H_{(H=0)}^{(K)} \right) \right] \quad (11)$$

Se ha multiplicado el resultado de la expresión anterior por N para normalizarlo, ya que al calcularse como la fluctuación de otro parámetro existe un factor $1/N$ que hace que difiera de la curva analítica. Al igual que con los dos parámetros anteriores, se ha hallado su dependencia con la temperatura (ver fig. 1, fig. 2).

3.4. Susceptibilidad magnética

La expresión para el cálculo de la susceptibilidad magnética puede escribirse como:

$$\bar{\chi} = \frac{1}{k_B T} \left[\frac{1}{n} \sum_{K=1}^n \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i^{(K)} \right)^2 - \left(\frac{1}{n} \sum_{K=1}^n \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(K)} \right)^2 \right] \quad (12)$$

De igual manera que para la capacidad calorífica, se ha normalizado su expresión con un factor N y se ha hallado la aproximación numérica de su dependencia con la temperatura, tanto para el caso de campo magnético externo nulo como no nulo (ver fig. 1, fig. 2).

Para el caso con campo magnético externo no nulo, se ha estimado una nueva temperatura crítica en el valor de la abscisa donde el valor de la capacidad calorífica es máximo. Dicha temperatura es puramente orientativa y no debe ser tomada como resultado de un cálculo riguroso, ya que como se puede observar y se va a comentar más adelante el sistema necesitaría de muchas más iteraciones y capacidad computacional para que las tendencias numéricas se correspondieran perfectamente con las analíticas.

4. Discusión de los resultados

En el siguiente apartado se procederá a la discusión de los resultados obtenidos en las simulaciones computacionales del Modelo de Ising en dos dimensiones y a su comparación con los resultados obtenidos en la simulación del Modelo de Ising en una dimensión. La explicación profunda del comportamiento del sistema se omitirá ya que está explicado en nuestro anterior trabajo sobre el Modelo de Ising en una dimensión [8].

4.1. Sin campo (fig. 1)

4.1.1. Energía Media

Como se puede apreciar en la gráfica, la energía aumenta a medida que aumentamos la temperatura del sistema, exhibiendo un comportamiento similar al de la gráfica analítica. El aumento de la energía con la temperatura es intuitivo ya que, a

medida que se da dicho aumento, el movimiento de los átomos es mayor, aportando así una mayor energía al sistema.

La principal diferencia entre el modelo de Ising 2D y 1D es que al haber un mayor número de interacciones, la energía media empieza desde un valor mayor en valor absoluto. Además, el valor máximo de variación de la energía también coincide con la temperatura crítica, pero en este caso el máximo se da para una temperatura mayor, ya que la temperatura crítica es mayor. No obstante, el comportamiento es similar debido a que también converge a 0.

En esta gráfica se puede apreciar que la energía no coincide del todo con los valores teóricos, esto es debido a las limitaciones computacionales a las que se ha estado en este trabajo debido a que el modelo de Ising de 2 dimensiones requiere de un número de partículas e iteraciones mucho mayor que el modelo de Ising de una dimensión. No obstante, estos resultados nos sirven igualmente para la explicación y análisis del comportamiento de esta magnitud ya que, a pesar de no coincidir con los valores exactos la tendencia es la misma.

4.1.2. Calor específico

El calor específico es la variación de la energía media respecto a la temperatura. Si nos fijamos en la gráfica, se observa que el valor es máximo justo en la temperatura crítica, es decir, cuando el sistema cambia de fase. Esto se debe a que para este valor de temperatura, la variación de energía media por partícula es máxima.

La principal diferencia entre ambos modelos es que en el de Ising 2D el valor máximo del calor específico es más pronunciado debido a que hay transición de fase. Por el contrario, en el 1D no hay transición de fase (aunque el valor máximo representa donde ocurriría), es más suave que en el 2D y los valores son más pequeños. Esto se debe a que en 1D los espines interactúan sólo con los vecinos más cercanos y la energía está más limitada mientras que en 2D al interactuar con los vecinos en todas direcciones, se forman estructuras más complejas y configuraciones espaciales más diversas lo que da lugar a una distribución de energía más amplia y variada provocando fluctuaciones energéticas mayores por lo que los valores de calor específico son mayores en comparación con el caso 1D.

4.1.3. Susceptibilidad magnética

El comportamiento de la susceptibilidad magnética es parecido al del calor específico. Esta magnitud nos indica cuán susceptible es un material a ser magnetizado. Al calcularse a partir de las fluctuaciones de la magnetización, esta presenta un pico justamente en la zona donde la magnetización comienza a decaer, es decir, cuando entramos en la transición de fase.

La principal diferencia con el modelo de Ising 1D es que como la transición de fase se da a una mayor temperatura crítica, el valor máximo de susceptibilidad se desplaza a una temperatura crítica mayor. Además, se observa una gran diferencia de orden de magnitud. En el modelo 2D la susceptibilidad es mucho mayor debido al aumento de número de vecinos con los que un espín interactúa, de forma que el momento magnético se ve afectado por un mayor número de campos vecinos, es decir, será

más susceptible a magnetizarse. Obsérvese también que el cambio de susceptibilidad es muy brusco mientras que en el modelo 1D la caída era más lenta. El motivo de este comportamiento es que en el modelo 1D se forzaba una transición de fase aunque esta no se daba. En el 2D sí que existe transición de fase que físicamente se modela de esta manera. Por otro lado, dado que la susceptibilidad se calcula a partir de las fluctuaciones de la magnetización y esta tiene su máxima variación en el punto de la temperatura crítica, donde en las gráficas vemos una pendiente de 90° , es justo en ese punto donde vemos el máximo valor de susceptibilidad y posteriormente un decaimiento progresivo consecuente con la caída de la magnetización.

4.1.4. Magnetización

El comportamiento de la magnetización es de decaimiento a una cierta temperatura, concretamente esta es la temperatura crítica o temperatura de Curie. Ésta determina el momento en el que se da una transición de fase, de ferromagnético a paramagnético.

La diferencia es que en el modelo 2D la caída se da para un valor mayor de temperatura ya que la temperatura crítica es mayor. El comportamiento en ambos modelos es el mismo, vemos que al pasar la temperatura crítica, la magnetización cae a 0, es decir, el material pasa a ser paramagnético.

4.2. Con campo (fig. 2)

4.2.1. Energía media

El comportamiento del sistema es exactamente el mismo que en el caso sin campo. Sin embargo, como se puede apreciar la energía inicial es mayor en valor absoluto que en el caso con $H = 0$. Esto se debe a que al añadir un campo externo los espines interactúan con él, aumentando su campo interno por lo que cada espín aumenta su energía en valor absoluto. En este caso se puede apreciar que, al haberse desplazado la temperatura crítica, la energía permanece constante a temperaturas más elevadas que en el caso sin campo debido a que es más complicado desalinear los espines al aparecer este campo magnético.

En comparación con el caso de 1D, la diferencia fundamental es la temperatura a la cual se comienza a dar la convergencia de la energía a 0, el punto en el cual el sistema está en equilibrio. Esto es debido a que en 2D con campo la temperatura crítica se desplaza a temperaturas mucho mayores que en 1D con campo.

4.2.2. Calor específico

Al añadir campo magnético externo la temperatura crítica aumenta, por lo que la transición de fase se da para una temperatura mayor. En consecuencia, el máximo aparece desplazado en comparación con el caso sin campo. Como se puede apreciar, los valores son menores que en el caso sin campo, debido a que al aparecer un campo magnético externo los espines tienden a alinearse en la dirección del campo, reduciendo así las fluctuaciones de la energía debidas a tratar de mantenerse alineados. Como el calor específico es proporcional a dichas fluctuaciones, su reducción conlleva una disminución de los valores de la magnitud. El comportamiento es equivalente al caso en 1D.

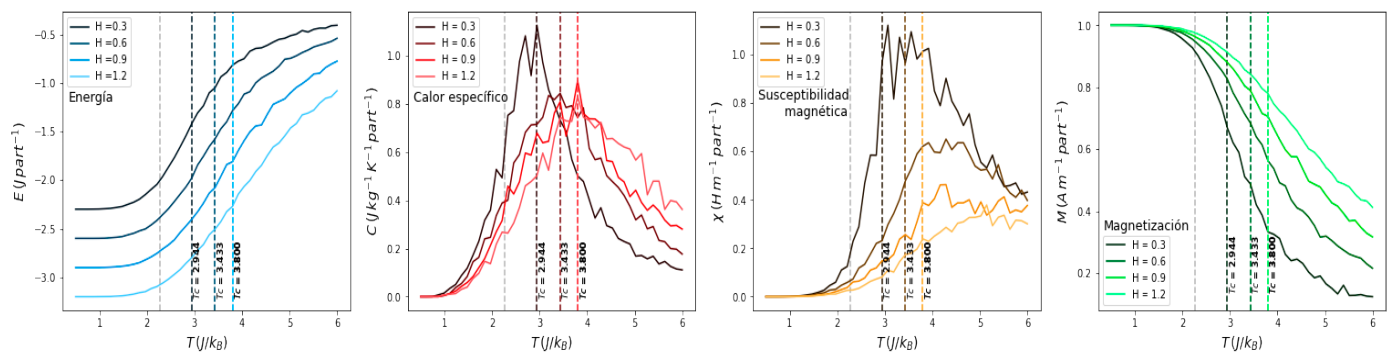


Figure 4: Dependencias de la energía, calor específico, susceptibilidad magnética y magnetización respecto de la temperatura por partícula para diferentes valores de campo externo. Se ha remarcado la abscisa de la temperatura crítica para el caso de campo externo nulo, junto con estimaciones para las nuevas temperaturas críticas con valores de $h \neq 0$. Los cálculos han sido realizados para una red cuadrada de espines de lado $L = 17$ y empleando un total de $500 \times N \approx 1,5 \times 10^5$ iteraciones. Las temperaturas críticas resultantes han sido 2.944, 3.433, 3.800 y 3.800 J/k_B , para $H = 0.3, 0.6, 0.9$ y 1.2 , respectivamente

4.2.3. Susceptibilidad magnética

Al añadir campo magnético, la temperatura crítica aumenta, por lo que el valor máximo de la susceptibilidad magnética se ve desplazado. Respecto al valor máximo, éste es menor con campo que sin campo ya que al haber campo externo el material es menos susceptible a ser magnetizado debido a que ya tiene una magnetización previa. Es por ello que para tender a una aleatoriedad máxima de la orientación de los espines se necesita temperaturas más altas. A medida que el campo se hace más grande, el material es menos susceptible de magnetizarse más. Por otro lado, en comparación con el caso sin campo, tras el máximo la susceptibilidad tiende a 0 más lentamente. Esto es debido a que la magnetización no se ve reducida tan bruscamente como en el caso sin campo, y la transición de fase se da de manera más lenta y controlada por la presencia del campo externo que trata de mantener alineados los espines. Al igual que con el calor específico, el comportamiento es análogo al caso en 1D.

4.2.4. Magnetización

Al añadir campo magnético, los espines tienden a alinearse con este y mantenerse en esa posición. Esto provoca que se necesiten temperaturas mayores para desalinearlos y, que la transición de fase no se dé de manera tan brusca como en el caso sin campo, por lo que la caída de la magnetización es más lenta. Por lo tanto, se necesitará más temperatura para pasar de ferromagnético a paramagnético. Comparando la cuarta gráfica de la fig. 2 con la de la fig. 1, podemos ver que la magnetización tiende a cero para una temperatura mayor, lo que indica que la temperatura crítica es mayor cuando hay campo magnético externo. Se puede apreciar que el comportamiento es análogo al caso en 1D con campo.

5. Estudio del comportamiento del sistema

En esta sección se detalla cómo afecta la variación de ciertos parámetros a los resultados, así como diferentes maneras de observar el comportamiento del sistema.

5.1. Variación del campo magnético externo

Se han graficado las magnitudes comentadas en la anterior sección para diferentes valores de campo externo (ver fig. 4). De igual manera que en la fig. 2, se ha estimado una temperatura crítica para cada valor de H , situando la cifra en la abscisa donde el calor específico es máximo. Dicho valor es puramente orientativo y solo pretende mostrar cómo de manera general, T_c se desplaza a temperaturas mayores conforme se aumenta el campo externo H .

En primer lugar, en cuanto a la energía, vemos que a mayor campo magnético externo la energía inicial es mayor en valor absoluto dado que este campo que afecta a los espines de espines aporta energía a estos. Físicamente, los espines tienden a no moverse por la presencia del campo medio lo que provoca que se necesiten temperaturas más altas para alcanzar el equilibrio de energía en 0.

En segundo lugar se observa que el calor específico no varía mucho a diferentes campos magnéticos externos, el comportamiento es cualitativamente el mismo con la única diferencia en el punto en el que se alcanzan los máximos dado que al desplazar la temperatura crítica los máximos de fluctuaciones energéticas tardan más en aparecer. Por otro lado, los máximos de esta magnitud son más bajos a mayor campo magnético, debido a que las fluctuaciones de energía se reducen por la tendencia de espines a alinearse con el campo, como se ha explicado en la anterior sección, y al ser esta magnitud dependiente de las fluctuaciones de la energía el máximo disminuye.

Respecto a la susceptibilidad magnética, disminuye su pico a medida que se aumenta el campo magnético debido a que al haber un mayor campo el material tiende menos a magnetizarse. El comportamiento sigue siendo el mismo para todos los casos ya que tiende a 0 siguiendo la ley de Curie. Sin embargo, al igual que con el calor específico, sus máximos aparecen a temperaturas más altas conforme mayor es el campo magnético debido a que las fluctuaciones de la magnetización se ven reducidas por la tendencia de los espines a permanecer

paralelos al campo externo.

Por último, respecto a la magnetización media, para campos muy bajos vemos cómo rápidamente tiende a 0 con una pendiente más pronunciada. Esta caída es más suave al desplazarse la temperatura crítica debido a que es más complicado desalinear los espines al influirse entre ellos con su campo medio, es decir, la influencia del campo de los espines vecinos dificulta la posibilidad de que estos se desalíneen con el campo provocando que la transición de fase sea más lenta y se dé para temperaturas suficientemente altas como para que la energía térmica se imponga sobre la generada por el campo externo, como se ha explicado en la anterior sección.

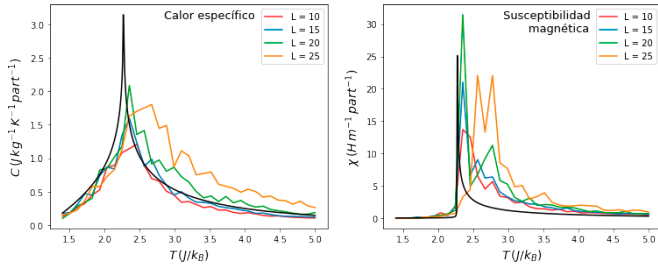


Figure 5: Diferentes aproximaciones numéricas (normalizadas con un factor N) para diferentes valores de L , con un mismo número de iteraciones: 1.125×10^5 .

5.2. Variación del número de partículas

Se ha graficado la dependencia de la capacidad calorífica y la susceptibilidad magnética con T para diferentes valores de L , ya que éstas dos magnitudes presentan picos que deberían tender a infinito y son las que más dificultad presentan en el momento de converger a sus expresiones analíticas (fig. 5). En las simulaciones, se observa qué ocurre cuando manteniendo el número de iteraciones, variamos el número de partículas. Se aprecia como al aumentar el número de partículas el error respecto al valor teórico es mayor debido a la relación entre el número de partículas y de iteraciones. Podemos concluir que para obtener resultados óptimos es necesario que el número de iteraciones sea mucho mayor al número de partículas. Por otro lado, se aprecia como un aumento en el número de partículas ayuda a la suavización de la curva computada, presentando fluctuaciones menos pronunciadas. Sin embargo, tal como se puede observar, un aumento del número de partículas es perjudicial para obtener una buena aproximación si dicho aumento no va acompañado de una cantidad mucho mayor de iteraciones.

5.3. Dominios Magnéticos

Un dominio magnético es una región dentro de un material que tiene magnetización uniforme, es decir, regiones en las cuales los momentos magnéticos están alineados. En el modelo de Ising 2D aparecen dominios magnéticos para temperaturas menores a la crítica debido a que es el intervalo en el que la energía propia de cambio se impone sobre la energía térmica ya que a temperaturas mayores que la crítica pasamos a una distribución aleatoria de espines (ver fig. 3). Si partimos de

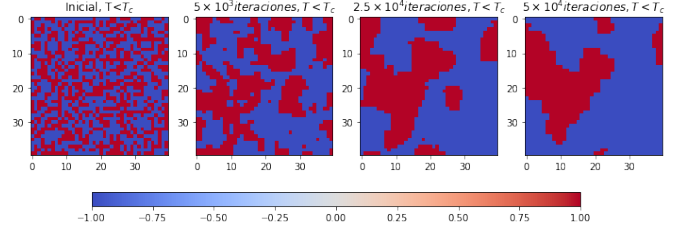


Figure 6: Variación de la malla a lo largo de las iteraciones partiendo de una configuración aleatoria para un valor de $T < T_c$. La gráfica ha sido generada con una malla de $L = 40$ y 5×10^4 iteraciones.

una configuración aleatoria para una temperatura fija menor a la crítica, los espines tienden a alinearse paralelos unos a otros (ver fig. 6). Si un espín se encuentra desalineado en un grupo de espines alineados conjuntamente, estos ejercerán influencia para que el espín con un momento diferente adopte el del grupo. Según iteramos se van añadiendo nuevos espines a cada uno de estos grupos, generando ciertos núcleos que tenderán a expandirse por todo el dominio. Si aumentamos la temperatura por encima de la crítica la energía térmica cobra importancia y los espines tienen más probabilidad de fluctuar lo que provoca un mayor desorden (como vemos en la fig. 3) y dominios magnéticos más pequeños o la desaparición de los mismos.

Estos dominios aparecen tanto si la distribución inicial de espines es aleatoria como si la mayoría de espines se encuentran alineados. Sin embargo, se necesitarán un mayor número de iteraciones en el caso en el cual los espines están mayormente alineados debido a que a temperaturas bajas la aleatoriedad es mínima y es complicado que los espines cambien su orientación (ver fig. 3). Por ello, en dicho caso la aparición de estos dominios es más lenta y aparecen en pequeñas dimensiones y son más puntuales.

En el modelo de Ising 1D no se podían ver estos dominios ya que los espines se distribuían linealmente por lo que no se podían generar éstas regiones.

5.4. Histéresis

La histéresis es la tendencia del material a conservar la magnetización M al eliminar el campo magnético externo H . Se han representado tres ciclos de histéresis a distintas temperaturas (ver fig. 7). Nótese que a menor temperatura, debido a que hay menor variación en los espines, se alcanza la magnetización de saturación con un menor campo magnético. Por el contrario, a temperaturas más cercanas a la crítica hay mayor variación en los espines, por lo que se necesita un mayor campo magnético externo para llegar a la magnetización de saturación. Por otro lado, vemos como el área del ciclo de histéresis es mayor para temperaturas más bajas, esto tiene sentido ya que a temperaturas bajas las fluctuaciones de los espines son raras lo que provoca que sea mucho más complicado la reducción de la magnetización tras eliminar el campo, es decir, estos tenderán a permanecer paralelos entre sí lo que explica que se mantenga esa magnetización de saturación durante la variación de campo

magnético. Sin embargo, a temperaturas más altas, cercanas a la crítica, vemos como el área del ciclo es menor ya que, como la energía térmica cobra importancia, es más sencillo que la orientación de los espines cambie provocando que cuando se reduce el campo magnético rápidamente la magnetización comience a disminuir consecuentemente.

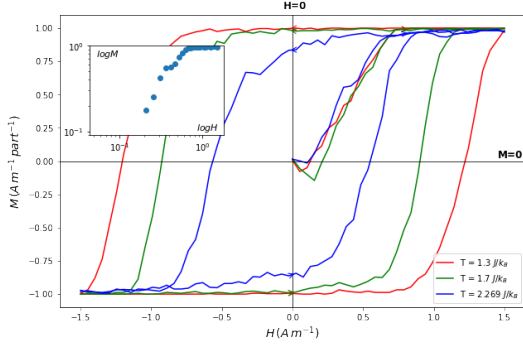


Figure 7: Dependencia de la magnetización en función del campo externo H aplicado, partiendo de configuraciones aleatorias con campo nulo. Resultados para malla de lado $L = 25$. Se ha graficado $\log M$ frente a $\log H$ para el tramo $H \in [0, 1.5]$, para el caso en que $T = T_c$.

En el modelo de Ising de 1D este comportamiento no se vería debido a que no aparece el comportamiento ferromagnético por lo que, al quitar el campo magnético externo, rápidamente los espines volverían a fluctuar. Esto se debe a que en 1D solo interactúan con su vecino más cercano por lo que la influencia entre espines no es tan grande y, a temperaturas bajas, fluctuarían también al no influirse tanto como en 2D donde tenemos una distribución más compleja y aparecen interacciones entre varios espines.

Se ha graficado además la dependencia de $\log M$ frente a $\log H$ para valores de H entre 0 y H_{max} , es decir, 1.5, para el caso en que la temperatura es igual a la crítica. Esto se ha hecho con el objetivo de aproximar el exponente crítico δ , pero debido a la limitada capacidad computacional que teníamos en disposición no hemos sido capaces de hallar un resultado coherente. Es por ello que se ha dejado la gráfica como información adicional pero no se ha llegado a un valor numérico para el exponente.

No obstante, teóricamente se sabe que el valor de este exponente crítico δ en el modelo de Ising bidimensional adquiere un valor de $\delta = 15$ [10]. Este exponente crítico se refiere a la relación conocida como la isoterma crítica ($M = H^{1/\delta}$). Esta relación, al determinar el valor de δ , proporciona información sobre cómo la magnetización del sistema responde al campo magnético aplicado cerca del punto crítico de la transición de fase.

En general, la obtención de exponentes críticos, como α , β o γ , sobre calor específico, magnetización y susceptibilidad inicial respectivamente, es clave en la descripción del comportamiento de las variables termodinámicas cuando un sistema, magnético en este caso, se encuentra cerca de la temperatura crítica. Por otro lado, cabe destacar que el valor de estos exponentes varía dependiendo del tipo de sistema que se esté estudiando, además, en sistemas reales, pueden depender de otros

factores como las interacciones magnéticas o la estructura del material.

6. Conclusiones

Como bien se ha comprobado en el apartado de simulaciones computacionales, el algoritmo de Metrópolis es un buen método para aproximar el modelo de Ising en 2D. A diferencia del modelo 1D, en el 2D sí que hay transición de fase, por lo que cerca de la temperatura crítica no se producen oscilaciones. Esto es debido a que la temperatura crítica en el modelo 1D es 0 o muy cercana a 0 y a la hora de dividir entre esta varía mucho los resultados. El sentido físico de las tendencias de las distintas magnitudes ya se ha tratado en profundidad en el apartado de discusión de resultados. Por otra parte, a la hora de graficar los resultados se ha llegado a la conclusión de que a partir de cierto número de partículas es más importante aumentar el número de pasos que el de partículas para lograr buenas aproximaciones.

Por otro lado, se ha podido ver como el modelo de Ising en 2D consigue una mayor profundidad en la explicación de comportamientos magnéticos reales que el modelo de Ising 1D no puede explicar por su simplicidad. Es el caso por ejemplo de los dominios magnéticos, explicados en la anterior sección, mediante los cuales se pueden explicar comportamientos como la metaestabilidad, que se refiere a la existencia de estados metaestables en un sistema que pueden persistir durante un tiempo significativo antes de alcanzar su estado de equilibrio. Los dominios actúan como estos estados metaestables al coexistir y mantenerse regiones con orientaciones de espines opuestas durante tiempo antes de alcanzar un equilibrio. También, el modelo de Ising 2D proporciona información sobre la nucleación, proceso mediante el cual se forma un nuevo dominio magnético en un sistema. Dicho proceso tiene su origen en los cambios de las configuraciones para temperaturas por debajo de la crítica, los cuales han podido ser observados en la anterior sección. Además, hemos podido verificar que se trata de un modelo perfecto para explicar el comportamiento de los materiales ferromagnéticos mediante los ciclos de histéresis e incluso en la obtención de los exponentes críticos para describir el comportamiento de los mismos.

En definitiva, se ha podido ver como el modelo de Ising es un estudio clave para la explicación de numerosos fenómenos magnéticos reales y su importancia en la física.

Appendix A. Deducción de la función de partición

Partimos de considerar una malla discreta de lado L , donde en cada uno de sus puntos se coloca un espín ideal de valor ± 1 (en total $N = L^2$ espines). Identificamos dos posiciones concretas con los subíndices $i, j = 1, 2, \dots, L^2$. A diferencia de lo que ocurriría para el caso unidimensional, donde cada espín tenía dos vecinos inmediatos, para el caso bidimensional se tiene que cada partícula posee cuatro vecinos inmediatos. Denotamos con la

letra \mathcal{N} el conjunto de pares de puntos (i, j) tales que los espines σ_i, σ_j son vecinos inmediatos. Por tanto, definimos el hamiltoniano del sistema como:

$$H = -J \sum_{i,j \in \mathcal{N}} \sigma_i \sigma_j \quad (\text{A.1})$$

Donde J es una constante de acoplamiento y el sumatorio no repite las contribuciones del par (j, i) si ya se ha considerado el par (i, j) . Sin pérdida de generalidad se va a tomar la constante de acoplamiento como 1. Definimos la función de partición como $Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H}$, donde $\beta = 1/k_B T$ y $\sum_{\sigma} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1}$. Como en la expresión de la función de partición aparece un sumatorio en el término exponencial, reescribimos la expresión con un productorio:

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_N e^{\beta \sigma_i \sigma_j} \quad (\text{A.2})$$

Teniendo en cuenta que $\sigma_i \sigma_j = \pm 1$ y que $\exp(\pm x) = \cosh(x) \pm \sinh(x)$, se llega a que $\exp(\beta \sigma_i \sigma_j) = \cosh(\beta)(1 + \sigma_i \sigma_j u)$, donde $u = \tanh(\beta)$. Teniendo en cuenta la relación $1 - \tanh^2(x) = \text{sech}^2(x)$ y aplicando el cambio de variable $u = \tanh(\beta)$, hallamos la relación entre \cosh y u , $\cosh(\beta) = 1/\sqrt{1-u^2}$. Tras estas consideraciones podemos reescribir nuestra función de partición como.

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_N \frac{(1 + \sigma_i \sigma_j u)}{\sqrt{1-u^2}} \quad (\text{A.3})$$

Asumiendo condiciones de contorno periódicas, se tiene que el número total de enlaces, n_b es igual a $2N$. Podemos sacar pues el término de la raíz fuera del productorio y de los sumatorios, reescrito como $(1-u^2)^{-n_b/2} = (1-u^2)^{-N}$. A continuación, desarrollamos el término $\prod_N (1 + \sigma_i \sigma_j u)$. Si lo expandimos como $(1 + \sigma_{i1} \sigma_{j1} u)(1 + \sigma_{i2} \sigma_{j2} u) \dots$, observamos como dicho producto puede ser sintetizado como $\sum_{m=0}^{2N} u^m \prod_{N^m} \sigma_{im} \sigma_{jm}$, donde el sumatorio recorre cada uno de los $2N$ distintos enlaces posibles (denotados por m).

En lenguaje de teoría de grafos, con el sumatorio anterior estamos recorriendo todos los grafos con m aristas (es decir, m enlaces). Observamos que si un nodo σ_k tiene grado q_k en un determinado grafo con m aristas, σ_k aparecerá q_k veces en el productorio de los grafos con m aristas. (aparece por tanto un término σ^{q_k}). Si alguno de los nodos tiene grado impar, entonces en el sumatorio que recorre todas las posibles configuraciones de los espines aparecerá un término nulo, ya que $\sum_{\sigma_k=\pm 1} \sigma^{q_k} = -1 + 1 = 0$, eliminando la contribución del grafo entero a la función de partición. Solo contribuirán por tanto grafos cuyos nodos sean de grado par, los cuales siguiendo el razonamiento previo contribuirán con un factor 2 por cada nodo ya que $\sum_{\sigma_k=\pm 1} \sigma^{q_k} = 1 + 1 = 2$. Si nuestro grafo posee V vértices, contribuirá con un factor 2^V . Además, debemos tener en cuenta los $N - V$ espines que no forman parte del grafo ($q_k = 0$), cuya contribución será también de 2. Por tanto, la contribución total del grafo es $2^{V+N-V} = 2^N$. Separando de la suma el término $m = 0$ (igual a 1), reescribimos la expresión del productorio original como $\prod_N (1 + \sigma_i \sigma_j u) = 1 + \sum_{m=1}^{2N} u^m \prod_{N^m} \sigma_{im} \sigma_{jm}$.

Se llega a que la expresión para la función de partición toma la forma:

$$Z = 2^N (1-u^2)^{-N} \left(1 + \sum_{G \in \mathcal{A}} u^{m(G)} \right) \quad (\text{A.4})$$

Donde \mathcal{A} es el conjunto de todos los grafos admisibles y $m(G)$ el número de enlaces en el grafo admisible G . Al no haber nodos de grado impar, ninguno hará de extremo de una cadena de espines y por tanto se puede descomponer el grafo en caminos cerrados. Además, se va a dotar de sentido a los enlaces (el enlace i, j parte del espín i y acaba en el j). Se define el signo de un camino p como:

$$s(p) = -(-1)^{\omega t} \quad (\text{A.5})$$

Siendo t el ángulo total de rotación dividido entre 2π (usando la convención de que los ángulos positivos se definen en sentido antihorario) y ω igual a 1 para caminos no periódicos e igual a el mayor entero tal que los ω subcaminos idénticos no sean periódicos en el caso de que el camino sea periódico.

Se define la amplitud de un camino como:

$$W(p) = s(p) u^{m(p)} \quad (\text{A.6})$$

Donde m es la longitud total del camino. Se puede probar que $1 + \sum_{G \in \mathcal{A}} u^{m(G)} = \prod_{[p]} (1 + W(p))$, donde $[p]$ denota el conjunto de caminos cerrados no periódicos. Empleando dicha relación, reescribimos la función de partición como:

$$Z = 2^N (1-u^2)^{-N} \prod_{[p]} (1 + W(p)) \quad (\text{A.7})$$

A continuación, se va a detallar la contabilización de los caminos. Como el signo de un camino depende del ángulo rotado en cada paso, giros hacia la derecha o hacia la izquierda aportarán un factor 1/4 de cambio de signo. Definimos el factor de giro a la izquierda como $\alpha = e^{i\pi/4}$, y de manera similar el factor de giro a la derecha, $\bar{\alpha} = e^{-i\pi/4}$. Para el caso de seguir recto se otorga el valor 1 a dicho factor, y para el de ir hacia atrás se le otorga el valor 0. Empleando dichos factores se puede reescribir la amplitud del camino como $W(p) = \bar{\alpha}^a \alpha^b 1^c 0^d u^{a+b+c+d}$, donde a es el número de giros a derechas, b el número de giros a izquierdas, c el número de no giros y d el número de retrocesos. De manera similar a como ocurre en la teoría de la probabilidad, la mecánica ondulatoria o la mecánica cuántica, supondremos que las amplitudes obedecen al principio de superposición lineal, es decir, la amplitud combinada de un conjunto de caminos es igual a la suma de las amplitudes de cada camino. Considerando valores de y positivos la dirección arriba (U) y valores de x positivos la dirección derecha (R), se tiene que la amplitud para la llegada desde abajo (dirección U) en el paso n al punto (x, y) es $U_n(x, y) = [U_{n-1}(x, y-1) + 0D_{n-1}(x, y-1) + \alpha L_{n-1}(x, y-1) + \bar{\alpha} R_{n-1}(x, y-1)]u$, (D denota dirección abajo y L dirección izquierda). Se obtienen de manera análoga las expresiones $D_n(x, y)$, $L_n(x, y)$ y $R_n(x, y)$. Por tanto, la amplitud total para la suma de todos los segmentos posibles que parten de un origen arbitrario y llegan a un punto (x, y) tras exactamente n pasos es $U_n(x, y) + D_n(x, y) + L_n(x, y) + R_n(x, y)$.

Se puede expresar dicha amplitud como una recurrencia de los términos $n-1$ y anteriores, lo que implicaría un desplazamiento en nuestra red. Para simplificar dichas translaciones espaciales y convertirlas en desfases, se va a emplear la transformada de Fourier bidimensional y su inversa definidas como [11]:

$$\hat{U}_n(k_x, k_y) = \sum_{x=-\infty}^{\infty} \sum_{y=-\infty}^{\infty} U_n(x, y) e^{-ik_x x} e^{-ik_y y} \quad (\text{A.8})$$

$$U_n(x, y) = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \hat{U}_n(k_x, k_y) e^{ik_x x} e^{ik_y y} dk_x dk_y \quad (\text{A.9})$$

Aplicando la transformada a $U_n(x, y)$, hallamos que $\hat{U}_n(k_x, k_y) = u e^{-ik_y} [\hat{U}_n(k_x, k_y) + 0 \hat{D}_n(k_x, k_y) + \alpha \hat{L}_n(k_x, k_y) + \bar{\alpha} \hat{R}_n(k_x, k_y)]$. Se pueden hallar las transformadas de las otras tres amplitudes de forma análoga. Definiendo el vector $\psi_n = [\hat{U}_n, \hat{D}_n, \hat{L}_n, \hat{R}_n]$ y la matriz

$$M = \begin{bmatrix} v & o & v\alpha & v\bar{\alpha} \\ 0 & \bar{v} & \bar{v}\alpha & \bar{v}\bar{\alpha} \\ \bar{h}\bar{\alpha} & \bar{h}\alpha & \bar{h} & 0 \\ h\alpha & h\bar{\alpha} & 0 & h \end{bmatrix} \quad (\text{A.10})$$

Donde $v = e^{-ik_y}$ y $h = e^{ik_x}$. Escribimos la expresión de recurrencia como $\psi_n = u M \psi_{n-1} = u^n M^n \psi_0$. Obsérvese que en el caso de un ciclo cerrado, $\psi_n = \psi_0$. Definiendo ϵ_i con $i = 1, 2, 3, 4$ los vectores unitarios que forman la base de ψ (Direcciones U, D, R, L), podemos escribir la expresión (transformada mediante Fourier) de la amplitud de todos los caminos que terminan en el origen con dirección U (caminos cerrados) como $u^n \psi_0^T M^n \psi_0$ con $\psi = \epsilon_1$. Nótese pues que las contribuciones de las cuatro posibles direcciones a la amplitud total pueden ser escritas como:

$$\sum_{i=1}^4 \langle \epsilon_i | (uM)^n | \epsilon_i \rangle = \text{Tr}(uM)^n \quad (\text{A.11})$$

Donde se ha simplificado la notación de vectores transpuestos en la primera expresión empleando la notación Bra-Ket de Dirac. Desahaciendo la transformada de Fourier, podemos llegar a la expresión de la amplitud final:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{p(n)} W(p) = \sum_{n=1}^{\infty} -\frac{N}{2n} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{Tr}(uM)^n dk_x dk_y \quad (\text{A.12})$$

Donde, en primer lugar, se ha añadido un factor $\sum_{n=1}^{\infty} 1/n$ ya que para un determinado camino de longitud n hay n posibles posiciones iniciales y de esta manera eliminamos los términos ya tenidos en consideración. En segundo lugar, como el signo de la amplitud es -1 veces el número de veces que el vector tangente del camino gira alrededor del origen, ha sido necesario multiplicar por -1. Además, hemos considerado solo los caminos que empiezan y terminan en un determinado origen, por lo que debemos multiplicar la expresión por N para considerar todos los posibles orígenes, y dividir por un factor 2 ya que contar el camino en dirección inversa es redundante. Se puede probar como intercambiar el orden de las integrales y

el sumatorio es válido. Podemos, por tanto, realizar dicho intercambio y reescribir $\text{Tr} \sum_{n=1}^{\infty} -(uM)^n/n = \text{Tr} \ln(1 - uM) = \ln \det(1 - uM)$. Nótese que $\sum_{n=1}^{\infty} 1/n \sum_{p(n)} W(p)$ equivale a $\sum_{[p]} (W - W^2/2 + W^3/3 - \dots) = \sum_{[p]} \ln(1 + W) = \ln \prod_{[p]} (1 + W)$. En ambos casos se ha aplicado que la suma de logaritmos es el logaritmo del producto. Retomando nuestro cambio de variable, $u = \tanh(\beta)$, aplicando ciertas relaciones trigonométricas se puede demostrar que $\ln \det(1 - uM) = -4 \ln \cosh(\beta) + \ln[\cosh^2(2\beta) - \sinh(2\beta)(\cos(k_x) + \cos(k_y))]$ y que $1 - u^2 = 1/\cosh^2(\beta)$. Juntando las expresiones anteriores, reescribimos finalmente la función de partición como:

$$Z = [2 \cosh^2(\beta)]^N \exp \left[\frac{N}{2n} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \xi dk_x dk_y \right] \quad (\text{A.13})$$

$$\xi = -4 \ln \cosh(\beta) + \ln[\cosh^2(2\beta) - \sinh(2\beta)(\cos(k_x) + \cos(k_y))]$$

Partiendo de ella se llega a la expresión para $\ln Z/N$:

$$\ln[2 \cosh(2\beta)] + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \ln[1 - 2\kappa(\cos(k_x) + \cos(k_y))] dk_x dk_y \quad (\text{A.14})$$

Donde $2\kappa = \sinh(2\beta)/\cosh^2(2\beta)$.

References

- [1] Ernst Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus - zeitschrift für physik a hadrons and nuclei, Feb 1925.
- [2] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, Feb 1944.
- [3] J. Ricardo Arias-Gonzalez. Práctica informática de física estadística 6: Modelo de ising 2d y transiciones de fase. 2023.
- [4] Paul D. Beale R.K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Katey Birtcher, 4 edition, 2022.
- [5] C. N. Yang. The spontaneous magnetization of a two-dimensional ising model. *Phys. Rev.*, 85:808–816, Mar 1952.
- [6] Tai Tsun Wu, Barry M. McCoy, Craig A. Tracy, and Eytan Barouch. Spin-spin correlation functions for the two-dimensional ising model: Exact theory in the scaling region. *Phys. Rev. B*, 13:316–374, Jan 1976.
- [7] W. K. Hastings. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, 57(1):97–109, 04 1970.
- [8] M. Nieto Pérez, M. Regal Sevilla, D. Ainoo Pérez, M. Molina O'Brien, L. Mompó Ruiz, and M. Osa Bonillo. Estudio del modelo de Ising en una dimensión empleando simulaciones computacionales. 2023.
- [9] Angelica L. Gelover-Santiago. *Simulación del modelo de Ising con el método de Monte Carlo*. Facultad de Ciencias, UNAM, 2005.
- [10] Andrea Pelissetto and Ettore Vicari. Critical phenomena and renormalization-group theory. *Physics Reports*, 368, 01 2001.
- [11] Ronald Bracewell. *The Fourier Transform and Its Applications*. McGraw-Hill, 2000.