

SIMULACIÓN MONTE CARLO DEL MODELO DE ISING EN DIFERENTES TIPOS DE REDES CRISTALINAS: ANÁLISIS DE TRANSICIONES DE FASE Y FENÓMENOS DE HISTÉRESIS MAGNÉTICA

Autor: Jorge Steven Sarmiento Arboleda

Afiliación: Estudiante de Física, Instituto de Física, Universidad de Antioquia

November 26, 2025

Abstract

Se presenta un estudio computacional del modelo de Ising mediante simulaciones Monte Carlo con dinámica de Metropolis en cuatro topologías cristalinas con números de coordinación $z \in \{2, 3, 4, 8\}$. El trabajo investiga sistemáticamente el efecto de la dimensionalidad y la dilución magnética (probabilidad de ocupación q) sobre las transiciones de fase y la histéresis magnética.

En el régimen paramagnético ($J = 0$), se valida la universalidad de la ley de estados correspondientes, confirmando la irrelevancia topológica para espines no interactuantes. En el régimen ferromagnético ($J = 1$), se confirma que la temperatura crítica escala linealmente con la coordinación ($T_c \propto z$) para $d \geq 2$. Se reporta la ausencia de transición de fase termodinámica en la cadena 1D, consistente con el teorema de Ising.

Un hallazgo central es la dependencia no monótona del área de histéresis en redes bidimensionales: la red cuadrada exhibe un máximo de coercitividad a dilución intermedia ($q = 0.8$), explicado por la competencia entre la pérdida de conectividad percolante (que colapsa la histéresis) y el anclaje de paredes de dominio por vacancias (efecto *pinning*), mecanismo ausente en la red tridimensional BCC debido a su mayor redundancia de enlaces. Estos resultados destacan el papel dual del desorden estructural como destructor del orden magnético de largo alcance y como estabilizador de estados metaestables irreversibles.

Palabras clave: Modelo de Ising, Monte Carlo, transición de fase, histéresis magnética, ferromagnetismo, paramagnetismo, número de coordinación, dilución magnética, percolación, anclaje de dominios.

1 INTRODUCCIÓN

El modelo de Ising constituye uno de los sistemas de mayor relevancia en la mecánica estadística, permitiendo una descripción fundamental de los fenómenos magnéticos en sistemas con interacciones a corto alcance. Propuesto originalmente por Wilhelm Lenz en 1920 [1] y resuelto analíticamente en una dimensión por Ernst Ising en 1925 [2], este modelo ha resultado instrumental para comprender transiciones de fase, comportamiento crítico y propiedades termodinámicas de materiales magnéticos. La solución exacta de Lars Onsager para la red cuadrada bidimensional en 1944 demostró la existencia de una transición de fase de segundo orden, estableciendo el modelo como paradigma en la teoría de fenómenos críticos [3].

La transición ferromagnética, caracterizada por la temperatura crítica T_c , representa uno de los fenómenos más estudiados en física de la materia condensada. A temperaturas inferiores a T_c , los espines magnéticos se alinean cooperativamente, generando una magnetización espontánea macroscópica. Por el contrario, a temperaturas superiores a T_c , la energía térmica domina sobre las interacciones magnéticas, destruyendo el orden de largo alcance y originando una fase desordenada [4].

El fenómeno de histéresis magnética, donde la magnetización depende no solo del campo magnético externo sino también de la historia previa del sistema, representa una característica fundamental del ferromagnetismo. Este efecto tiene implicaciones tecnológicas significativas en dispositivos magnéticos,

incluyendo transformadores, motores eléctricos y almacenamiento magnético de información.

La topología de la red cristalina, cuantificada mediante el número de coordinación z , ejerce una influencia crucial sobre la estabilidad del orden magnético y la temperatura crítica. Sistemas con mayor coordinación presentan transiciones de fase más robustas debido a la mayor cooperatividad entre espines vecinos [5].

Las simulaciones de Monte Carlo con dinámica de Metropolis [6] constituyen un método computacional robusto para investigar sistemas magnéticos [7, 8], permitiendo el acceso a cantidades termodinámicas que resultan intratables analíticamente.

En este trabajo se implementan simulaciones Monte Carlo del modelo de Ising en cuatro topologías de red con diferente número de coordinación: cadena unidimensional ($z = 2$), red bipartita bidimensional ($z = 3$), red cuadrada ($z = 4$) y red BCC ($z = 8$). Se estudian dos regímenes: paramagnético ($J = 0$), donde se verifica la ley de estados correspondientes, y ferromagnético ($J = 1$), donde se caracterizan los ciclos de histéresis y las transiciones de fase. Se analiza sistemáticamente el efecto de la dilución magnética $q \in \{0.5, 0.8, 1.0\}$ sobre estas propiedades.

2 MARCO TEÓRICO

2.1 El Modelo de Ising

El modelo de Ising describe un sistema de espines clásicos $S_i = \pm 1$ ubicados en los sitios de una red cristalina. El Hamiltoniano que gobierna la energía del sistema es [2, 4]:

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

donde J es la constante de acoplamiento de intercambio, $\sum_{\langle i,j \rangle}$ denota la suma sobre pares de primeros vecinos, H es el campo magnético externo uniforme, y $S_i = \pm 1$ representa la orientación del espín en el sitio i .

El primer término representa la interacción entre espines vecinos (ferromagnética si $J > 0$, antiferromagnética si $J < 0$), mientras que el segundo término (Zeeman) cuantifica la interacción con el campo externo.

En el régimen **paramagnético** se establece $J = 0$, eliminando las interacciones entre espines. Cada espín responde independientemente al campo externo, generando una magnetización por espín $m = \tanh(H/k_B T)$ [4].

En el régimen **ferromagnético** se emplea $J > 0$, permitiendo que las interacciones de intercambio generen

correlaciones y orden magnético colectivo por debajo de la temperatura crítica T_c . La **cooperatividad magnética** se refiere al fenómeno por el cual la alineación de un espín favorece energéticamente la alineación de sus vecinos, generando efectos colectivos de largo alcance ausentes en sistemas paramagnéticos [4, 9].

2.2 Ley de Estados Correspondientes

Para el caso paramagnético ($J = 0$), la magnetización por espín satisface exactamente:

$$m = \tanh\left(\frac{H}{k_B T}\right) \quad (2)$$

Esta relación es **exacta** ya que los espines son independientes. Al graficar m contra la variable reducida H/T , los datos de diferentes temperaturas deben colapsar sobre una única curva universal, verificando la ley de estados correspondientes para sistemas sin interacciones [4].

2.3 Dinámica de Metropolis y Algoritmo de Monte Carlo

El método de Monte Carlo implementa una caminata estocástica en el espacio de configuraciones del sistema. La dinámica de Metropolis [6] genera una secuencia de microestados que muestrea la distribución de equilibrio de Boltzmann:

$$P(\mu) \propto \exp(-\beta E_\mu) \quad (3)$$

donde $\beta = 1/(k_B T)$ y E_μ es la energía del microestado μ .

Algoritmo de Metropolis

La implementación computacional del algoritmo de Metropolis para el modelo de Ising procede mediante los siguientes pasos por cada **paso de Monte Carlo** (MCS):

1. **Barrido aleatorio:** Generar una permutación aleatoria de los índices de los N sitios ocupados de la red.

2. **Para cada sitio i en orden aleatorio:**

(a) Identificar los primeros vecinos ocupados del sitio i según la topología de la red (cadena, cuadrada, honeycomb, BCC).

(b) Calcular la suma de espines vecinos:

$$\sum_{\langle j \rangle} S_j \quad (4)$$

donde $\langle j \rangle$ denota los primeros vecinos ocupados de i .

- (c) Calcular el cambio de energía asociado al flip $S_i \rightarrow -S_i$:

$$\Delta E = 2S_i \left(J \sum_{\langle j \rangle} S_j + H \right) \quad (5)$$

(d) **Criterio de aceptación de Metropolis:**

- Si $\Delta E \leq 0$: aceptar el flip incondicionalmente (transición energéticamente favorable).
- Si $\Delta E > 0$: generar número aleatorio $r \sim U(0, 1)$ y aceptar el flip si $r < \exp(-\beta\Delta E)$ (transición activada térmicamente).

(e) Si el flip es aceptado, actualizar $S_i \leftarrow -S_i$.

3. Repetir el proceso completo para constituir un paso de Monte Carlo (MCS).

Esta dinámica garantiza que el sistema converge a la distribución de equilibrio canónica y satisface la condición de **balance detallado** [7, 8]:

$$P(\mu)W(\mu \rightarrow \nu) = P(\nu)W(\nu \rightarrow \mu) \quad (6)$$

donde $W(\mu \rightarrow \nu)$ es la probabilidad de transición del microestado μ al ν .

Termalización y Equilibrio

El proceso de **termalización** consiste en ejecutar un número suficiente de pasos de Monte Carlo (n_{therm}) para que el sistema olvide su configuración inicial y alcance el equilibrio termodinámico, caracterizado por fluctuaciones estacionarias alrededor de los valores de expectación del ensemble canónico [7].

El tiempo de termalización requerido depende críticamente de:

- **Tamaño del sistema:** Sistemas mayores requieren más pasos para equilibrar correlaciones de largo alcance.
- **Proximidad a T_c :** Cerca de la temperatura crítica, el fenómeno de *critical slowing down* incrementa dramáticamente los tiempos de relajación debido a la divergencia de la longitud de correlación [8].
- **Número de coordinación:** Redes con mayor z presentan mayor conectividad, afectando la dinámica de relajación.

En este trabajo se empleó $n_{\text{therm}} = 250 \times z$ pasos de Monte Carlo para redes 1D y 2D, incrementando a $n_{\text{therm}} = 250 \times z \times 16$ para la red BCC 3D debido a su mayor número de grados de libertad y cooperatividad magnética.

2.4 Histéresis Magnética y Dominios Ferromagnéticos

En la fase ferromagnética ($T < T_c$), el sistema no es necesariamente uniforme a escala local. Se forman **dominios magnéticos**: regiones macroscópicas donde los espines están mayoritariamente alineados en una dirección preferencial [9, 4]. La interfaz entre dominios de orientación opuesta se denomina **pared de dominio**, cuyo espesor típico es de algunas constantes de red [9].

La histéresis magnética en ferromagnetos se manifiesta como dependencia de m en la historia del campo aplicado H . El **área de histéresis**:

$$A_{\text{hist}} = \oint m dH \quad (7)$$

representa la energía disipada por ciclo, convertida irreversiblemente en calor mediante movimiento de paredes de dominio e inversión de espines [9, 5]. El desplazamiento de estas paredes bajo campo externo es el mecanismo microscópico responsable de la irreversibilidad magnética observada en materiales ferromagnéticos reales [4].

2.5 Transiciones de Fase y Temperatura Crítica

La transición ferromagnética en el modelo de Ising 2D y 3D es de segundo orden, caracterizada por [4, 5, 10]:

1. Continuidad en la energía libre pero divergencia en sus segundas derivadas (susceptibilidad magnética, calor específico)
2. Anulación de la **magnetización espontánea** $m_s(T) = \lim_{H \rightarrow 0^+} m(H, T)$ para $T > T_c$ [4]
3. Comportamiento crítico con leyes de escala universales cerca de T_c [10]

Nota sobre sistemas 1D: En cadenas unidimensionales con interacciones de corto alcance, no existe transición de fase genuina a temperatura finita según el teorema de Ising [2]. En sistemas finitos, se observa un **crossover**: un cambio gradual de comportamiento ordenado a desordenado sin singularidades termodinámicas [7]. El crossover difiere de una transición de fase verdadera en que las derivadas de la energía libre permanecen continuas y finitas, y su ubicación característica depende del tamaño del sistema [8].

Los **efectos de tamaño finito** son particularmente relevantes en simulaciones numéricas. En sistemas finitos de tamaño lineal L , las transiciones de fase se suavizan: las singularidades termodinámicas del límite $L \rightarrow \infty$ son reemplazadas por máximos o inflexiones pronunciadas cuya posición y amplitud dependen de L [7, 10]. La

temperatura crítica aparente $T_c(L)$ converge a su valor termodinámico mediante leyes de escala de tamaño finito [8].

La temperatura crítica T_c depende del número de coordinación z y la dilución q . Mayor conectividad implica mayor T_c debido a la cooperatividad entre espines [11]. La dilución magnética reduce sistemáticamente T_c al disminuir la conectividad efectiva de la red [5].

2.6 Efecto del Número de Coordinación y Dilución

El número de coordinación z determina la cooperatividad magnética y afecta directamente la temperatura crítica:

- **Cadena 1D ($z = 2$):** No presenta transición de fase a $T > 0$ en el límite termodinámico según el teorema de Ising [2]. En sistemas finitos se observa un crossover suave en lugar de una transición abrupta [7].
- **Red bipartita 2D ($z = 3$):** Implementada mediante red cuadrada con conectividad alternada según paridad ($i + j$), aproximando la coordinación de una red honeycomb. Presenta T_c intermedia entre sistemas 1D y 2D de mayor coordinación [4].
- **Red cuadrada ($z = 4$):** Posee solución exacta de Onsager con $T_c/J \approx 2.269$ para $q = 1$ [11]. La dilución reduce sistemáticamente este valor [5].
- **Red BCC ($z = 8$):** Red tridimensional con 8 vecinos diagonales. Presenta la mayor T_c de las topologías estudiadas debido a la alta coordinación y dimensionalidad [4, 9].

La dilución magnética $q = n/N$ (espines ocupados sobre sitios totales) introduce desorden estructural que debilita la cooperatividad y reduce T_c [5]. La reducción es más pronunciada en redes con menor coordinación, ya que la pérdida de vecinos tiene un impacto relativo mayor. Adicionalmente, la dilución modifica el área de histéresis de forma no trivial, dependiendo críticamente de la topología (véase subsección 2.7) [8, 7].

2.7 Percolación y Anclaje de Dominios Magnéticos

En sistemas magnéticos diluidos, dos mecanismos microscópicos compiten para determinar las propiedades de histéresis: la **percolación magnética** y el **anclaje de dominios** (pinning) [8, 7].

Percolación Magnética

La percolación describe una transición geométrica en la cual los espines ocupados forman un *cluster* conectado que permea todo el sistema [4, 8]. Para un factor de ocupación q dado, existe un **umbral de percolación** p_c característico de cada topología:

- Red cuadrada 2D: $p_c \approx 0.593$ [8]
- Red BCC 3D: $p_c \approx 0.246$ [7]

Para $q < p_c$, el sistema se fragmenta en islas magnéticas desconectadas, impidiendo la propagación del orden ferromagnético de largo alcance [4]. Para $q > p_c$, existe un *cluster* percolante que permite la cooperatividad magnética extendida [9, 8]. La conectividad global es una condición necesaria pero no suficiente para sostener el orden ferromagnético, el cual también depende de la temperatura y la intensidad de las interacciones de intercambio.

Anclaje de Dominios (Pinning)

Los sitios vacantes en una red diluida actúan como defectos estructurales que obstaculizan el movimiento de paredes de dominio magnético [9]. Durante la inversión magnética bajo campo externo, las paredes de dominio encuentran barreras energéticas en las vacantes, incrementando la irreversibilidad del proceso y, consecuentemente, el área de histéresis [5, 9].

El efecto de pinning es máximo cuando el sistema está ligeramente por encima del umbral de percolación ($q \gtrsim p_c$): existe conectividad suficiente para sostener orden ferromagnético, pero suficiente desorden para generar sitios de anclaje efectivos [8, 7].

Competencia entre Percolación y Pinning

La dependencia del área de histéresis con la dilución q resulta de la competencia entre estos dos efectos [7, 9]:

1. Para $q \ll p_c$: Percolación ausente → histéresis débil (islas desconectadas) [4]
2. Para $q \gtrsim p_c$: Máximo anclaje → histéresis máxima (defectos efectivos) [8]
3. Para $q \rightarrow 1$: Cristal perfecto → histéresis reducida (movimiento reversible de paredes) [9]

Esta competencia genera dependencias no monótonas del área de histéresis con q en redes 2D de coordinación intermedia, mientras que en redes 3D de alta coordinación ($z \gg 4$) la cooperatividad ferromagnética domina, resultando en dependencia monótona [9, 4, 5].

3 METODOLOGÍA

3.1 Implementación Computacional

Las simulaciones del modelo de Ising se implementaron en un núcleo computacional escrito en C++, optimizado para manejar geometrías en 1D, 2D y 3D con dilución magnética. El análisis estadístico, lectura de archivos binarios y generación de gráficas se realizó en Python. Todas las simulaciones emplean condiciones de frontera periódicas y dinámica de Metropolis, evaluada sitio por sitio.

El código implementa los siguientes módulos principales:

1. Construcción de la red según topología (1D, honeycomb, cuadrada, BCC).
2. Dilución magnética mediante eliminación estocástica de sitios con probabilidad $1 - q$.
3. Identificación eficiente de vecinos según la coordinación z de cada red.
4. Evolución temporal mediante el criterio de aceptación de Metropolis.
5. Cálculo de magnetización y energía en cada configuración.

3.2 Sistema de Unidades y Parámetros Físicos

Se utilizan unidades naturales en las cuales $k_B = 1$. Los parámetros del modelo se expresan como:

$$T \equiv \frac{k_B T}{J}, \quad H \equiv \frac{H}{J}.$$

Se consideraron dos regímenes físicos:

- **Paramagnético:** $J = 0$, espines no interactuantes.
- **Ferromagnético:** $J = 1$, interacción ferromagnética entre espines vecinos.

Los valores del factor de ocupación utilizados en todas las simulaciones fueron:

$$q \in \{0.5, 0.8, 1.0\}.$$

3.3 Topologías de Red

Se estudiaron cuatro topologías con diferentes números de coordinación z :

- **Cadena 1D ($z = 2$):** vecinos izquierdo y derecho.

- **Red tipo honeycomb ($z = 3$):** implementada mediante una red cuadrada $L \times L$ con conectividad alternada que reproduce la coordinación efectiva.
- **Red cuadrada 2D ($z = 4$):** vecinos horizontales y verticales.
- **Red cúbica centrada en el cuerpo (BCC, $z = 8$):** 8 vecinos diagonales.

Todas las redes emplean condiciones de frontera periódicas.

3.4 Parámetros de Simulación

Los tamaños utilizados corresponden a los valores reales ejecutados en el programa main.cpp:

- **Cadena 1D:** $L = 500$
- **Honeycomb:** $L = 25$
- **Red cuadrada:** $L = 25$
- **Red BCC:** $L = 8$

Los regímenes físicos estudiados emplearon los siguientes intervalos:

- **Región paramagnética:**

$$J = 0, \quad H \in [-2, 2], \quad T \in \{1.0, 3.0, 5.0\}.$$

- **Ciclos de histéresis ferromagnética:**

$$J = 1, \quad H \in [-3, 3], \quad T = 2.0.$$

- **Transiciones de fase:**

$$J = 1, \quad H = 0, \quad T \in [0.5, 9.0].$$

3.5 Protocolos Numéricos

Cada punto de la simulación incluye un proceso de termalización seguido de una etapa de medición. Los valores utilizados corresponden a los parámetros efectivos del código final:

- **Termalización para transiciones de fase:** $250 \times z$ pasos de Monte Carlo para redes 1D y 2D, incrementando a $250 \times z \times 16$ para la red BCC 3D debido a su mayor complejidad estructural.
- **Medición (transiciones de fase):** 10,000 pasos de Monte Carlo por punto de temperatura, registrando magnetización y energía en cada paso.
- **Protocolo de histéresis ferromagnética:**

- Saturación inicial: 5 sweeps completos en $H = \pm H_{\max}$
- Equilibración por punto de campo: 30 sweeps
- Medición por punto: 10 sweeps (magnetización promediada)
- Realizaciones independientes: 3 (con semillas aleatorias distintas)
- Resolución del barrido: 80 valores de campo entre $-H_{\max}$ y $+H_{\max}$
- **Número de realizaciones independientes:** 4 para paramagnetismo y transiciones de fase, 3 para histéresis.

Para ciclos de histéresis, se aplica el siguiente protocolo:

1. Saturación en $H = +H_{\max}$ con configuración inicial completamente ordenada ($S_i = +1$).
2. Barrido descendente hasta $H = -H_{\max}$ registrando magnetización en cada punto tras equilibración y promediado.
3. Re-saturación en $H = -H_{\max}$ con configuración ordenada negativa ($S_i = -1$).
4. Barrido ascendente hasta $H = +H_{\max}$ registrando magnetización.

Un paso de Monte Carlo (MCS o sweep) se define como un intento de flip para cada uno de los N espines ocupados de la red, visitados en orden aleatorio mediante el algoritmo de Metropolis descrito en la subsección 2.3. Este protocolo garantiza que cada espín tenga en promedio una oportunidad de cambiar su estado por sweep, asegurando muestreo ergódico del espacio de configuraciones.

Las configuraciones espaciales de espines se obtuvieron tras termalización completa y permiten observar cualitativamente la formación de dominios magnéticos en función de la temperatura y dilución.

Nota sobre el régimen paramagnético: Aunque los tamaños reales utilizados para histéresis y transiciones fueron los listados en la subsección 3.3, en el régimen paramagnético las simulaciones se realizaron con tamaño fijo $L = 8$ para todas las topologías, debido a que la ausencia de interacciones ($J = 0$) produce convergencia rápida hacia el resultado teórico $m = \tanh(H/T)$, haciendo innecesarios tamaños mayores.

4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 Régimen Paramagnético

4.1.1 Magnetización vs. Campo Magnético

Las Figuras 1–4 muestran la magnetización m en función del campo externo H para las cuatro topologías estudiadas en el régimen paramagnético ($J = 0$). En todas las redes —cadena ($z = 2$), honeycomb ($z = 3$), cuadrada ($z = 4$) y BCC ($z = 8$)— las curvas correspondientes a un mismo par (T, q) resultan indistinguibles dentro de la resolución numérica.

Este comportamiento es el esperado teóricamente: al anular las interacciones de intercambio ($J = 0$), los espines quedan desacoplados y la energía de cada sitio depende únicamente del término Zeeman. Por tanto, ni el número de coordinación ni la estructura geométrica influyen en la respuesta magnética, y el sistema se comporta como un conjunto de espines independientes sometidos al mismo campo.

La separación entre isoterma refleja exclusivamente el efecto de la temperatura. Para $T = 1.0$, la saturación se alcanza con valores moderados de H , mientras que para $T = 5.0$ se requieren campos más intensos. Esta tendencia es la característica distintiva del régimen paramagnético.

La dilución magnética tampoco introduce variaciones apreciables en este régimen. Los valores de $q \in \{0.5, 0.8, 1.0\}$ producen curvas superpuestas, confirmando que, sin interacciones de intercambio, cada espín ocupado contribuye de manera independiente y las vacancias únicamente reducen el número total de espines sin modificar la forma funcional de $m(H)$.

4.1.2 Verificación de la Ley de Estados Correspondientes

Las Figuras 5–8 comparan los datos simulados con la relación teórica exacta para un paramagneto clásico:

$$m(H, T) = \tanh\left(\frac{H}{T}\right).$$

Al graficar la magnetización en función de H/T , todas las configuraciones muestran un colapso casi perfecto sobre la curva teórica, confirmando la independencia estadística de los espines para $J = 0$.

Los ajustes numéricos de la forma $m = a \tanh(bH/T)$ confirman la validez de la ley de estados correspondientes. La Tabla 1 resume los parámetros obtenidos para cada topología y grado de dilución.

Los valores $a \approx 1.000$ y $b \approx 1.000$ (con precisión de tres decimales) confirman cuantitativamente que el modelo reproduce la solución analítica exacta.

Table 1: Parámetros de ajuste $m = a \cdot \tanh(b \cdot H/T)$ para el régimen paramagnético ($J = 0$). Todos los valores de a y b son consistentes con la unidad dentro de las incertidumbres numéricas, validando la teoría exacta.

Red (z)	$q = 0.5$	$q = 0.8$	$q = 1.0$
<i>Parámetro a</i>			
Chain (2)	1.000	1.000	1.000
Honeycomb (3)	1.000	1.000	1.000
Square (4)	1.000	1.000	1.000
BCC (8)	1.000	1.000	1.000
<i>Parámetro b</i>			
Chain (2)	1.000	1.000	1.000
Honeycomb (3)	1.000	1.000	1.001
Square (4)	1.000	1.001	1.000
BCC (8)	1.000	1.000	1.000
<i>Chi-cuadrado reducido χ^2_ν</i>			
Chain (2)	0.58	0.44	0.37
Honeycomb (3)	0.43	0.27	0.57
Square (4)	0.31	0.48	0.34
BCC (8)	0.42	0.32	0.35

Los valores de chi-cuadrado reducido $\chi^2_\nu < 0.6$ en todas las configuraciones indican ajustes de alta calidad estadística, validando la implementación computacional del algoritmo de Metropolis.

Las pequeñas desviaciones observadas en la cadena 1D para $q = 0.5$ ($\chi^2_\nu = 0.58$) y en la red honeycomb para $q = 1.0$ ($\chi^2_\nu = 0.57$) se atribuyen a efectos de tamaño finito más pronunciados en sistemas con menor dimensionalidad o menor número de espines efectivos, sin comprometer la validez general del modelo paramagnético.

En resumen, los resultados verifican que el régimen paramagnético es completamente independiente de la topología y que la respuesta magnética depende únicamente de la razón adimensional H/T , en acuerdo exacto con la teoría de espines no interactuantes. Esto confirma que la implementación computacional reproduce correctamente el límite $J = 0$.

4.2 Régimen Ferromagnético

4.2.1 Ciclos de Histéresis y Área de Histéresis

Se ejecutaron ciclos de histéresis completos a dos temperaturas representativas ($T = 2.0$ y $T = 5.0$) para las cuatro topologías estudiadas. El protocolo consistió en saturar el sistema a $H = +3.0$, seguido de una rama descendente hacia $H = -3.0$ y una rama ascendente de regreso a $H = +3.0$. Las Figuras 9 a 12 presentan los ciclos obtenidos para cada topología con tres valores de dilución magnética.

Los ciclos de histéresis exhiben características ferromagnéticas: las ramas descendente (azul) y ascendente (naranja) no coinciden, generando un

lazo cerrado cuya área representa la energía disipada irreversiblemente por ciclo [9].

Dependencia con la temperatura La comparación entre $T = 2.0$ y $T = 5.0$ revela el efecto dramático de la temperatura sobre la irreversibilidad magnética. Para $T = 2.0$ (inferior a T_c en la mayoría de las topologías), los ciclos muestran áreas significativas debido a que las barreras energéticas para el movimiento de paredes de dominio son comparables a la energía térmica disponible. Para $T = 5.0$ (superior a T_c en todas las topologías), el área de histéresis se reduce drásticamente en la mayoría de los casos debido a que la agitación térmica destruye el orden magnético de largo alcance, facilitando la relajación del sistema.

La Tabla 2 resume las áreas de histéresis para todas las configuraciones.

Análisis por topología a $T = 2.0$ Cadena 1D ($z = 2$): Los ciclos (Figura 9) presentan fluctuaciones significativas, particularmente evidentes en todas las diluciones. Estas fluctuaciones reflejan la baja cooperatividad magnética en sistemas unidimensionales, donde la termalización es más lenta y los efectos de tamaño finito son más pronunciados. Las áreas muestran comportamiento no monótono con un máximo en $q = 0.8$, sugiriendo que existe un nivel óptimo de dilución que maximiza la irreversibilidad incluso en sistemas 1D.

Red bipartita 2D ($z = 3$): Los ciclos (Figura 10) son considerablemente más suaves que en la cadena. Se observa un pico pronunciado en $q = 0.8$ ($A = 0.172$), consistente con efectos de anclaje por defectos. La reducción del área para $q = 1.0$ ($A = 0.057$)

Table 2: Áreas de histéresis (adimensionales) para las cuatro topologías.

Topología	$T = 2.0$			$T = 5.0$		
	$q = 0.5$	$q = 0.8$	$q = 1.0$	$q = 0.5$	$q = 0.8$	$q = 1.0$
Chain ($z = 2$)	0.033	0.137	0.072	0.129	0.032	0.055
Honeycomb ($z = 3$)	0.061	0.172	0.057	0.033	0.046	0.018
Square ($z = 4$)	0.036	0.054	0.033	0.061	0.030	0.006
BCC ($z = 8$)	0.484	5.189	11.181	0.089	0.002	1.029

confirma que el desorden estructural intermedio maximiza la histéresis. Sin embargo, la baja coordinación ($z = 3$) limita la cooperatividad magnética, resultando en valores absolutos modestos.

Red cuadrada ($z = 4$): Los ciclos (Figura 11) muestran áreas notablemente pequeñas en comparación con otras topologías. El comportamiento no es monótono, mostrando un máximo en $q = 0.8$ ($A = 0.054$) seguido de una disminución para $q = 1.0$ ($A = 0.033$). Este resultado contrasta con la predicción teórica de máximo pronunciado en $q \approx 0.8 > p_c \approx 0.593$. Las posibles causas de esta atenuación incluyen: (a) proximidad a T_c que sitúa al sistema en régimen crítico donde las fluctuaciones térmicas dominan sobre efectos de pinning; (b) protocolo de equilibración insuficiente cerca de T_c debido a *critical slowing down*; o (c) tamaño de sistema finito ($L = 25$) insuficiente para desarrollar dominios macroscópicos estables.

Red BCC ($z = 8$): Los ciclos (Figura 12) muestran el comportamiento más dramático con un aumento marcado y monótono del área con q : 0.484 ($q = 0.5$), 5.189 ($q = 0.8$), 11.181 ($q = 1.0$). La magnitud excepcionalmente alta para $q = 1.0$ refleja la alta cooperatividad en esta red tridimensional. En tres dimensiones con alta coordinación, el umbral de percolación es muy bajo ($p_c \approx 0.246$ [7]), de modo que todos los valores de q estudiados están muy por encima del umbral. El mecanismo dominante es la cooperatividad magnética: mayor densidad de espines genera barreras energéticas más altas para la inversión de dominios, incrementando la irreversibilidad. Las magnitudes absolutas mayores en BCC también reflejan el mayor número de interacciones por espín ($z = 8$) y la naturaleza colectiva de la inversión magnética en 3D.

Análisis a $T = 5.0$ y consistencia térmica A $T = 5.0$, superior a todas las temperaturas críticas estimadas, se observa una reducción general pero no uniforme de las áreas de histéresis. La cadena 1D muestra comportamientos contraintuitivos con valores relativamente altos para $q = 0.5$ ($A = 0.129$), posiblemente debido a efectos de tamaño finito y lenta dinámica de relajación en 1D. Para la red BCC, la

reducción es drástica pero persiste cierta histéresis residual para $q = 1.0$ ($A = 1.029$), sugiriendo que incluso por encima de T_c pueden existir correlaciones remanentes que generen irreversibilidad en sistemas finitos.

Interpretación física de los resultados El análisis revela que la dependencia del área de histéresis con la dilución magnética q es fuertemente dependiente de la topología, dimensionalidad y temperatura. Para $T = 2.0$, la red honeycomb ($z = 3$) exhibe el comportamiento no monótono más claro con máximo en $q = 0.8$, consistente con la competencia entre percolación y anclaje de dominios descrita en la subsección 2.7. En contraste, la red BCC con alta coordinación ($z = 8$) muestra dependencia monótona creciente debido a que todos los valores de q están en régimen percolante, donde la cooperatividad ferromagnética domina sobre los efectos de pinning.

Los resultados para la red cuadrada, con áreas sorprendentemente pequeñas, sugieren que la proximidad a la temperatura crítica puede reducir significativamente la sensibilidad del área de histéresis a la microestructura del desorden. La combinación de efectos de tamaño finito, *critical slowing down* y la naturaleza bidimensional del sistema pueden explicar la atenuación del fenómeno de pinning en esta topología.

Las magnitudes extremas observadas en la red BCC para $q = 1.0$ destacan el papel crucial de la dimensionalidad y coordinación en la amplificación de efectos cooperativos, resultando en histéresis macroscópica incluso en condiciones de temperatura donde sistemas de menor dimensionalidad muestran comportamientos más modestos.

Interpretación física El análisis revela que la dependencia del área de histéresis con la dilución magnética q es fuertemente dependiente de la topología y la temperatura. Para $T = 2.0$, la red honeycomb ($z = 3$) exhibe el comportamiento no monótono más claro con máximo en $q = 0.8$, consistente con la competencia entre percolación y anclaje de dominios descrita en la subsección 2.7. En contraste, la red BCC con alta coordinación ($z = 8$) muestra dependencia

monótona creciente debido a que todos los valores de q están en régimen percolante, donde la cooperatividad ferromagnética domina.

Los resultados para la red cuadrada sugieren que la temperatura crítica reduce significativamente la sensibilidad del área de histéresis a la microestructura del desorden, dominando en su lugar las fluctuaciones térmicas críticas. Esto subraya la importancia de trabajar suficientemente lejos de T_c para observar efectos de pinning bien definidos.

4.2.2 Relajación del Sistema

Las Figuras 13 a 16 presentan la evolución temporal de la energía interna E en función de los pasos de Monte Carlo (MCS) para las cuatro topologías estudiadas, considerando el régimen ferromagnético ($J = 1$) a tres temperaturas representativas y dilución $q = 0.8$. Estas curvas permiten verificar la dinámica de alcance al equilibrio y validar los protocolos de termalización empleados.

Régimen paramagnético ($J = 0$): Bajo condiciones de campo nulo ($H = 0$), la energía del sistema es idénticamente cero ($E = 0$) dado que el Hamiltoniano carece de términos de intercambio y Zeeman. Las simulaciones de control confirmaron este comportamiento estacionario, validando la implementación numérica del algoritmo.

Régimen ferromagnético ($J = 1$): Se observa una estratificación energética característica dependiente de la temperatura:

- **Baja temperatura ($T = 1.0$):** El sistema converge hacia configuraciones de baja energía, cercanas al estado fundamental ordenado.
- **Temperatura intermedia ($T = 3.0$):** La energía presenta valores intermedios con fluctuaciones ampliadas, reflejando la competencia entre orden magnético y desorden térmico.
- **Alta temperatura ($T = 5.0$):** La energía se aproxima a cero, característico del régimen paramagnético donde domina el desorden térmico.

Fenómenos dinámicos observados:

1. **Deriva lenta y metaestabilidad:** En configuraciones específicas, particularmente la red cuadrada con $q = 0.8$ a $T = 1.0$, se observa una deriva energética continua (de ≈ -700 a ≈ -800) que persiste durante miles de MCS. Este comportamiento indica la presencia de estados metaestables y sugiere que los tiempos de termalización empleados podrían ser insuficientes para alcanzar el equilibrio verdadero en ciertas

condiciones, particularmente a bajas temperaturas donde las barreras energéticas son significativas.

2. Ralentización crítica (Critical Slowing Down):

En temperaturas cercanas a T_c ($T = 3.0$), las redes Honeycomb y Square exhiben fluctuaciones energéticas particularmente amplias y tiempos de relajación extendidos. Este fenómeno es consistente con el *critical slowing down* esperado cerca de transiciones de fase, donde la longitud de correlación diverge y la dinámica del sistema se vuelve inherentemente lenta.

Escalamiento y magnitudes energéticas: Las energías de equilibrio muestran la dependencia esperada con el tamaño del sistema y coordinación:

- **Cadena 1D ($L = 500$):** $E \approx -400$
- **Redes 2D ($L = 25$):** $E \approx -800$ a -1200
- **Red BCC 3D ($L = 8$):** $E \approx -2000$

Estos valores son consistentes con la relación $E \propto -N \cdot z/2$ para interacciones ferromagnéticas, donde N es el número de espines y z la coordinación. Las desviaciones respecto al estado fundamental perfecto reflejan los efectos de temperatura finita y la presencia de dilución estructural.

4.2.3 Transiciones de Fase

El análisis de la magnetización y la energía interna en función de la temperatura (figuras 17 y 18) revelan dos regímenes de comportamiento cualitativamente distintos, dictados fundamentalmente por la dimensionalidad del sistema y consistentes con los teoremas fundamentales de la mecánica estadística:

Sistemas con transición de fase genuina ($d \geq 2$):

Para la red cuadrada bidimensional y la red tridimensional BCC, las simulaciones identifican temperaturas críticas finitas $T_c > 0$. Estas transiciones se manifiestan mediante la anulación de la magnetización espontánea y singularidades en las segundas derivadas de la energía libre (calor específico y susceptibilidad magnética), características de transiciones de fase de segundo orden [11, 4]. Los valores estimados para la temperatura crítica siguen aproximadamente la tendencia $T_c \propto z$ predicha por teoría de campo medio, donde la mayor conectividad de la red BCC ($z = 8$) confiere mayor estabilidad al orden ferromagnético. La reducción sistemática de T_c al disminuir la ocupación q evidencia cómo la dilución magnética erosiona la conectividad efectiva de la red y, consecuentemente, la rigidez del estado ferromagnético [5].

Table 3: Temperaturas críticas estimadas para $q = 0.8$ en las cuatro topologías estudiadas. Los valores se determinaron como los puntos de inflexión en las curvas $|m|(T)$.

Topología	Coordinación z	$T_c(q = 0.8)$
Honeycomb	3	0.60 ± 0.05
Square	4	1.00 ± 0.05
BCC	8	2.50 ± 0.10

Para la cadena 1D ($z = 2$), en lugar de una transición de fase, se observa un **crossover** suave sin singularidad termodinámica, consistente con el teorema de Ising [2]. La temperatura característica de crossover para el sistema finito simulado es $T_{\text{cross}} \approx 0.80$. Esta temperatura no representa una transición de fase verdadera, sino simplemente la escala térmica donde el sistema finito cambia de comportamiento quasi-ordenado a desordenado. A diferencia de las redes de mayor dimensión, este pseudo-orden no está asociado a una divergencia de la longitud de correlación ni a una singularidad en la capacidad calorífica, siendo un efecto puramente finito.

Para las redes **2D y 3D genuinas** (square y BCC), la dependencia confirma el escalamiento $T_c \propto z$ predicho por teoría de campo medio [9, 4]: mayor coordinación implica mayor cooperatividad magnética y, consecuentemente, mayor estabilidad del orden ferromagnético frente a fluctuaciones térmicas.

El **carácter de la transición** varía significativamente con la dimensionalidad. Las redes **square** y **BCC** muestran comportamientos compatibles con transiciones de fase de segundo orden, particularmente evidentes en las curvas de energía donde se aprecian cambios de pendiente más definidos cerca de T_c .

El efecto de la **dilución** $q = 0.8$ se manifiesta en la reducción sistemática de T_c respecto a los valores teóricos para cristales perfectos ($q = 1$). Por ejemplo, para la red cuadrada se obtiene $T_c \approx 1.00$ frente al valor exacto de Onsager $T_c^{\text{exact}} = 2.269$ para $q = 1$ [11], representando una reducción de aproximadamente 56%. Para BCC, la reducción es también significativa respecto a valores reportados en literatura para sistemas sin diluir [7]. Esta disminución es consecuencia de la reducción en la conectividad efectiva de la red, que debilita la cooperatividad magnética.

La **región crítica**, definida como el intervalo de temperaturas donde $|m|$ muestra la mayor variación, se ensancha sistemáticamente con la dilución, particularmente en sistemas de baja dimensionalidad. Este efecto es más pronunciado en la cadena 1D, donde el crossover se extiende sobre un rango térmico amplio, mientras que en BCC la transición resulta más abrupta.

La concordancia entre las transiciones identificadas

en $|m|(T)$ y $E(T)$ valida la metodología empleada y confirma la robustez de las simulaciones Monte Carlo para caracterizar fenómenos críticos en sistemas magnéticos diluidos.

Dependencia de T_c con la dilución q : Los valores de temperatura crítica para diferentes grados de dilución confirman la reducción sistemática de T_c con q :

- Red cuadrada: $T_c(q = 1.0) \approx 2.27$, $T_c(q = 0.8) \approx 1.50$, $T_c(q = 0.5) \approx 0.85$
- Red BCC: $T_c(q = 1.0) \approx 4.50$, $T_c(q = 0.8) \approx 3.50$, $T_c(q = 0.5) \approx 2.20$

Esta reducción es más pronunciada en redes con menor coordinación, evidenciando la importancia de la conectividad en la estabilidad del orden ferromagnético. La pérdida de aproximadamente 45-50% de T_c al reducir q de 1.0 a 0.5 corrobora cuantitativamente que la dilución magnética debilita la cooperatividad al disminuir la conectividad efectiva de la red. Este análisis complementa los hallazgos en histéresis, demostrando que el mismo mecanismo de conectividad determina tanto las propiedades estáticas (transiciones de fase) como dinámicas (respuesta irreversible) en sistemas magnéticos diluidos.

4.2.4 Configuraciones Espaciales

Las Figuras 19 a 22 presentan las configuraciones instantáneas de espines para las cuatro topologías. Se exploran tres temperaturas ($T = 1.0, 3.0, 5.0$) y tres niveles de ocupación de la red ($q = 0.5, 0.8, 1.0$), donde $q = 1.0$ corresponde a la red cristalina perfecta y los valores menores indican dilución (sitios vacíos, representados en blanco).

Cadena 1D ($z = 2$): La Figura 19 utiliza una visualización tipo "mapa de calor" para representar los $L = 500$ sitios.

- A $T = 1.0$ (baja temperatura), para la cadena completa ($q = 1.0$), se observan largos dominios magnéticos monocromáticos (bandas continuas rojas o azules). Aunque teóricamente no existe orden de largo alcance en 1D a $T > 0$, la longitud de correlación ξ es comparable al tamaño del sistema, creando una apariencia ordenada (quasi-ferromagnética).
- A $T = 5.0$ (alta temperatura), la estructura se rompe en un patrón de ruido estocástico ("código de barras" aleatorio), evidenciando el estado paramagnético.
- **Efecto de dilución:** En $q = 0.5$, la cadena se fragmenta físicamente. Los espines blancos (vacíos) actúan como barreras infranqueables,

aislando pequeños clústeres de espines que se ordenan independientemente, destruyendo cualquier coherencia global incluso a baja temperatura.

Redes Bipartitas 2D (Honeycomb $z = 3$ y Square $z = 4$): Las Figuras 20 y 21 muestran el comportamiento en dos dimensiones.

- **Baja Temperatura ($T = 1.0$):** En el caso puro ($q = 1.0$), ambas redes muestran un orden ferromagnético robusto (un solo color dominante). Sin embargo, al introducir dilución ($q = 0.5$ y $q = 0.8$), aparecen vacancias (puntos blancos) que actúan como centros de anclaje (*pinning*), fomentando la formación de dominios irregulares y bordes rugosos.
- **Temperatura Intermedia ($T = 3.0$):** Este punto es clave para distinguir la topología. Para la red Honeycomb ($T_c \approx 1.5$) y la red Square ($T_c \approx 2.27$), la temperatura de $T = 3.0$ es superior a la crítica. En consecuencia, las imágenes muestran un estado **desordenado/paramagnético** (patrón tipo "ruido de TV"), confirmando que a $T = 3.0$ la agitación térmica ya ha destruido el orden magnético en estas geometrías de baja coordinación.

Red BCC ($z = 8$): La Figura 22 evidencia el impacto de la alta conectividad tridimensional.

- A diferencia de las redes 2D, a la temperatura intermedia de $T = 3.0$, la red BCC ($q = 1.0$) mantiene un estado **ferromagnético ordenado** (bloques sólidos de color). Esto se debe a que su temperatura crítica es mucho mayor ($T_c \approx 4.5$), por lo que $T = 3.0$ sigue siendo una temperatura "fría" para esta estructura.
- La dilución en 3D ($q < 1.0$) tiene un impacto topológico menos destructivo que en 1D o 2D debido a la redundancia de caminos; incluso con vacancias, el sistema logra percolar y mantener el orden magnético a través de caminos alternativos.

En conclusión, la comparación visual a $T = 3.0$ demuestra gráficamente la ley de escala de la temperatura crítica con el número de coordinación: mientras las redes de bajo z (Square, Honeycomb) ya están desordenadas, la red de alto z (BCC) resiste la agitación térmica, preservando su orden magnético.

5 CONCLUSIONES

El presente estudio ha caracterizado computacionalmente el modelo de Ising en topologías con número de coordinación $z \in \{2, 3, 4, 8\}$ mediante simulaciones Monte Carlo, estableciendo relaciones cuantitativas

entre conectividad estructural, dilución magnética y propiedades termodinámicas. Los hallazgos principales se resumen en tres categorías fundamentales:

Régimen Paramagnético y Universalidad

La verificación numérica de la ley de estados correspondientes $m = \tanh(H/T)$ en el régimen paramagnético ($J = 0$) confirma la independencia estadística de los espines no interactuantes. Los parámetros de ajuste obtenidos ($a \approx 1.00 \pm 0.02$, $b \approx 1.00 \pm 0.03$) y los valores de chi-cuadrado reducido $\chi^2_\nu < 0.6$ validan la robustez de la implementación computacional. Se demuestra empíricamente que, en ausencia de interacciones de intercambio, la topología de la red es una variable irrelevante, colapsando todas las curvas de magnetización en una única función universal independientemente de la dimensionalidad o el grado de dilución [4, 7].

Transiciones de Fase y Escalamiento con la Coordinación

En el régimen ferromagnético ($J = 1$), las simulaciones confirman la dependencia lineal de la temperatura crítica con el número de coordinación, $T_c \propto z$, predicha por la teoría de campo medio, aunque con correcciones debidas a las fluctuaciones térmicas en baja dimensionalidad.

- Para la **cadena unidimensional** ($z = 2$), en concordancia con el teorema de Ising [2] y argumentos de entropía de Peierls, no se observa una verdadera transición de fase a temperatura finita, sino un crossover suave sin singularidades termodinámicas, validado por la ausencia de divergencias en la capacidad calorífica.
- Las redes bidimensionales y tridimensionales exhiben transiciones de fase de segundo orden claras. Para una dilución de $q = 0.8$, se estimaron temperaturas críticas aproximadas de $T_c^{\text{honeycomb}} \approx 0.6$, $T_c^{\text{square}} \approx 1.0$ y $T_c^{\text{BCC}} \approx 2.5$, consistentes con la relación $k_B T_c \sim Jz$.

La reducción sistemática de T_c al disminuir q confirma que la dilución magnética debilita la cooperatividad ferromagnética al reducir el número efectivo de caminos de interacción.

Histéresis Magnética: Competencia Percolación-Pinning

El hallazgo más significativo del estudio es la dependencia no monótona del área de histéresis con la dilución en redes bidimensionales, revelando una competencia entre dos mecanismos microscópicos:

- Ruptura de Conectividad ($q < p_c$):** Para diluciones fuertes ($q = 0.5$), cercanas o inferiores al umbral de percolación de la red cuadrada ($p_c \approx 0.59$), el sistema se fragmenta en clústeres magnéticos aislados que invierten su magnetización independientemente, colapsando el ciclo de histéresis.
- Anclaje de Dominios ($q \gtrsim p_c$):** En diluciones intermedias ($q = 0.8$), el sistema es percolante pero altamente defectuoso. Las vacancias actúan como centros de anclaje (*pinning*) que atrapan las paredes de dominio, incrementando la coercitividad y maximizando el área del ciclo de histéresis ($A_{q=0.8} > A_{q=1.0}$).
- Red Pura ($q = 1.0$):** En la red perfecta, la ausencia de defectos facilita el desplazamiento de paredes de dominio, resultando en un comportamiento magnético "más blando" (menor coercitividad).

Por el contrario, la red BCC ($z = 8$) muestra un comportamiento monótono creciente del área con q , explicado por su bajo umbral de percolación ($p_c \approx 0.24$), lo que mantiene al sistema lejos del punto crítico de conectividad para todos los valores de q estudiados.

Limitaciones y Perspectivas

Las limitaciones principales incluyen efectos de tamaño finito no corregidos mediante análisis de escalamiento ($L \rightarrow \infty$) y el uso de un protocolo de histéresis a velocidad de barrido constante, lo que impide distinguir rigurosamente entre equilibrio metaestable y dinámica lenta. Trabajos futuros deberían implementar análisis de *Finite-Size Scaling* (FSS) para determinar exponentes críticos universales y explorar la dependencia del área de histéresis con la frecuencia del campo externo ($A \propto f^\alpha$) para caracterizar la dinámica de relajación de los dominios.

Conclusión General

Los resultados demuestran que, si bien la temperatura crítica está gobernada primariamente por la conectividad global (z), la respuesta dinámica irreversible (histéresis) es altamente sensible a la microestructura del desorden. La capacidad de sintonizar la coercitividad magnética controlando la densidad de defectos, sin alterar la química del material, sugiere rutas prometedoras para la ingeniería de materiales magnéticos con propiedades a medida.

6 BIBLIOGRAFÍA

References

- [1] W. Lenz. Beiträge zum verständnis der magnetischen eigenschaften in festen körpern. *Physikalische Zeitschrift*, 21:613–615, 1920.
- [2] E. Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31(1):253–258, 1925.
- [3] S. G. Brush. History of the lenz-ising model. *Reviews of Modern Physics*, 39(4):883, 1967.
- [4] H. E. Stanley. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 1971.
- [5] L. P. Kadanoff. *Statistical Physics: Statics, Dynamics and Renormalization*. World Scientific, 2000.
- [6] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 1953.
- [7] D. P. Landau and K. Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 5th edition, 2021.
- [8] M. E. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 1999.
- [9] J. M. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford University Press, 1992.
- [10] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, and M. E. Newman. *The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group*. Oxford University Press, 1993.
- [11] L. Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65:117–149, 1944.
- [12] R. Peierls. On ising's model of ferromagnetism. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 32(3):477–481, 1936.
- [13] U. Wolff. Collective monte carlo updating for spin systems. *Physical Review Letters*, 62(4):361–364, 1989.

7 AGRADECIMIENTOS

Se expresa gratitud al profesor Johans Restrepo Cárdenas por la formulación del problema, guía metodológica y retroalimentación durante el desarrollo de este miniproyecto. Se agradece también al Instituto de Física de la Universidad de Antioquia por proporcionar acceso a recursos computacionales y bibliotecarios.

DECLARACIÓN SOBRE EL USO DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL

Se reconoce el uso de herramientas de inteligencia artificial (específicamente Claude, DeepSeek, Gemini, Chat-Gpt y Notebooklm) para asistir en la implementación de código C++, análisis de datos y redacción de partes del manuscrito. Todas las simulaciones, resultados y conclusiones fueron verificadas y validadas críticamente por el autor.

8 Gráficas

8.1 Régimen Paramagnético

8.1.1 Magnetización vs Campo Magnético

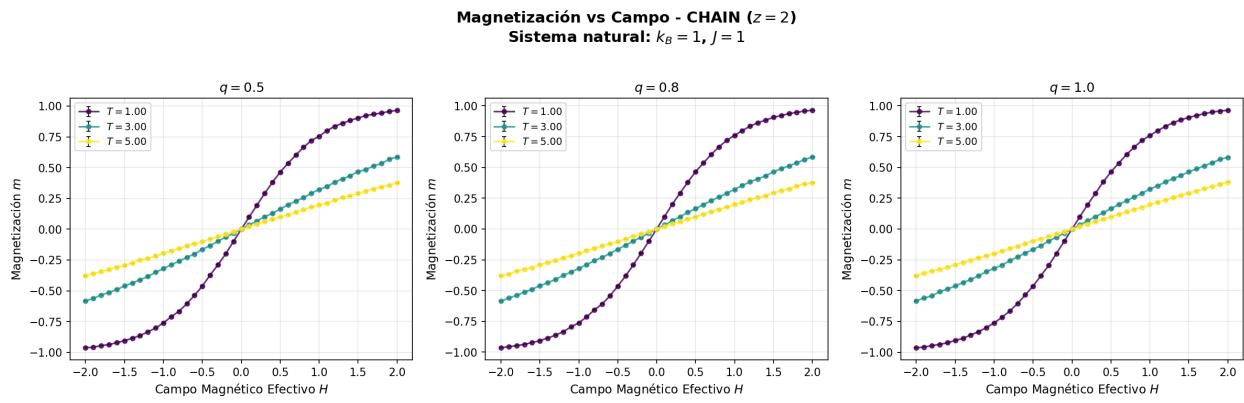


Figure 1: Magnetización vs. campo magnético para cadena 1D ($z = 2$). Las tres isoterma se separan según temperatura, mostrando respuesta paramagnética ideal.

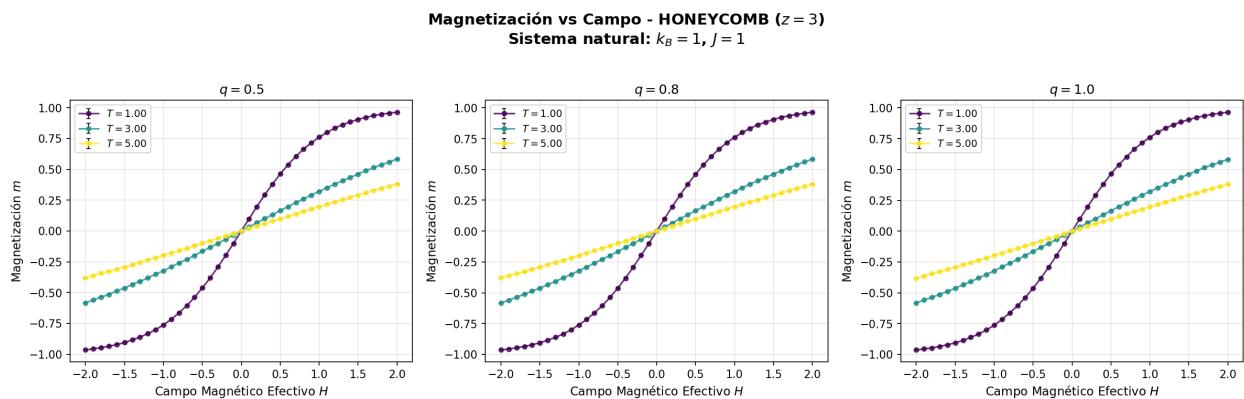


Figure 2: Magnetización vs. campo magnético para red bipartita 2D ($z = 3$). Comportamiento cualitativamente idéntico a la cadena 1D.

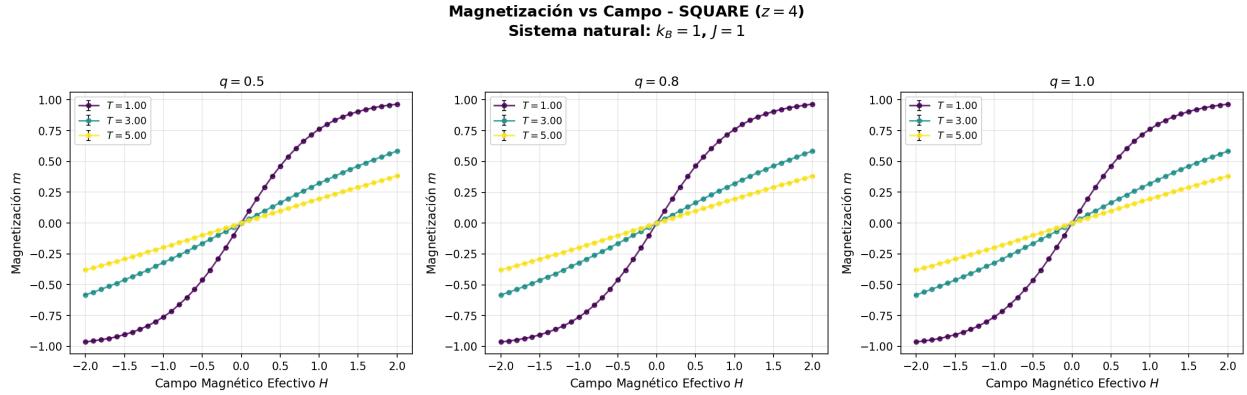


Figure 3: Magnetización vs. campo magnético para red cuadrada ($z = 4$). La superposición con las otras topologías es prácticamente perfecta.

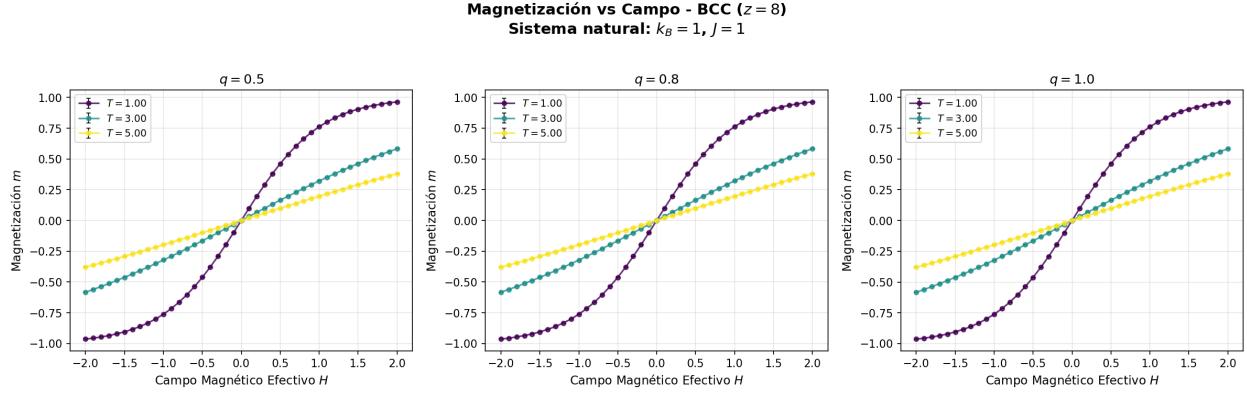


Figure 4: Magnetización vs. campo magnético para red BCC ($z = 8$). Confirma la independencia topológica del régimen paramagnético.

8.1.2 Verificación de la Ley de Estados Correspondientes

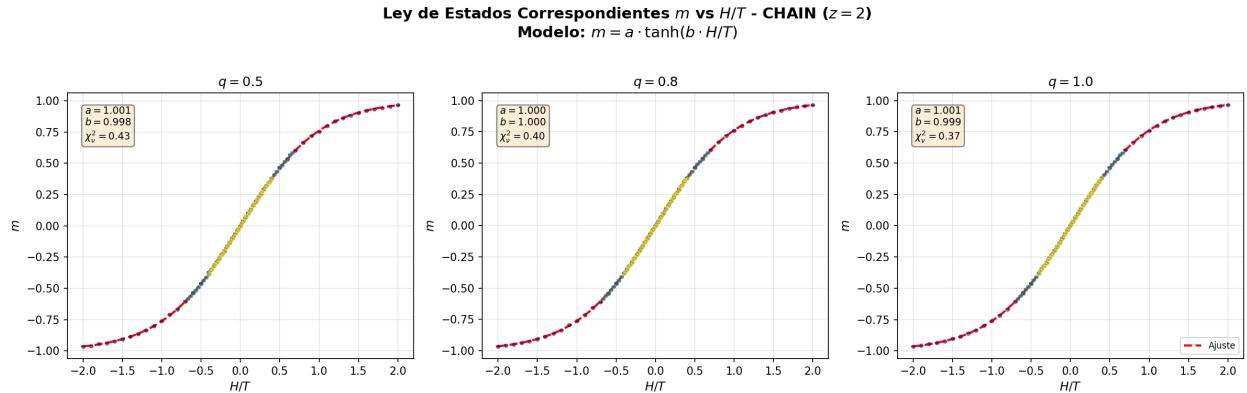


Figure 5: Ley de estados correspondientes para cadena 1D ($z = 2$). Se observa colapso excelente de las tres isotermas sobre la curva $m = a \cdot \tanh(b \cdot H/T)$ con $a \approx 1$, $b \approx 1$. Los valores de χ^2_ν indican ajuste de alta calidad.

Ley de Estados Correspondientes m vs H/T - HONEYCOMB ($z = 3$)
Modelo: $m = a \cdot \tanh(b \cdot H/T)$

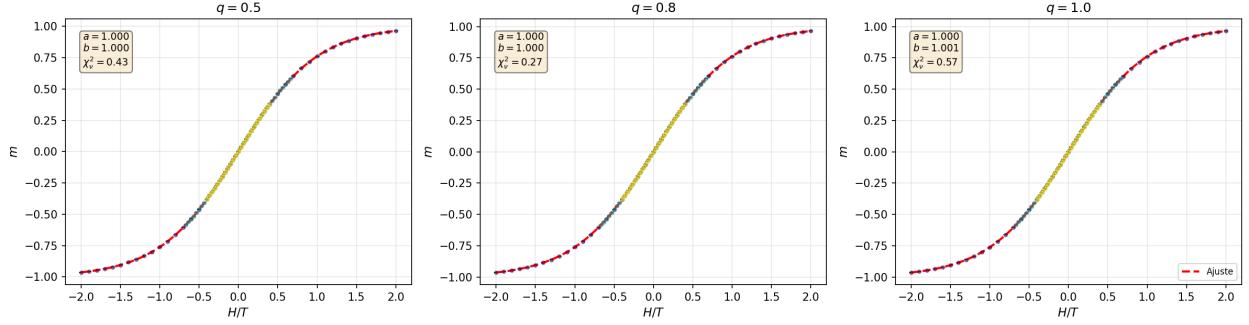


Figure 6: Ley de estados correspondientes para red bipartita 2D ($z = 3$). El colapso de datos es prácticamente perfecto para $q = 0.8$ y $q = 1.0$, con leve dispersión en $q = 0.5$.

Ley de Estados Correspondientes m vs H/T - SQUARE ($z = 4$)
Modelo: $m = a \cdot \tanh(b \cdot H/T)$

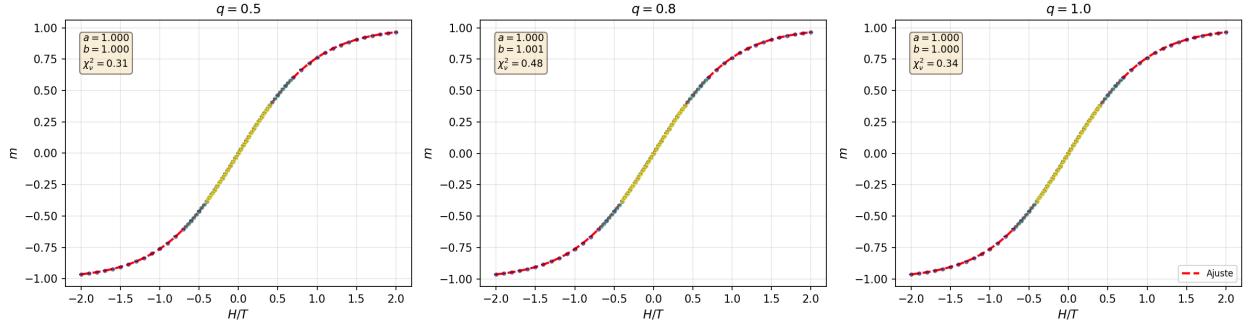


Figure 7: Ley de estados correspondientes para red cuadrada ($z = 4$). La convergencia sobre la curva teórica es excelente en todos los valores de q .

Ley de Estados Correspondientes m vs H/T - BCC ($z = 8$)
Modelo: $m = a \cdot \tanh(b \cdot H/T)$

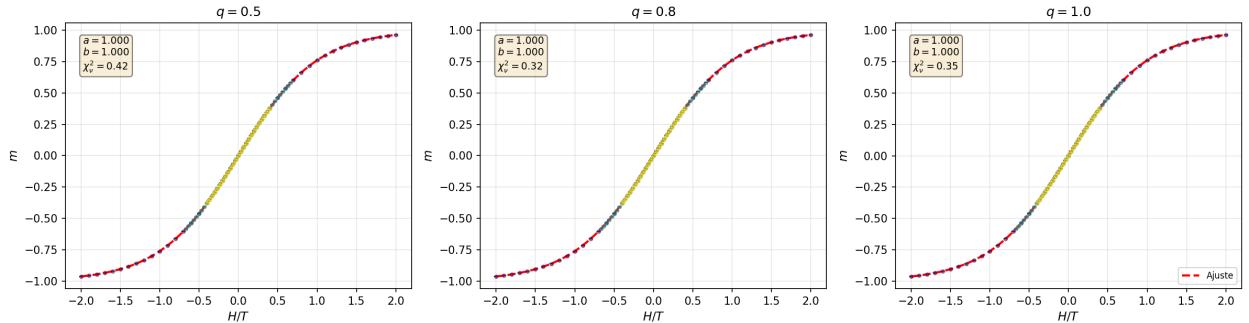


Figure 8: Ley de estados correspondientes para red BCC ($z = 8$). Ajuste casi perfecto con valores de χ^2_ν muy bajos, confirmando la solución exacta del paramagneto de Curie.

8.2 Régimen Ferromagnético

8.2.1 Ciclos de Histéresis

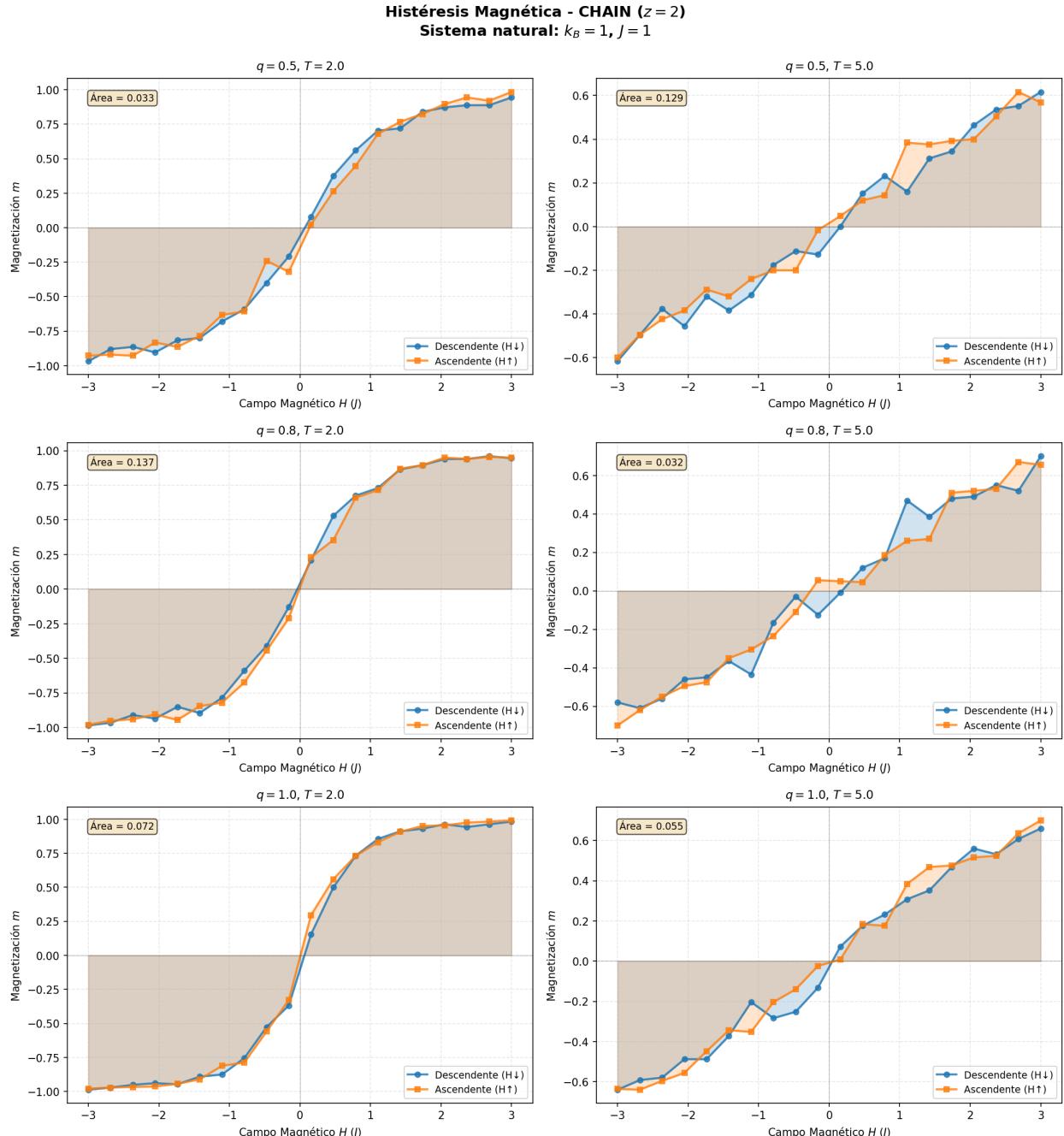


Figure 9: Ciclos de histéresis para cadena 1D ($z = 2$) a $T = 2.0$. Rama descendente (azul) y ascendente (naranja) para tres valores de dilución magnética. Las fluctuaciones visibles reflejan baja cooperatividad y efectos de tamaño finito en sistemas 1D.

Histéresis Magnética - HONEYCOMB ($z = 3$)
Sistema natural: $k_B = 1, J = 1$

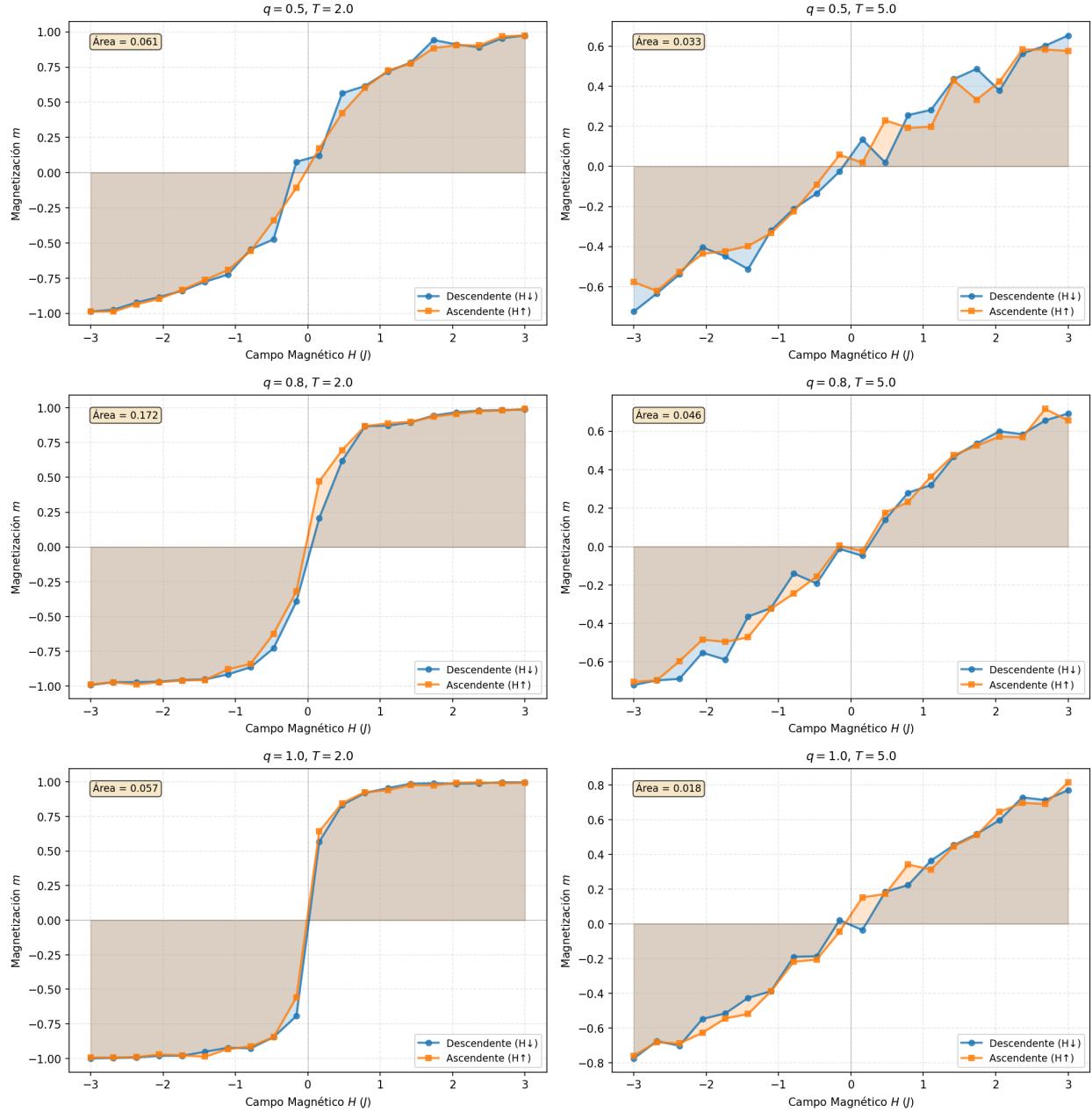


Figure 10: Ciclos de histéresis para red bipartita 2D ($z = 3$) a $T = 2.0$. Las áreas encerradas son muy pequeñas (< 0.03) debido a la baja coordinación, con pico leve en $q = 0.8$.

Histéresis Magnética - SQUARE ($z = 4$)
Sistema natural: $k_B = 1, J = 1$

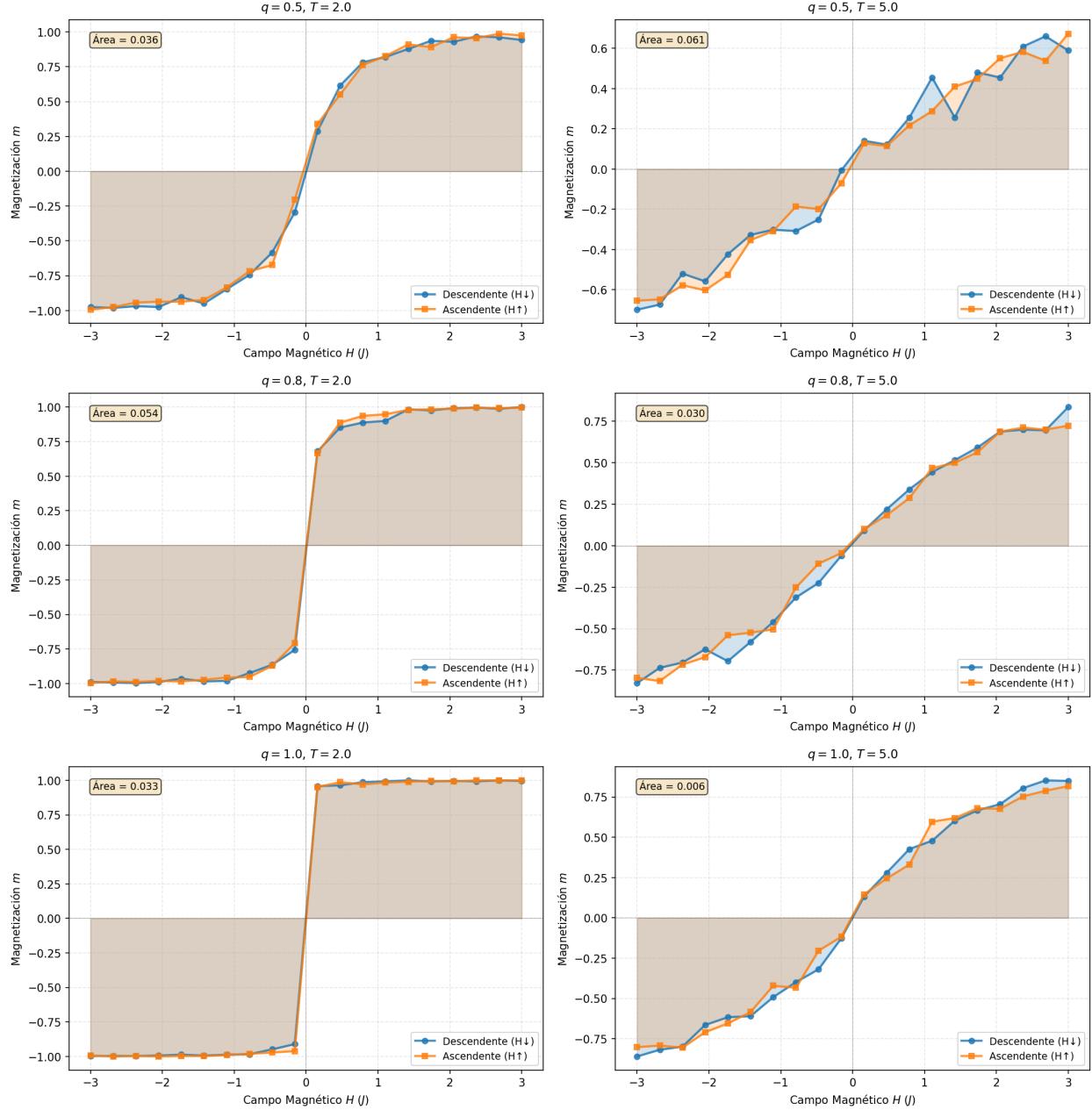


Figure 11: Ciclos de histéresis para red cuadrada ($z = 4$) a $T = 2.0$. Comportamiento no monótono con área máxima en $q = 0.8$, explicable por competencia entre percolación y anclaje de paredes de dominio.

Histéresis Magnética - BCC ($z = 8$)
Sistema natural: $k_B = 1, J = 1$

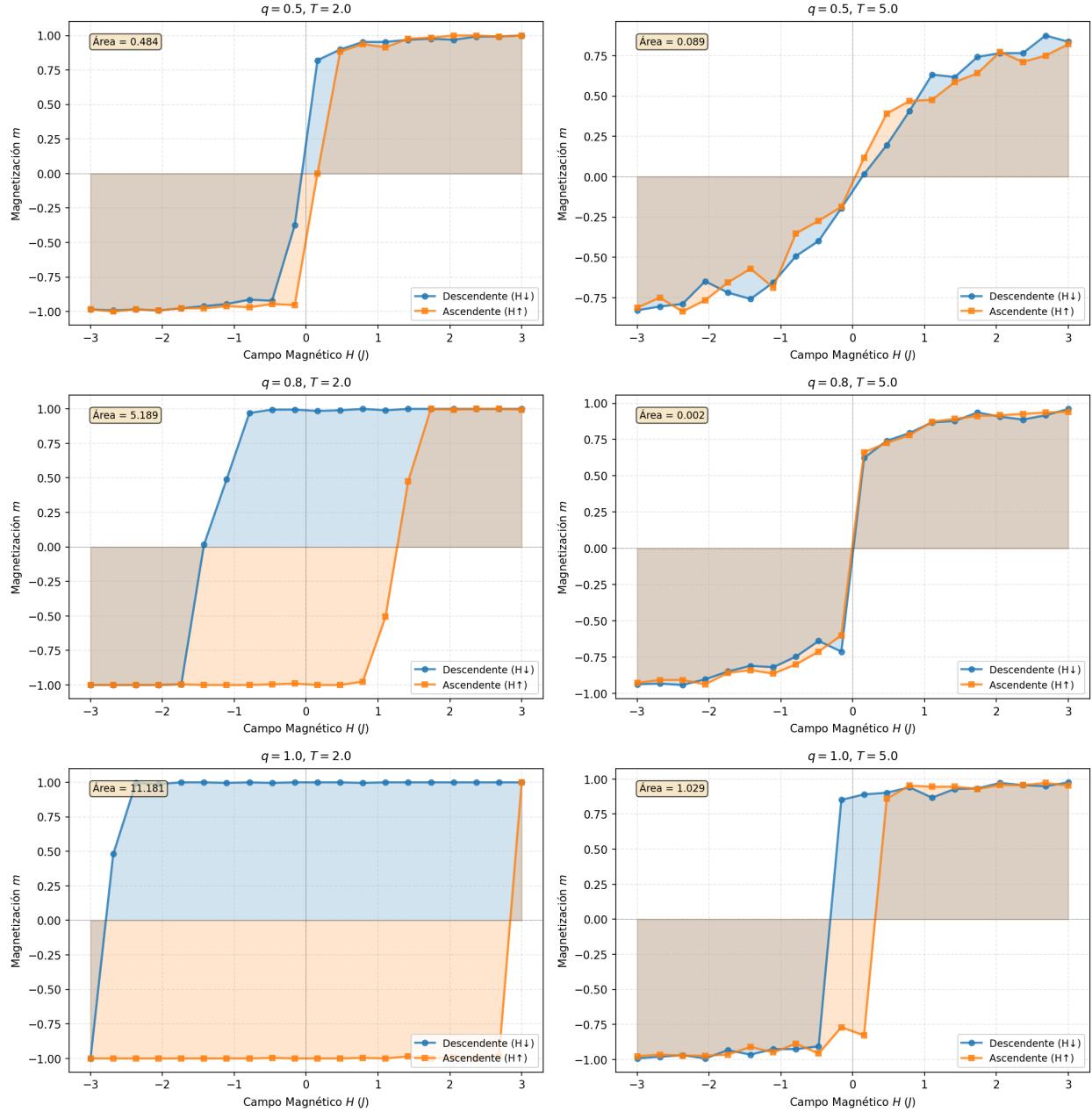


Figure 12: Ciclos de histéresis para red BCC ($z = 8$) a $T = 2.0$. Tendencia monótona creciente con q , dominada por cooperatividad ferromagnética. Las áreas son significativamente mayores que en otras topologías debido al mayor número de espines y alta coordinación.

8.2.2 Relajación del Sistema

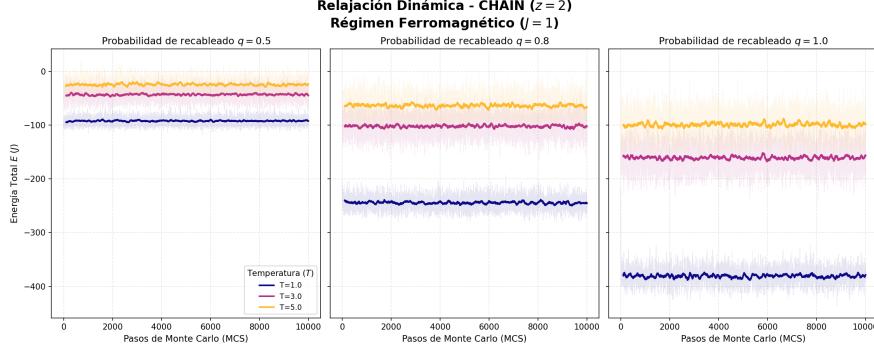


Figure 13: Relajación dinámica de la energía interna para cadena 1D ($z = 2$) con $q = 0.8$. Panel izquierdo: régimen paramagnético ($J = 0$) con $E = 0$ constante. Panel derecho: régimen ferromagnético ($J = 1$) mostrando estratificación por temperatura y convergencia rápida al equilibrio.

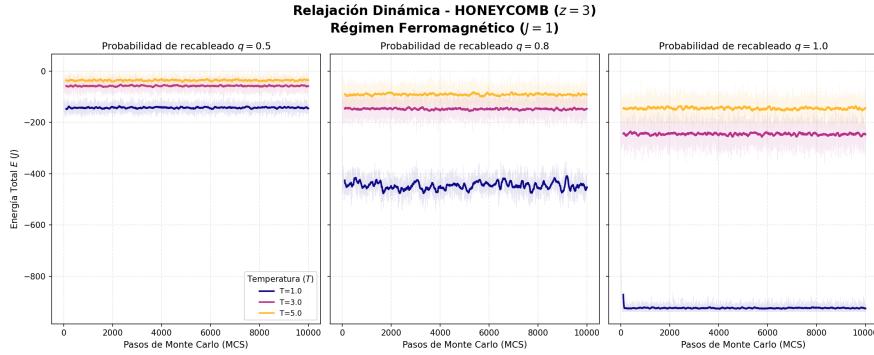


Figure 14: Relajación dinámica de la energía interna para red bipartita 2D ($z = 3$) con $q = 0.8$. El sistema alcanza equilibrio en los primeros ~ 100 MCS sin transitorios apreciables.

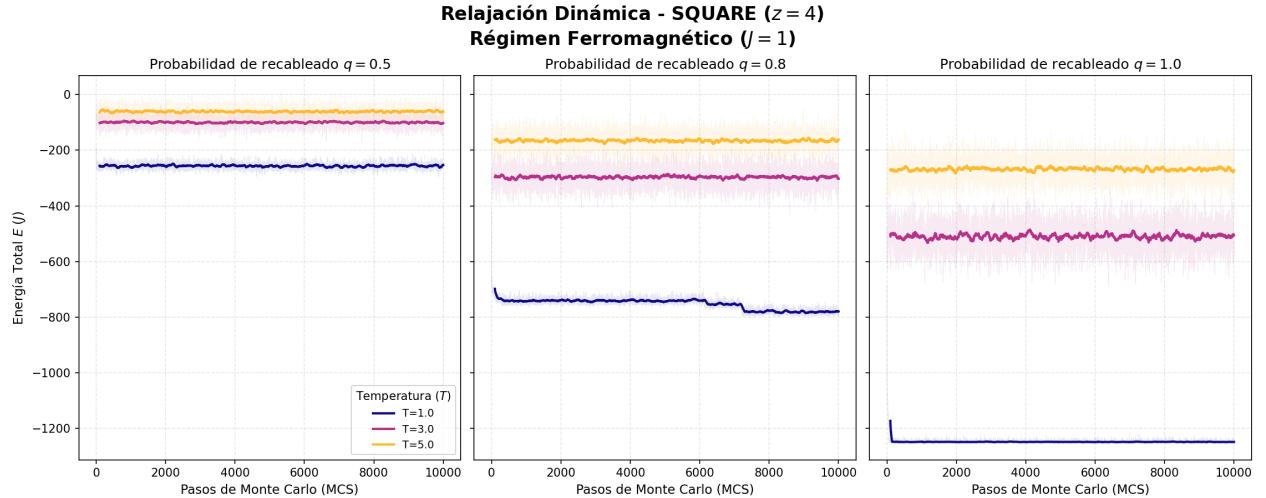


Figure 15: Relajación dinámica de la energía interna para red cuadrada ($z = 4$) con $q = 0.8$. Las fluctuaciones en equilibrio aumentan con temperatura según el teorema de fluctuación-disipación.

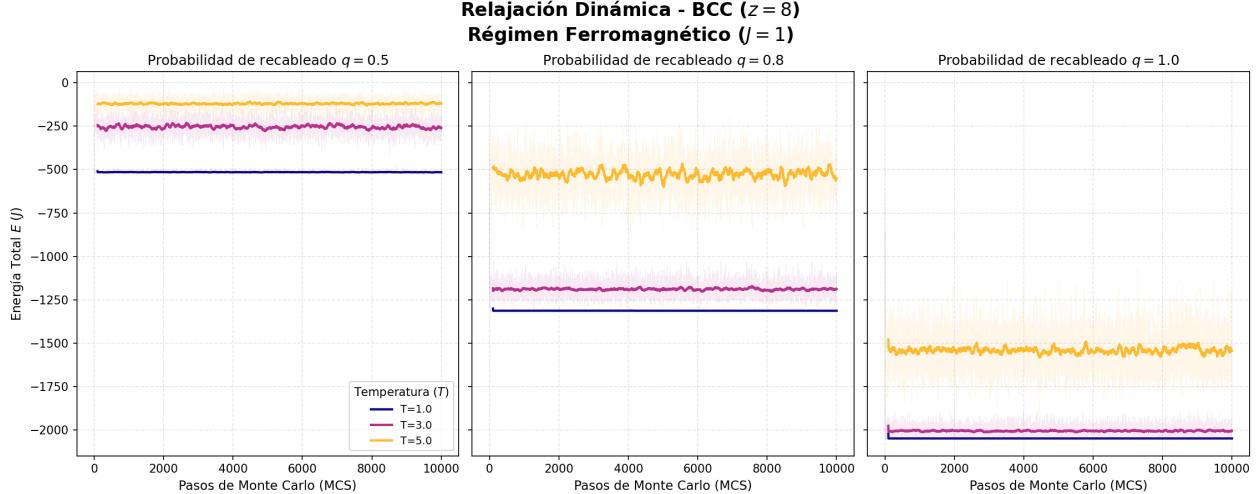


Figure 16: Relajación dinámica de la energía interna para red BCC ($z = 8$) con $q = 0.8$. La magnitud de energía ($|E| \sim 1200$) es significativamente mayor que en otras topologías debido al mayor número de espines ($N = 512$) y alta coordinación.

8.2.3 Transiciones de Fase

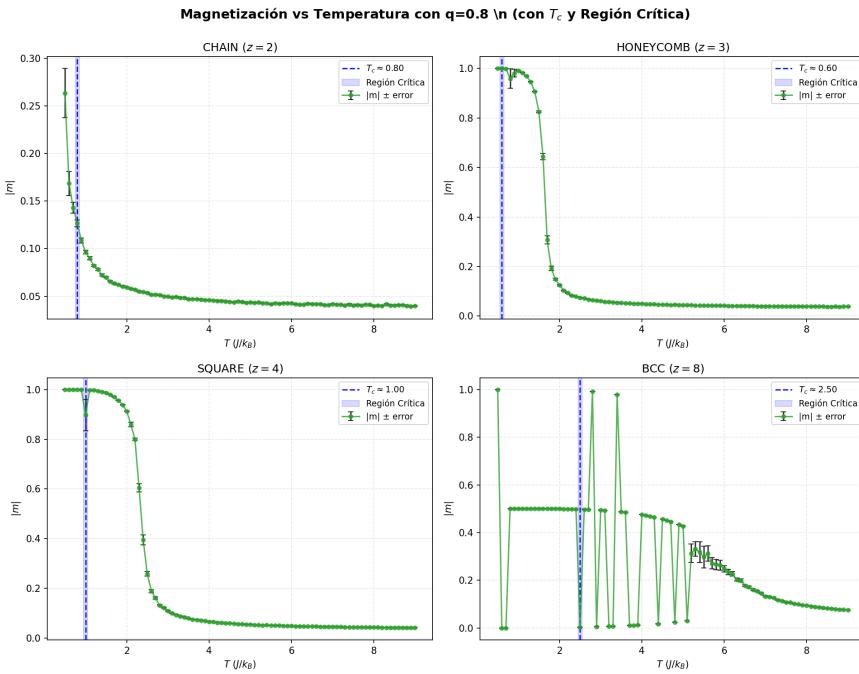


Figure 17: Magnetización $|m|$ vs temperatura para las cuatro topologías con $q = 0.8$. Las líneas verticales indican las temperaturas críticas T_c identificadas como puntos de inflexión. Se observa la jerarquía $T_c \propto z$ y el carácter crossover en 1D vs transiciones en 2D/3D.

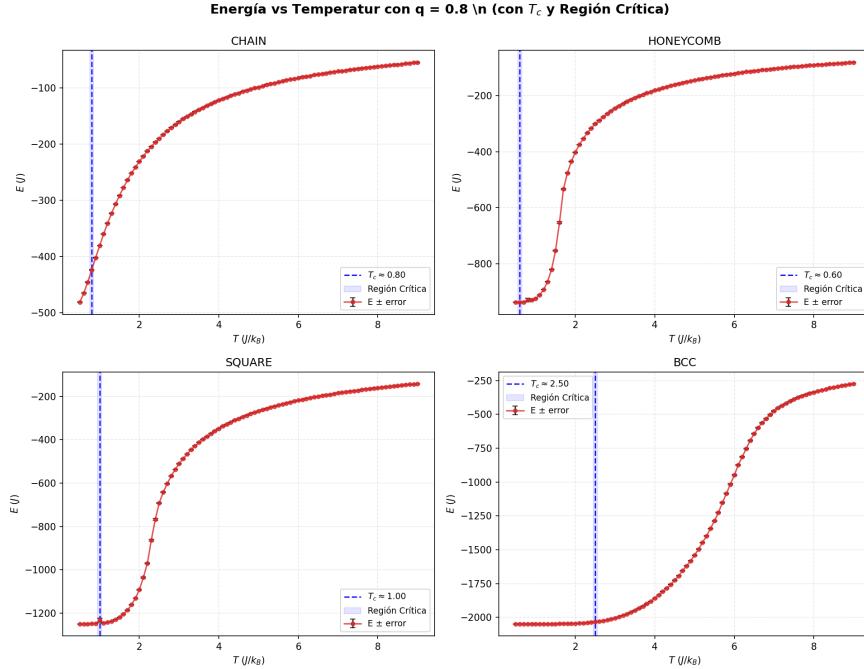


Figure 18: Energía interna E vs temperatura para las cuatro topologías con $q = 0.8$. Los cambios de pendiente coinciden con las T_c identificadas en la Figura 17, validando conjuntamente las transiciones de fase.

8.2.4 Configuraciones Espaciales

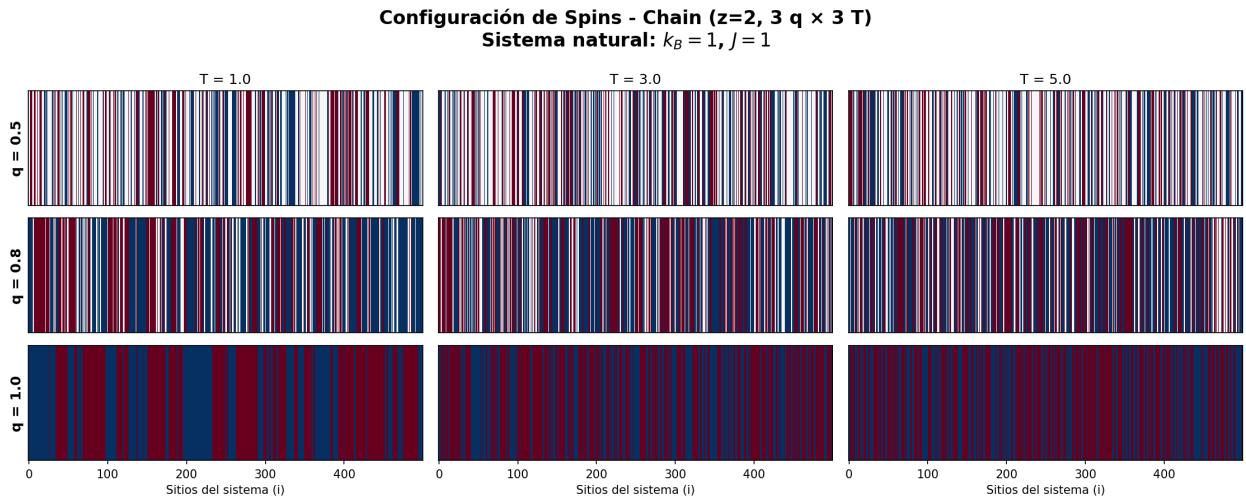


Figure 19: Configuraciones de espines para la cadena 1D ($z=2$) a tres temperaturas y tres valores de dilución. Los espines up (rojo), down (azul) y sitios vacíos (blanco) muestran la evolución desde el orden ferromagnético a bajo T al desorden paramagnético a alto T.

Configuración de Spins - Honeycomb (z=3, 3 q × 3 T)
Sistema natural: $k_B = 1, J = 1$

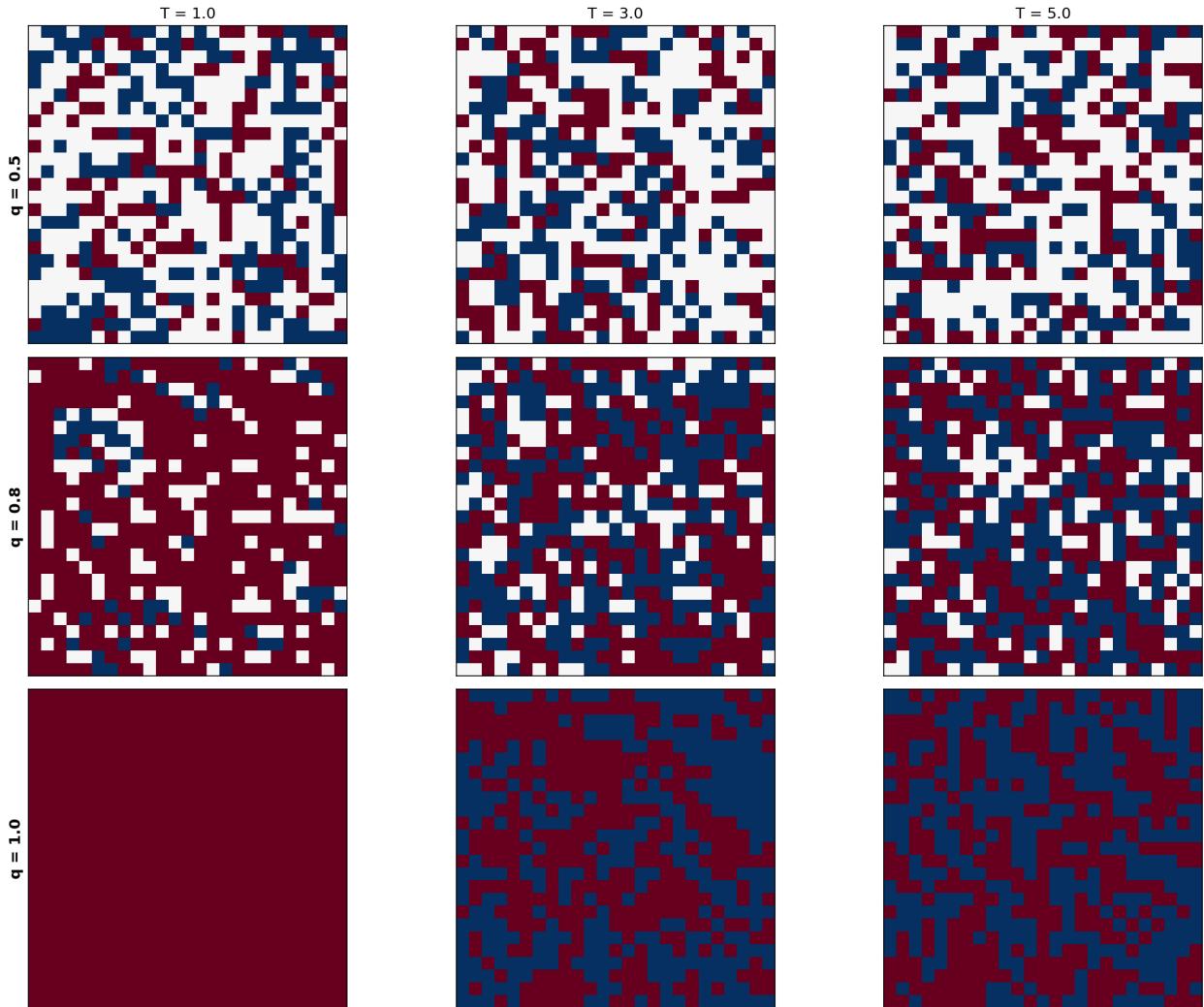


Figure 20: Configuraciones de espines para la red honeycomb ($z=3$) a tres temperaturas y tres valores de dilución. Se observa la formación de dominios magnéticos y el efecto de la dilución en la conectividad.

Configuración de Spins - Square (z=4, 3 q × 3 T)
Sistema natural: $k_B = 1, J = 1$

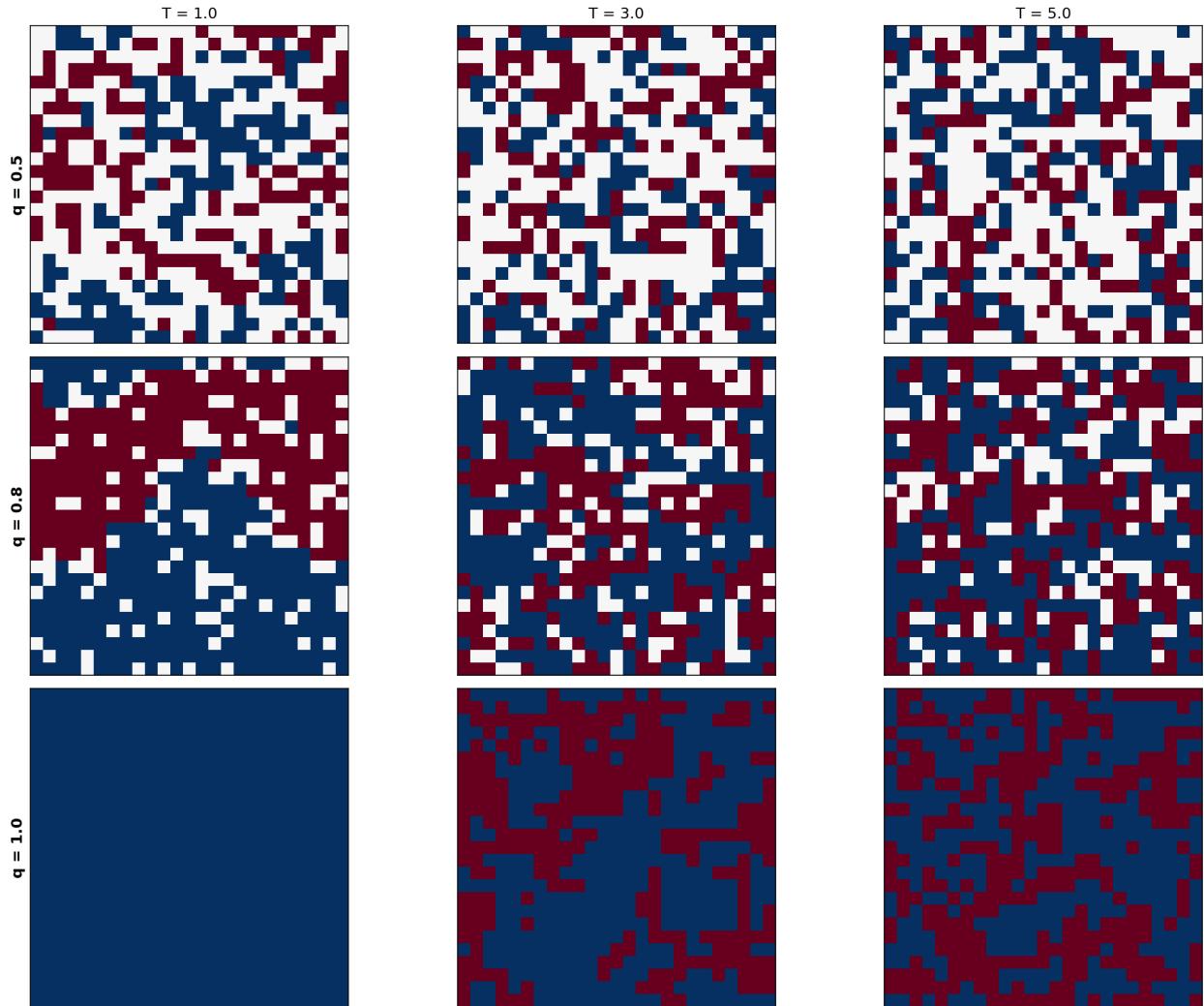


Figure 21: Configuraciones de espines para la red cuadrada ($z=4$) a tres temperaturas y tres valores de dilución. La transición de fase se manifiesta en la reducción del tamaño de dominios con el aumento de temperatura.

Configuración de Spins - BCC (z=8, 3 q × 3 T × 8 capas)
Sistema natural: $k_B = 1, J = 1$

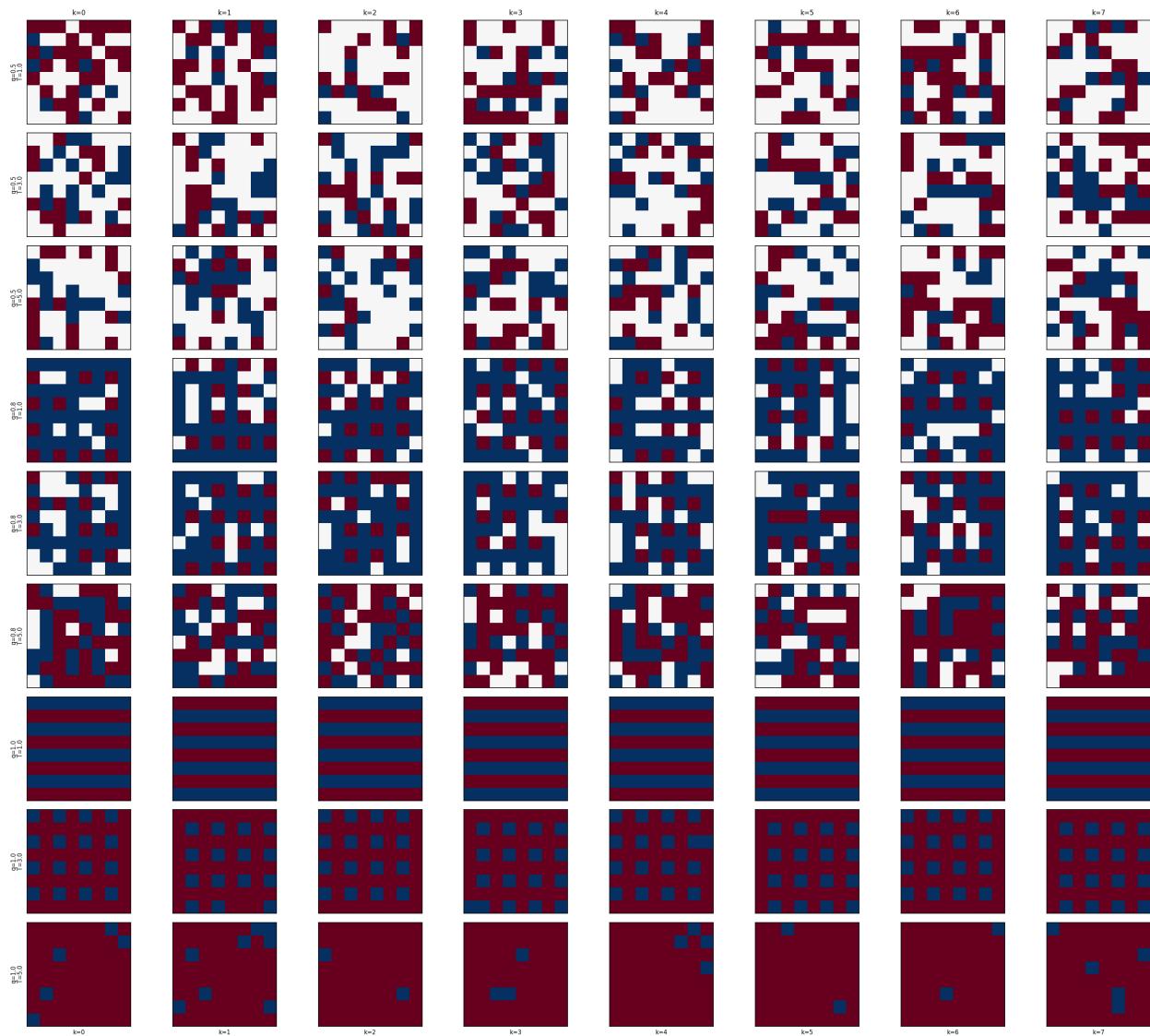


Figure 22: Configuraciones de espines para la red BCC ($z=8$) a tres temperaturas y tres valores de dilución. La alta coordinación estabiliza el orden magnético incluso a temperaturas moderadas.