



---

# COMPUTACIÓN AVANZADA

---

Práctica Final: Modelo de Ising.



30 DE MAYO DE 2023

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

Pablo Gradolph Oliva

## 1. INTRODUCCIÓN

El modelo de Ising es un modelo teórico que se utiliza para describir y estudiar los fenómenos de magnetismo en sistemas físicos. Fue propuesto por Ernst Ising en 1925 como una simplificación para comprender las interacciones entre los espines de los átomos en un material magnético.

En el modelo de Ising, se considera un sistema compuesto por una red discreta de puntos, donde cada punto representa un átomo o un espín magnético. Cada espín puede tomar dos posibles estados:

- Arriba (representado con +1)
- Abajo (representado con -1)

La energía total del sistema se calcula teniendo en cuenta las interacciones entre los espines vecinos. Cuando los espines están alineados, es decir, todos “arriba” o todos “abajo”, la energía del sistema es mínima. Por el contrario, cuando los espines están desalineados, la energía es mayor.

En el caso más simple, el modelo de Ising considera solo interacciones entre los espines más cercanos en una dimensión lineal. Sin embargo, el modelo también se puede extender a sistemas en dos o más dimensiones, donde cada espín tiene interacciones con sus vecinos en las distintas direcciones.

En esta práctica, estudiaremos el modelo de Ising en 2 dimensiones, el cual, ha sido ampliamente utilizado para estudiar fenómenos magnéticos, como la formación de dominios magnéticos, las transiciones de fase y las propiedades críticas de los materiales.

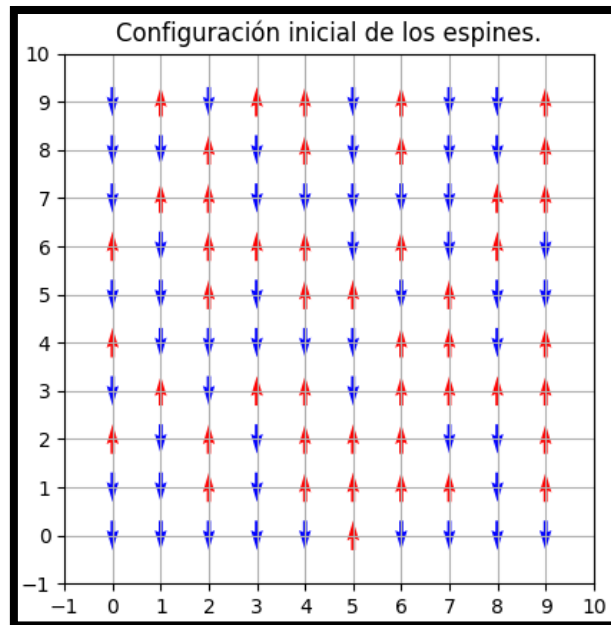
## 2. OBJETIVOS

A través de simulaciones y análisis numéricos, se pueden obtener resultados que ayudan a comprender los comportamientos magnéticos y las propiedades emergentes de los sistemas físicos. A partir de esto, y trabajando con el modelo de Ising en 2 dimensiones, la práctica ha tenido 3 objetivos principales:

- Estudiar la transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising, en ausencia de un campo magnético externo.
- Para este mismo caso, estudiar la correlación entre los espines de la red. Entendiendo así, los beneficios de estos métodos numéricos frente a otros teóricos como la teoría del campo medio.
- Y, estudiar también el comportamiento del sistema para la transición de fase de primer orden viendo como varía la magnetización en función del campo magnético externo aplicado.

### 3. PROCEDIMIENTO

Para lograr estos objetivos se han seguido diferentes pasos. En primer lugar, se ha establecido una configuración inicial para los espines en una red de espines 10x10 que es con la que hemos trabajado para conseguir el primer objetivo. Se muestra un ejemplo de dicha configuración inicial:



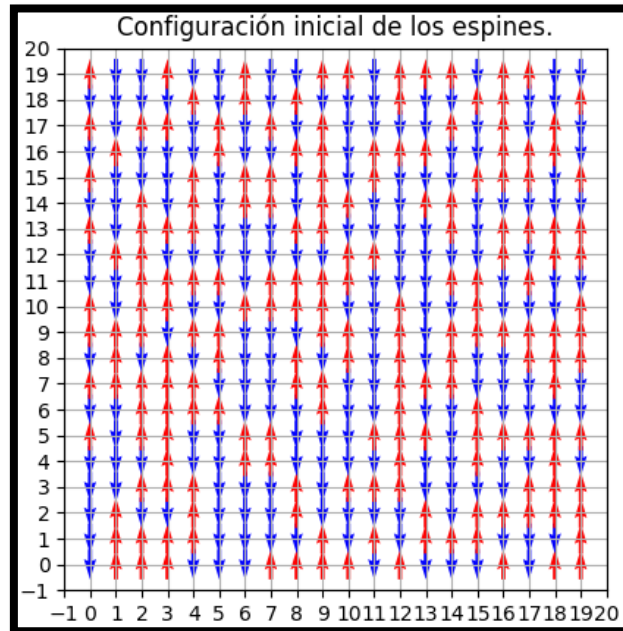
Posteriormente, se han establecido las temperaturas con las que vamos a trabajar (de 0 a 5 grados) y, se han ido fijando antes de empezar la simulación puesto que la transición de fase está directamente relacionada con la temperatura crítica.

El proceso de simulación se ha llevado a cabo mediante el método de Montecarlo con el algoritmo de Metrópolis. En cada paso temporal, se ha recorrido cada espín del sistema y se ha calculado la energía necesaria para su volteo. Para los espines ubicados en los bordes y esquinas de la red, se han aplicado condiciones de contorno periódicas para tener en cuenta las interacciones con los vecinos. Dependiendo de la energía calculada, se ha decidido si se voltea o no el espín, y se ha pasado al siguiente.

Durante la simulación, se han obtenido magnitudes de interés como la magnetización y la energía del sistema en cada paso temporal, y se han calculado otras magnitudes como la susceptibilidad magnética o el calor específico. Estas magnitudes han sido registradas para posteriormente analizar y representar los resultados obtenidos.

Tras la simulación, y, a partir de los datos obtenidos, se ha aplicado la técnica del gradiente sobre los datos de la gráfica "magnetización frente a temperatura" para resolver el problema de ajuste de curvas y encontrar los valores óptimos de los parámetros temperatura crítica ( $T_c$ ) y exponente crítico beta ( $\beta$ ). La idea básica detrás de esta técnica es minimizar la diferencia entre los valores predichos por nuestro modelo y los valores observados.

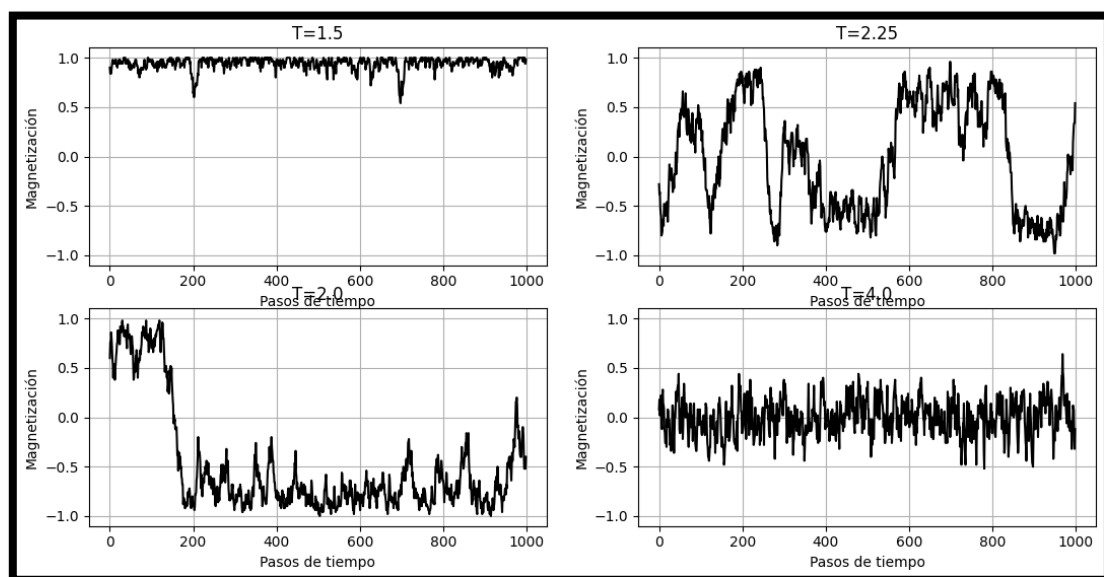
Tras esto habríamos cumplido el primer objetivo, y para el segundo habríamos hecho lo mismo, pero para una red 20x20 (mayor posibilidad de distancias) y sin recoger tantos datos ya que nos hemos centrado únicamente en la función de correlación. Estos resultados se discutirán más adelante. Se muestra la configuración inicial de estos espines:



Por último y, para cumplir el último objetivo se ha hecho una simulación similar a la primera, pero estudiando la influencia del campo magnético externo (transición de fase de primer orden), es decir, se han recogido los resultados de la magnetización en función del campo magnético externo aplicado.

#### 4. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS Y ANÁLISIS DE LOS MISMOS

##### 4.1. MAGNETIZACIÓN FRENTE A PASOS DE TIEMPO

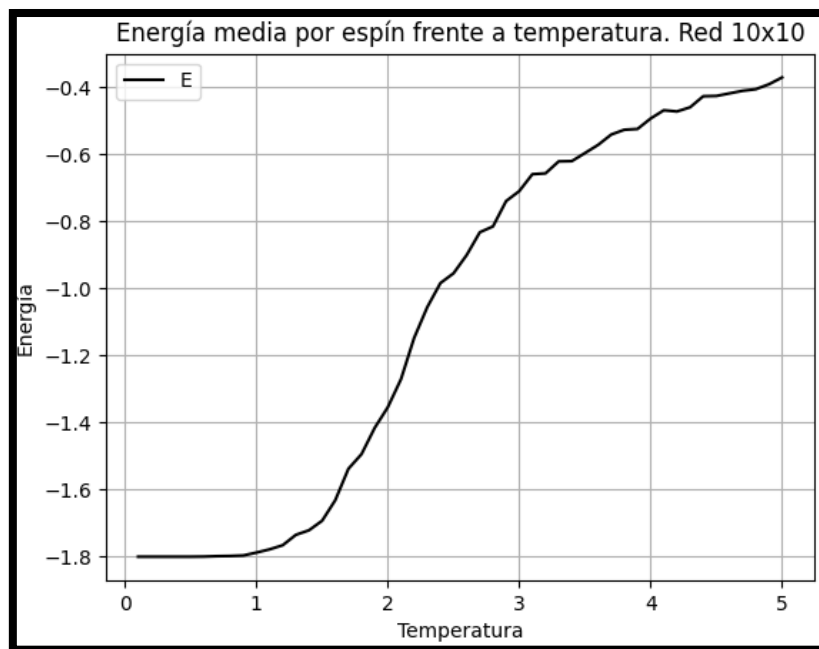


En primer lugar, se ha representado la magnetización de la red frente a los pasos de tiempo en la simulación para distintos valores de la temperatura. Vemos como para  $T = 1.5$  hay pocas fluctuaciones y un valor de la magnetización bastante constante, este valor siempre estará cerca de 1 o de -1, dependiendo de la aleatoriedad, pero esto significa que llegada esta temperatura todos o casi todos los espines están alineados en el mismo sentido.

A medida que la temperatura aumenta y se acerca a la temperatura crítica ( $T=2.27$  es la temperatura crítica teórica del modelo de Ising en 2D), la energía térmica se vuelve comparable a la energía de interacción. Esto significa que los espines tienen una mayor probabilidad de cambiar su orientación debido a la agitación térmica. Como resultado, se produce un equilibrio entre espines alineados y espines desalineados, lo que conduce a una disminución de la temperatura y por esto vemos estas fluctuaciones en las gráficas.

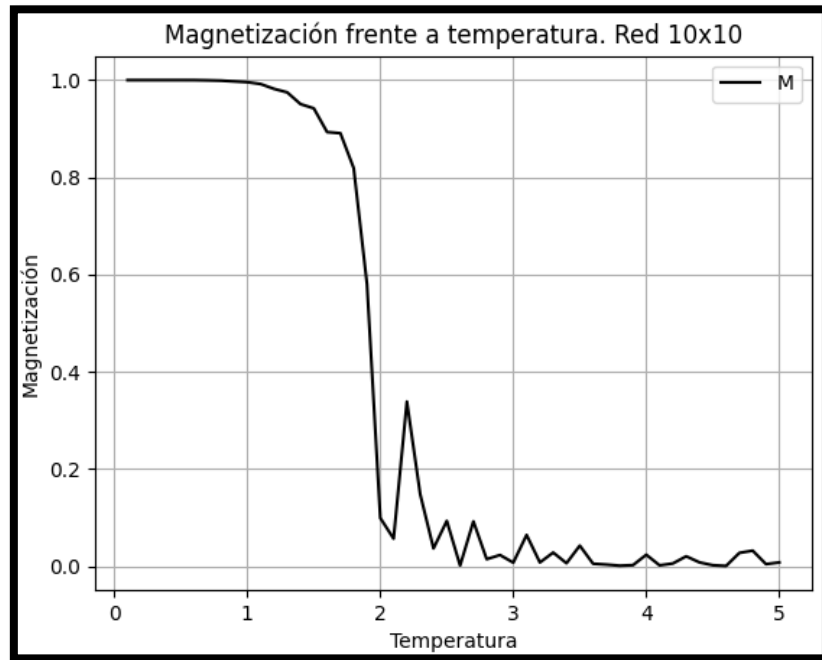
Por último, por encima de la temperatura crítica, los espines están desordenados y la magnetización es baja.

#### 4.2. ENERGÍA MEDIA POR ESPÍN FRENTE A LA TEMPERATURA



A continuación, se ha representado la energía media por espín frente a la temperatura. La energía mínima debe ser cercana a -2 debido a las contribuciones de interacción entre los espines en la red y la máxima debería ser cercana a 0. No llegamos exactamente a estas magnitudes porque va a haber zonas donde los espines estén orientados en un sentido y otras zonas en el otro ya que un espín local, de cierta manera influye en los que están alrededor (fenómeno de correlación que veremos más adelante). Comentar también que se obtiene un punto de inflexión en el punto de la temperatura crítica, la pendiente en este punto toma un valor máximo, aunque no es infinito como debería ocurrir en el caso con millones de partículas.

#### 4.3. MAGNETIZACIÓN FRENTE A LA TEMPERATURA



En este caso he representado la magnetización frente a la temperatura para la que hemos obtenido esta curva, similar a la que se obtendría teóricamente, pero con una caída más abrupta, esto es porque, dada la ecuación:

$$M \sim (T_c - T)^\beta$$

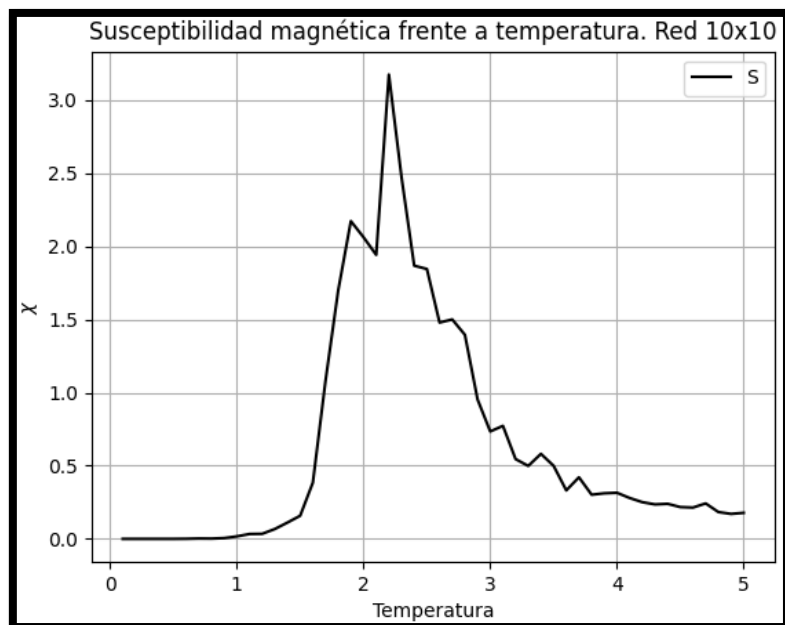
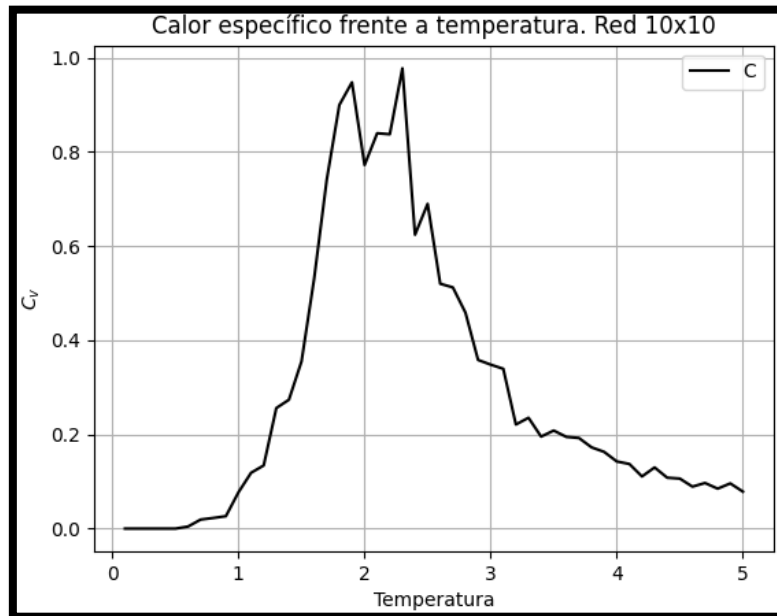
En los resultados numéricos obtenemos un valor de beta (exponente crítico) más pequeño que el que se obtiene de forma teórica (0.5 de forma teórica). Para obtener tanto este exponente como el valor de la temperatura crítica se ha aplicado la técnica del gradiente y los resultados obtenidos son:

VALOR DE BETA	0.405834
TEMPERATURA CRÍTICA	2.136915

Que como vemos son similares a los teóricos, pero no están ajustados al 100% por lo que se obtienen estas pequeñas diferencias con los gráficos teóricos.

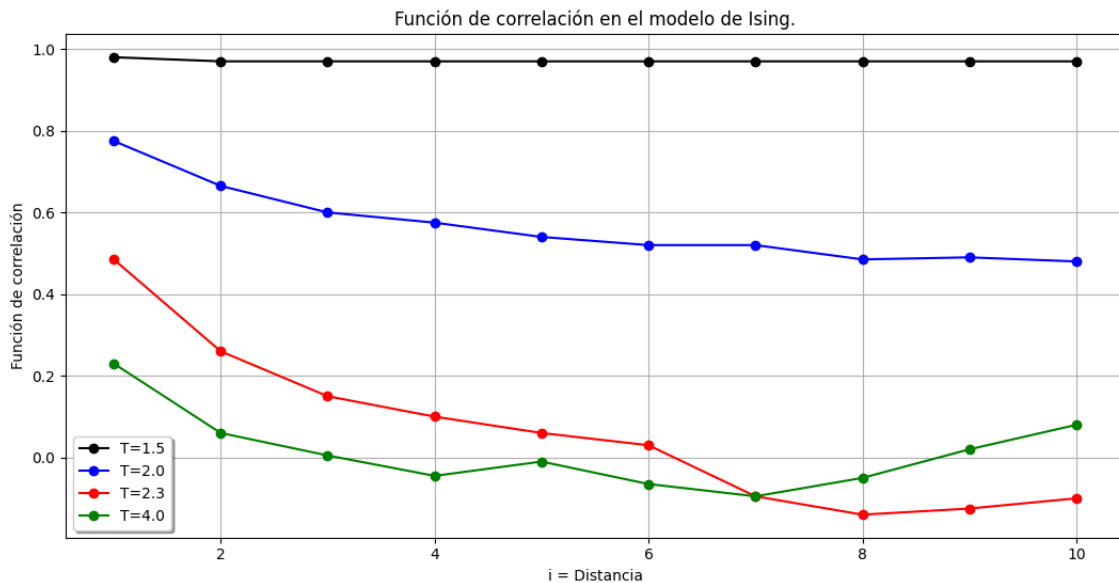
#### 4.4. CALOR ESPECÍFICO Y SUSCEPTIBILIDAD MAGNÉTICA

Sabemos que de forma teórica para estas dos magnitudes se obtienen funciones delta al representarlas, con la tendencia de que al aumentar el número de espines se hace una gráfica más estrecha y más alta. Vemos como los resultados obtenidos se asemejan a esto:



#### 4.5. FUNCIÓN DE CORRELACIÓN

La función de correlación se ha estudiado en una red 20x20 (mayores distancias). Veamos los resultados obtenidos:



Que salga un valor alto en la correlación, no quiere decir que haya una gran correlación, a temperaturas bajas ( $T=1.5$ ), todos los espines tienen un mismo sentido. A partir de  $T=2$  vemos como se influye más sobre los primeros vecinos que en el resto, es decir, hay una cierta correlación. Pasado el punto crítico la distancia de correlación vuelve a disminuir, aunque claramente hay un efecto de correlación muy marcado y queda evidenciado el efecto.

En el modelo de Ising, la correlación puede variar entre -1 y 1, donde un valor de -1 indica una correlación perfectamente antiparalela y un valor de 1 indica una correlación perfectamente paralela (esto sería así sin tener en cuenta la temperatura ya que por la temperatura puede ocurrir que todos estén alineados, lo que no significa que haya correlación). Y valores cercanos a 0 indican una falta de correlación o una correlación débil.

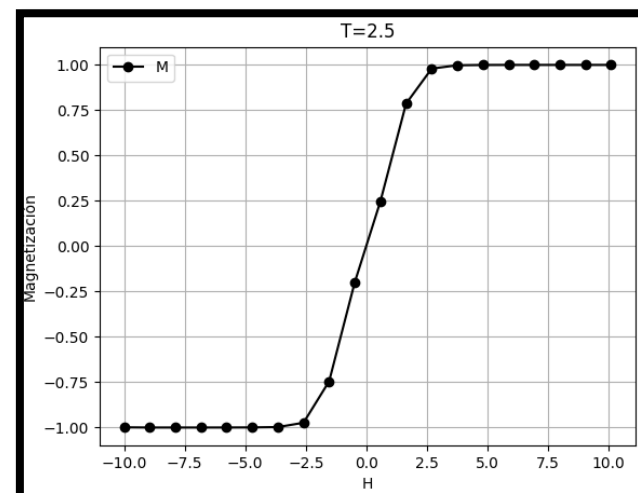
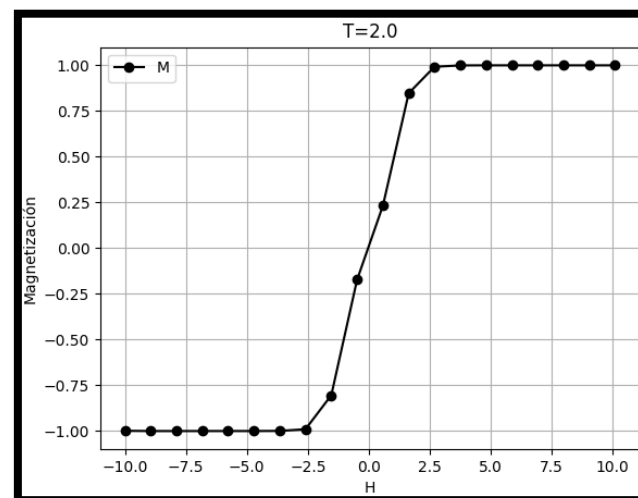
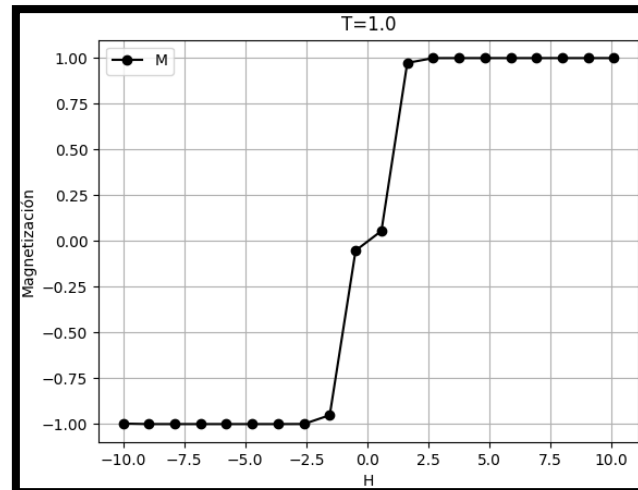
Vemos como, la tendencia general es que, hay un fenómeno de correlación más fuerte sobre los primeros y segundos vecinos que sobre el resto. Por la aleatoriedad de los espines vemos como para  $T=4$  parece que hay más correlación a mayor distancia, pero esto no indica realmente nada puesto que son valores muy próximos a cero.

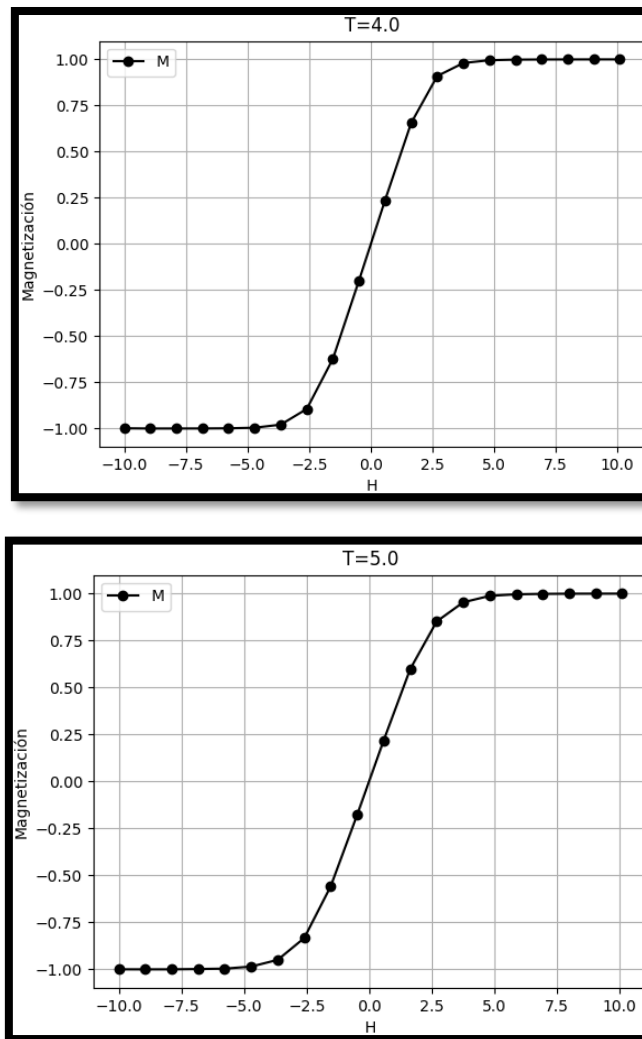
Un resultado importante obtenido aquí es que el método de Montecarlo es preferible frente a la teoría del campo medio para estudiar el modelo de Ising en 2 dimensiones debido a que tiene en cuenta las fluctuaciones térmicas y estas interacciones locales entre los espines de manera más realista. La teoría del campo medio es una aproximación simplificada que asume un promedio global para la interacción entre espines, dejando fuera estas cuestiones estadísticas y sin tener en cuenta las fluctuaciones térmicas y las correlaciones locales. Esta aproximación sería más útil en sistemas de alta dimensionalidad, donde los cálculos exactos son difíciles, pero no tanto para nuestro caso.



#### 4.6. TRANSICIÓN DE FASE DE PRIMER ORDEN

La transición de fase de primer orden es más compleja porque tiene en cuenta la influencia de un campo magnético externo que debemos introducir. Tenemos dos parámetros que van a variar en este caso, la temperatura y el campo magnético externo por lo que hay más variedad. Se utiliza el mismo algoritmo, pero varía la ecuación para la energía de volteo de cada espín en la simulación. Los resultados obtenidos son los siguientes:





Una transición de fase de primer orden se caracteriza por cambios discontinuos en las propiedades termodinámicas del sistema cuando se cruza la temperatura crítica, estos cambios se dan, entre otros casos, en el caso de la magnetización y es el fenómeno que vemos en las gráficas a temperaturas bajas.

A temperaturas más altas, los cambios discontinuos asociados a una transición de fase de primer orden tienden a desvanecerse. Esto se debe a que las fluctuaciones térmicas son más prominentes y pueden superar la energía de activación necesaria para iniciar el cambio de fase abrupto. Es lo que vemos en las gráficas de temperaturas más elevadas, vemos como la sucesión de puntos pasan de la magnetización negativa a la positiva.

## 5. CONCLUSIÓN

A modo de resumen podemos decir que tras el estudio completo del modelo de Ising en 2 dimensiones se han cumplido con creces los objetivos planteados en la práctica, obteniéndose resultados muy similares a los esperados y hemos observado como el modelo de Ising es una herramienta poderosa para comprender las propiedades magnéticas de materiales ferromagnéticos y las transiciones de fase asociadas.