

# Simulación del Modelo de Ising usando el Método de Monte Carlo en Diferentes Tipos de Redes

Ortiz Jose

*Universidad de Antioquia (UdeA)*

## Resumen

Se presenta una implementación numérica del modelo de Ising mediante el método de Monte Carlo con dinámica de Metropolis, analizando el comportamiento de la magnetización ( $m$ ) y la energía en distintos tipos de redes (lineal, cuadrada, de tipo panal y cúbica) expuestas a un reservorio de temperatura ( $T$ ) y un campo magnético externo ( $H$ ), tanto en el régimen paramagnético como ferromagnético. Se estudia además la influencia de  $T$  y la ocupación (proporción entre sitios ocupados y disponibles en las redes de Ising) sobre las transiciones de fase y la respuesta magnética del sistema ante  $H$ . Se concluye en el caso paramagnético que al aumentar  $T$  es más difícil variar  $m$  en el sistema debido al desorden inducido. Para el caso paramagnético se encuentra que  $m$  sigue una ley de  $\tanh(x)$  respecto a la proporción  $H$  y  $T$ . Se concluye que en el caso ferromagnético existen los ciclos de histeresis mostrando una "memoria" del sistema, además de una dependencia del "número de vecinos" ( $z$ ) que tienen las redes. Por último, se varía  $m$  en función de  $T$ , y se encuentra que existen diferentes temperaturas críticas  $T_c$  en las cuales los sistemas cambian de fase y que estas dependen proporcionalmente a  $z$  (para estos sistemas).

## 1 Introducción

El estudio de los fenómenos de magnetización, como lo son el ferromagnetismo, paramagnetismo, diamagnetismo, entre otros, ha permitido desarrollar tecnologías necesarias para el desarrollo de la sociedad, tales como los motores eléctricos, generadores, discos duros, resonancia magnética nuclear, etc. [1] En aras de desarrollar una teoría que pudiera ser usada como base para explicar estos fenómenos, nace el modelo de Ising, uno que en la actualidad se sigue usando en sistemas que son modelados (a priori) como un conjunto de moléculas cuya interacción entre los elementos que los conforman se debe (en parte) a la presencia de los vecinos más cercanos. [2]

En 1920, el físico alemán Wilhelm Lenz propuso un modelo como una simplificación para explicar el comportamiento de los imanes ferromagnéticos. Lenz sugirió un sistema de espines dispuestos sobre una red; en dicho sistema, cada espín interactuaría con sus vecinos más cercanos, tendiendo a alinearse en la misma dirección que ellos. Dicho sistema fue asignado a su estudiante de doctorado, Ernst Ising, quien en su tesis de 1924 analizó el modelo en una dimensión. Si bien la red lineal que Ising supuso inicialmente para explicar el fenómeno no dio resultados satisfactorios, otras redes estudiadas posteriormente sí resultaron de utilidad. [3]

El modelo de Ising funciona representando átomos o espines en una red (como una cuadrícula 1D, 2D o 3D) donde cada espín puede apuntar arriba o abajo. La energía total del sistema se calcula considerando interacciones entre espines vecinos y un posible campo magnético externo. Usando la distribución de Boltzmann, se puede predecir el comportamiento colectivo y de este extraer información, como transiciones de fase.

Este modelo es fundamental, pues sirve de base para extensiones más complejas como el modelo de Potts, el modelo XY o el de Heisenberg, que estudian fenómenos en física de la materia condensada, biología y computación. Su simplicidad permite soluciones exactas en casos de bajas dimensiones y simulaciones numéricas en problemas reales. [4]

Actualmente, dicho modelo ha evolucionado intentando incorporar nuevas libertades, como lo son la estructura de la red, espines multicomponentes, interacciones de largo alcance y perturbaciones cuánticas. Las investigaciones se están centrando en la optimización combinatoria y el análisis de datos biológicos. Se han desarrollado "máquinas Ising" como alternativas de bajo costo a las computadoras cuánticas convencionales, imitando espines magnéticos para la optimización combinatoria [5–8]. Sin embargo, persisten problemas significativos que limitan el alcance del modelo de Ising. Uno de los problemas más conocidos es la ausencia de una solución exacta para el modelo en tres (o más) dimensiones, lo que impide una comprensión analítica completa de los fenómenos de transición. Además, en el ámbito de las máquinas Ising, se enfrentan limitaciones prácticas debido al alto consumo energético y a una posible falta de escalabilidad [9, 10].

Los métodos computacionales, como las simulaciones de Monte Carlo (MC), juegan un rol crucial en el modelo de Ising al resolver problemas que no tienen soluciones analíticas, especialmente para dimensiones superiores a 2. Estos generan configuraciones aleatorias de espines según la distribución de Boltzmann, usando algoritmos como Metropolis para obtener promedios estadísticos y así poder extraer propiedades termodinámicas como la magnetización o la temperatura crítica [11–13].

En este trabajo, se implementarán simulaciones MC con dinámica de Metropolis para el modelo de Ising

en diferentes redes, con diferentes ocupaciones usando condiciones periódicas. Para el caso paramagnético, se obtendrán curvas de magnetización  $m$  vs  $H$ . Para tres isotermas, verificaré la ley de estados correspondientes  $m$  vs  $H/T$  ajustando a una estructura particular con  $\tanh(x)$ . Para el caso ferromagnético simularé isotermas para poder ver el ciclo de histéresis. Por último simularé isotermas  $m$  vs  $H$  y discutiré cómo influyen las variaciones de la temperatura en función de las ocupaciones y las redes impuestas.

## 2 Marco Teórico

En el modelo de Ising, se considera un conjunto de  $N$  espines localizados en los sitios de una red. Cada espín  $i$ -ésimo  $s_i$  puede adoptar uno de dos estados discretos  $\pm 1$ . Estos estados representan los momentos magnéticos atómicos intrínsecos en un material [14].

El Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  del sistema, en su forma canónica, se expresa como:

$$\mathcal{H}(\{s_i\}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i, \quad (1)$$

donde:

- $\{s_i\}$  denota una configuración específica de todos los espines.
- $J$  es la constante de acoplamiento de intercambio, que cuantifica la intensidad de la interacción entre espines adyacentes.
- La suma  $\sum_{\langle i,j \rangle}$  se extiende sobre todos los pares de espines vecinos más cercanos en la red. El símbolo  $\langle i,j \rangle$  indica que solo se consideran interacciones locales.
- $H$  representa la intensidad de un campo magnético externo aplicado uniformemente al sistema.

Sobre esta formulación se trabajará con la constante de Boltzmann  $k_B = 1$ , simplificando las expresiones termodinámicas subsiguientes.

Con esta definición se puede establecer una relación fundamental en la mecánica estadística, la cual es entre el Hamiltoniano y la función de partición  $Z$ , definida por

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

donde  $\beta = 1/(k_B T)$ , y la suma se extiende sobre todas las  $2^N$  configuraciones posibles de los espines. Esta función de partición es clave para derivar propiedades termodinámicas: la energía libre de Helmholtz se obtiene a partir de esta como

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z, \quad (3)$$

la energía interna como

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \quad (4)$$

y la magnetización como

$$m = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial \ln Z}{\partial H}. \quad (5)$$

Claramente, en el límite termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ), estas cantidades proporcionan el comportamiento macroscópico del sistema, permitiendo el estudio analítico y/o numérico de fases y transiciones críticas.

En el marco del modelo de Ising, las fases paramagnética y ferromagnética representan dos regímenes termodinámicos fundamentales que provienen de las interacciones entre espines, las cuales dependen de la temperatura  $T$ , el campo magnético externo  $H$  y la constante de acoplamiento  $J$ .

### 2.1 Paramagnetismo y Ferromagnetismo de Ising

El paramagnetismo se manifiesta en sistemas donde las interacciones entre espines son despreciables ( $J = 0$ ), lo que reduce el Hamiltoniano a

$$\mathcal{H} = -H \sum_i s_i. \quad (6)$$

En este caso, cada espín se comporta de forma independiente, respondiendo únicamente al campo externo  $H$  y al desorden térmico inducido por  $T$ . De hecho, al eliminar el término de interacción ( $J = 0$ ), la energía de cada espín es simplemente  $-H s_i$ , lo que implica que los espines no sienten a los vecinos más cercanos.

La función de partición para un espín aislado es

$$Z = 2 \cosh(\beta H), \quad (7)$$

donde  $\beta = 1/(k_B T)$ . Así, para  $N$  espines independientes,

$$Z = [2 \cosh(\beta H)]^N. \quad (8)$$

Para el caso ferromagnético ( $J > 0$ ), las interacciones favorecen la alineación colectiva de los espines incluso en ausencia de campo externo ( $H = 0$ ). A bajas temperaturas ( $T < T_c$ ), el sistema presenta una magnetización espontánea, mientras que en caso contrario desaparece  $m$ . Esta discontinuidad suave en  $m(T)$  caracteriza la transición de fase ferromagnética del sistema.

### 2.2 Ejemplo y Análisis: Casos 1D y 2D

#### 2.2.1 Caso Unidimensional (1D)

Consideremos la cadena de Ising 1D con acoplamiento  $J > 0$  y campo externo  $H = 0$  (condiciones periódicas). Usando la técnica de matriz de transferencia se obtiene la función de partición y el libre por espín. Con  $k_B = 1$ ,

$$Z_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N, \quad (9)$$

donde  $\lambda_{\pm}$  son los autovalores de la matriz de transferencia. Para  $H = 0$  esta expresión se simplifica y el libre por espín en el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$  es

$$f = -\frac{1}{\beta} \ln (2 \cosh(\beta J)). \quad (10)$$

De aquí se deduce que la magnetización por espín en  $H = 0$  es

$$m(T) = 0 \quad (\forall T > 0), \quad (11)$$

es decir, no existe magnetización espontánea y por tanto no hay transición de fase a temperatura finita en una dimensión. La longitud de correlación  $\xi$  viene dada por

$$\xi^{-1} = -\ln(\tanh(\beta J)), \quad (12)$$

que diverge solo en el límite  $T \rightarrow 0$  (como era de esperar).

### 2.2.2 Caso Bidimensional (2D)

En dos dimensiones, el modelo de Ising en red cuadrada fue resuelto por Onsager (partición) y Yang (magnetización). La principal conclusión es que existe una transición de fase a una temperatura crítica finita  $T_c$ . Con  $k_B = 1$ , la temperatura crítica es

$$T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (13)$$

Para  $T < T_c$  la magnetización por espín en  $H = 0$  (resultado de Yang) está dada por

$$m(T) = [1 - \sinh^{-4}(2\beta J)]^{1/8}, \quad (T < T_c), \quad (14)$$

y  $m(T) = 0$  para  $T \geq T_c$ . La energía libre por espín (resultado de Onsager) tiene una expresión cerrada pero más compleja; su forma explícita puede encontrarse en la literatura clásica sobre el tema. Estos resultados demuestran que, a diferencia del caso 1D, en 2D el modelo presenta una transición de fase de segundo orden con exponentes críticos no triviales. [15–17]

### 2.3 Método de Monte Carlo y Dinámica de Metropolis

Dado que el espacio de configuraciones del modelo de Ising crece exponencialmente con el número de espines, la evaluación exacta de las propiedades termodinámicas del sistema resulta inviable para sistemas grandes. Por tanto, se deben emplear métodos numéricos como los métodos de Monte Carlo [18], que permiten explorar el espacio de microestados de forma eficiente.

En lugar de calcular de forma exacta, se simula el proceso muchas veces con números aleatorios y se promedian los resultados. Cuantas más simulaciones, más precisa es la aproximación (debido a la ley de los grandes números).

Dentro de los métodos de Monte Carlo, el algoritmo de Metropolis es una variante específica dentro de las técnicas de cadenas de Markov Monte Carlo (MCMC). Su objetivo es muestrear de manera eficiente una distribución de probabilidad compleja cuando no se puede muestrear directamente.

El proceso de Metropolis comienza en un estado inicial y se proponen movimientos aleatorios a nuevos estados del sistema. Para cada propuesta se calcula la razón de probabilidad entre el nuevo estado y el estado actual; la probabilidad de aceptación para este caso es

$$P_{\text{acepta}} = \min\{1, e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}\}, \quad (15)$$

donde  $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{nuevo}} - \mathcal{H}_{\text{actual}}$ . Si la propuesta es más favorable (mayor probabilidad), se acepta; en caso contrario se acepta con la probabilidad anterior, y si no se

acepta se permanece en el estado actual. Este método es eficaz porque guía las muestras hacia regiones de alta probabilidad, por lo que resulta muy útil para estimar promedios termodinámicos y estudiar transiciones de fase numéricamente.

### 2.4 Metodología Computacional y Simulaciones de Monte Carlo para el modelo de Ising

La implementación de las simulaciones de Monte Carlo (MC) con dinámica de Metrópolis se realizará en **Python**, utilizando arreglos multidimensionales. Se emplearán módulos para la visualización y la optimización, debido a la alta demanda computacional requerida para realizar múltiples simulaciones.

Se implementarán sistemas de red lineal, cuadrada, hexagonal y cúbica, con números de coordinación (cantidad de vecinos)  $z = 2$ ,  $z = 4$ ,  $z = 3$  y  $z = 8$ , respectivamente. Se variará el campo magnético y se observará la evolución de las características de los sistemas, todo esto para tres isotermas.

Se analizará la variación de la magnetización en términos del campo magnético, además de estudiar cómo cambia en función de  $\frac{H}{T}$ , y se comparará con la solución analítica, que tiene la forma  $\tanh(x)$  (para aquellos casos en los que exista una solución analítica).

Los cálculos se iniciarán con una cantidad de ubicaciones posibles dentro de una red de tamaño  $\text{SIZE} = 100$ . Si la red se espera que tenga lados simétricos, entonces las dimensiones para las diferentes redes, en términos de dicho  $\text{SIZE}$ , serán las siguientes:

- **Cadena lineal:** Para este caso,  $L = 100$ , pues cada posición está distribuida uniformemente a lo largo de una recta unidimensional.
- **Red hexagonal (panal):** En este caso, la red es de tamaño  $L \times L$  pero con una estructura bipartita; es decir, puede entenderse como dos subredes por cada celda unitaria, lo que permite definir sus vecinos. Claramente,  $\text{SIZE} = L$ , con  $N = 2L^2$ .
- **Red cuadrada:** En este caso,  $\text{SIZE} = L$ , con  $N = L^2$ .
- **Red cúbica:** El tamaño total es  $L^3$ , con dos sitios por celda. Si  $\text{SIZE} = L$ , entonces  $N = 2L^3$ .

El flujo del código se puede realizar teniendo en cuenta diferentes secciones.

#### 2.4.1 Definición de Red

Se propone un arreglo que representa todos los sitios posibles de la red. Dependiendo de esta red se definirán los posibles vecinos que puedan tener. Al finalizar con el valor de dilución  $q$  se obtendrán la cantidad de elementos que ocupan la red.

#### 2.4.2 Vecinos

Para las diferentes topologías se definirán unos vecinos específicos. Para todas las redes se suponen condiciones de frontera periódicas. Esto para la situación en la que se evaluará o trabajará con los vecinos de los elementos que se encuentran en las fronteras de los sistemas.

Para la red lineal en una dimensión, se propone que cada uno de los elementos de la red tenga un vecino a la izquierda y otro a la derecha. Para una red cuadrada

en dos dimensiones, los vecinos se definen naturalmente como arriba, abajo, izquierda y derecha.

Un caso diferente es la red de tipo panal. Se puede suponer como dos subredes interpenetradas, A y B. Cada sitio de una subred interactúa exclusivamente con tres vecinos de la subred opuesta, reflejando una geometría hexagonal. Esta, a su vez, se supone en dos dimensiones.

Por último, se supondrá una red cúbica en tres dimensiones. De forma análoga a la red de tipo panal, se organizan dos subredes interpenetrantes: una formada por los vértices de la celda cúbica y otra por los centros de cada cubo. Cada sitio tiene ocho vecinos contiguos ubicados en los vértices del cubo que lo rodea, pertenecientes todos a la subred complementaria. Es decir, una estructura bipartita tridimensional.

#### 2.4.3 Termalización

En este apartado, el sistema se estabiliza para poder realizar medidas.

Se parte de una configuración aleatoria, es decir, se inicia el sistema con espines distribuidos al azar, dependiendo de un número de ocupación  $q = n/N$ , donde  $n$  es el número de espines del sistema, que no representan el estado de equilibrio térmico a una temperatura dada.

Luego, se hacen muchos pasos de MC, es decir, se permite evolucionar el sistema como un sistema “real”, en el cual, en un instante de tiempo, de forma espontánea, un espín aleatorio cambia su estado (es decir, se volteea). Luego, se decide si se permite o no que este espín se voltee; esto, en función de la regla de selección presentada en [2.3]. De esta forma, se está permitiendo que el sistema evolucione, olvidando las condiciones iniciales y creando una configuración muy probable en función de la temperatura dada.

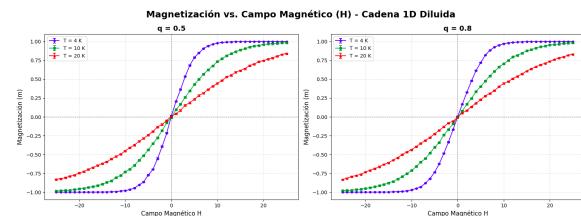
#### 2.4.4 Muestreo

El sistema sigue evolucionando de forma igual a la termalización; el cambio es que ahora sí se registran los valores. Cada cierto número de pasos, se registra el valor de la magnetización (o energía) del sistema en ese instante. Luego de que se han acumulado suficientes muestras, estas se promedian. Sin embargo, como no se puede tener preferencia por la suposición inicial en la termalización, lo que se hace es suponer múltiples configuraciones y calcular el valor promedio de la magnetización; este será el valor de la magnetización o energía para un valor dado del campo magnético.

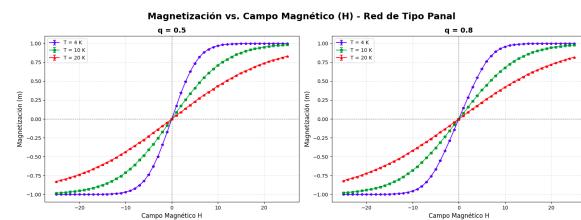
En el caso de calcular los valores respecto a  $H/T$ , se hace de forma similar a los pasos anteriores. Es claro que es indiferente empezar con una configuración particular, debido a que esta no contiene preferencia; es decir, se pudo haber escogido una de tal forma que tuviera todos los espines alineados y habría dado igual.

### 3 Resultados

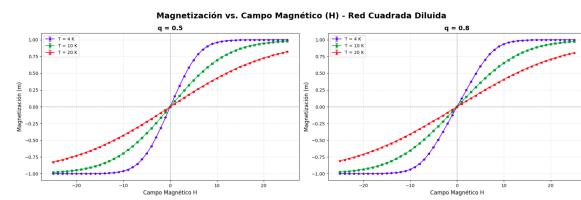
Para un caso paramagnético ( $J = 0$ ) se obtuvieron las siguientes gráficas de la variación de la magnetización en función del campo magnético inducido



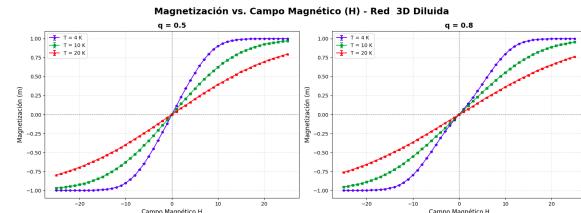
**Figura 1.** Comportamiento de la magnetización para el caso paramagnético ( $J = 0$ ) de una red lineal.



**Figura 2.** Comportamiento de la magnetización para el caso paramagnético ( $J = 0$ ) de una red de tipo panal.



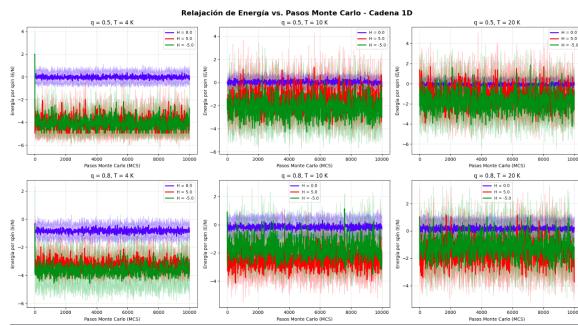
**Figura 3.** Comportamiento de la magnetización para el caso paramagnético ( $J = 0$ ) de una red de tipo cuadrada.



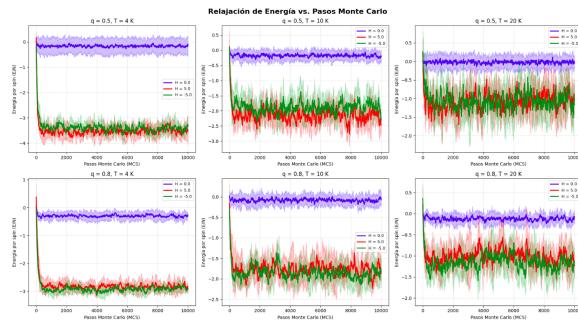
**Figura 4.** Comportamiento de la magnetización para el caso paramagnético ( $J = 0$ ) de una red de tipo cúbica.

Claramente hay una dependencia simétrica respecto al campo aplicado, acorde a la ausencia de interacciones entre los espines. Asimismo, la temperatura influye directamente en la pendiente de las curvas  $m(H)$ , pues a mayor temperatura, la respuesta magnética disminuye debido al aumento del desorden térmico, lo que reduce la alineación de los espines frente al campo aplicado. Este comportamiento es coherente con la ley de Curie, según la cual la susceptibilidad magnética de un material paramagnético varía inversamente con la temperatura.

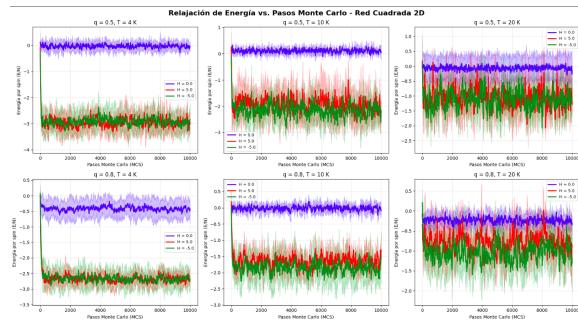
Por otro lado se puede analizar como varía la energía interna  $E$  del sistema en función del número de pasos de Monte Carlo. Para esto es apropiado tomar en cuenta algunos valores de  $H$  y tomar los diferentes valores de  $E$  en algunos momentos del proceso.



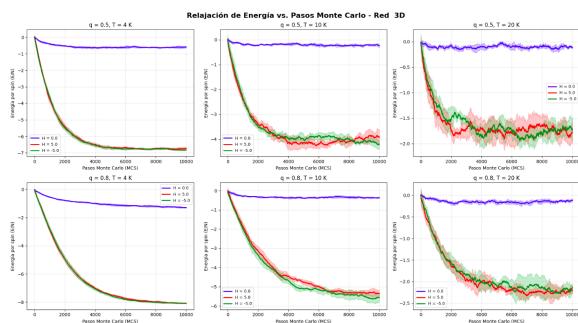
**Figura 5.** Relajación del sistema ( $J = 0$ ) de una red de tipo de tipo lineal.



**Figura 6.** Relajación del sistema ( $J = 0$ ) de una red de tipo panal.



**Figura 7.** Relajación del sistema ( $J = 0$ ) de una red de tipo cuadrado.

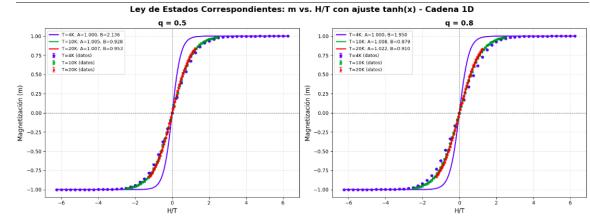


**Figura 8.** Relajación del sistema ( $J = 0$ ) de una red de tipo cubo.

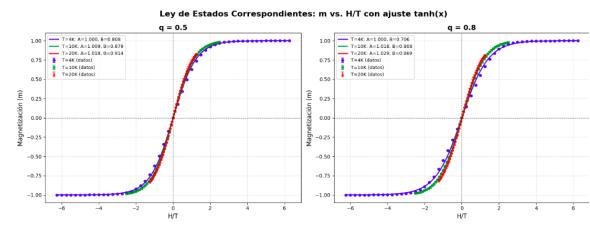
En todas las gráficas se observa que los valores de la energía tienden a estabilizarse a medida que aumenta el número de iteraciones, lo cual tiene sentido, pues

siempre se alcanza un punto de termalización en el que el sistema llega a un estado estable con un reservorio que se supone le está transfiriendo calor.

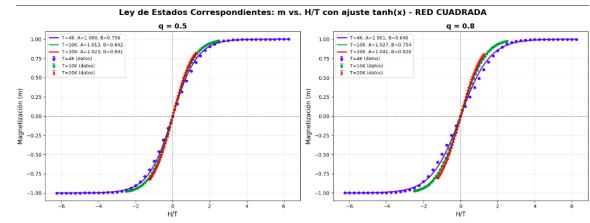
Por otro lado se puede visualizar el comportamiento de las graficas de  $m$  vs  $H/T$ .



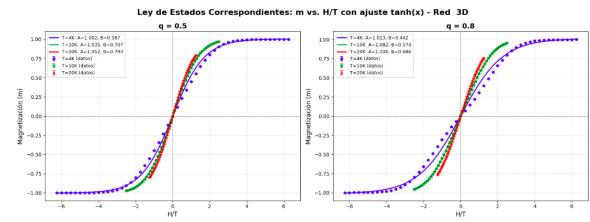
**Figura 9.** Ley de estados ( $J = 0$ ) de una red de tipo lineal.



**Figura 10.** Ley de estados ( $J = 0$ ) de una red de tipo panal.



**Figura 11.** Ley de estados ( $J = 0$ ) de una red de tipo cuadrada.



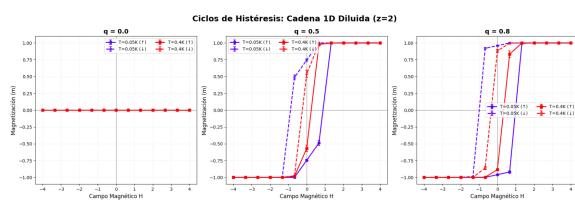
**Figura 12.** Ley de estados ( $J = 0$ ) de una red de tipo cubo.

En el régimen paramagnético ( $J = 0$ ), los espines se comportan de forma independiente, por lo que el número de coordinación  $z$  no influye en el resultado. Todas las redes presentan las mismas curvas de magnetización  $m(H)$  con forma simétrica, que saturan en  $\pm 1$  y se ajustan perfectamente a la ley  $m = \tanh(H/T)$ , así como procesos de relajación energética equivalentes.

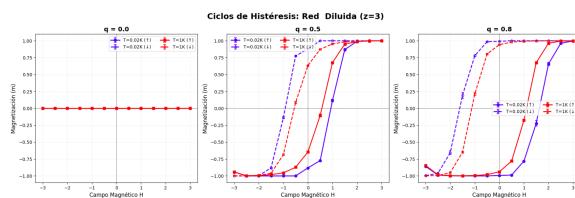
En cambio, la dilución magnética  $q$  sí tiene efecto: reduce linealmente la amplitud de la magnetización según  $m = q \tanh(H/T)$ . Para  $q = 0$  no hay magnetización ni variación energética; para  $q = 0.5$  y  $q = 0.8$  las curvas mantienen la misma forma pero con saturaciones proporcionales y una termalización más rápida debido

a menos espines activos. En conjunto, los resultados confirman que en ausencia de interacciones, la respuesta magnética depende solo de  $H$ ,  $T$  y  $q$ , no de la topología de la red.

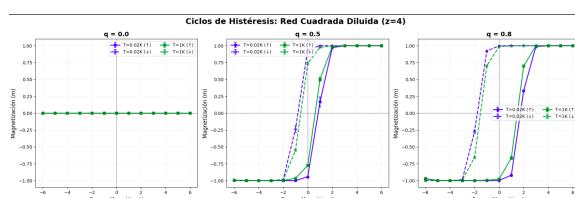
Es apropiado sin embargo analizar el caso ferromagnético el cual está sustentado en [2.1]. Se puede tomar como si la interacción entre vecinos fuera completa. Primero, hay que notar que la temperatura no se puede aumentar mucho debido a que en todos los casos de magnetismo el hecho de que haya mucha temperatura induce muchas fluctuaciones sobre el sistema lo cual impide observar una magnetización incluso con un campo fuerte. Dicho esto se considerarán sistemas en regiones de temperatura muy bajas. Luego para notar cómo se comporta el sistema y si en verdad tiene una magnetización intrínseca, se puede probar un ciclo en el cual se vea la variación de  $m$  en términos de  $H$  pero ahora al momento de llegar a la saturación máxima, se deja al sistema evolucionar nuevamente con Monte Carlo pero por los mismos valores (de forma invertida) de  $H$ . Así se encuentran las siguientes gráficas.



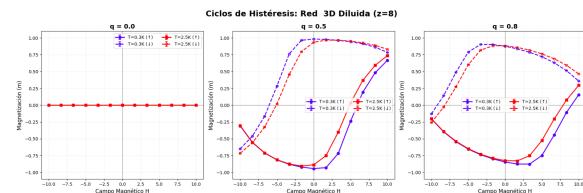
**Figura 13.** Ciclo de histéresis ( $J = 1$ ) de una red de tipo lineal.



**Figura 14.** Ciclo de histéresis ( $J = 1$ ) de una red de tipo panal.



**Figura 15.** Ciclo de histéresis ( $J = 1$ ) de una red de tipo cuadrada.



**Figura 16.** Ciclo de histéresis ( $J = 1$ ) de una red de tipo cúbico.

Se observa que los ciclos de histéresis aparecen cuando se considera un valor  $J \neq 0$ , es decir, cuando se incluyen las interacciones entre espines. Esto genera un acoplamiento colectivo que da lugar a la magnetización remanente característica del ferromagnetismo.

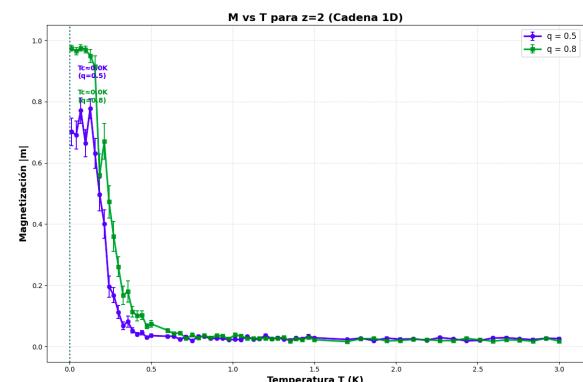
Además, las curvas muestran una simetría evidente respecto al origen, lo cual es coherente con la simetría del Hamiltoniano bajo la inversión simultánea de todos los espines. Esta invariancia implica que

$$m(H) = -m(-H), \quad (16)$$

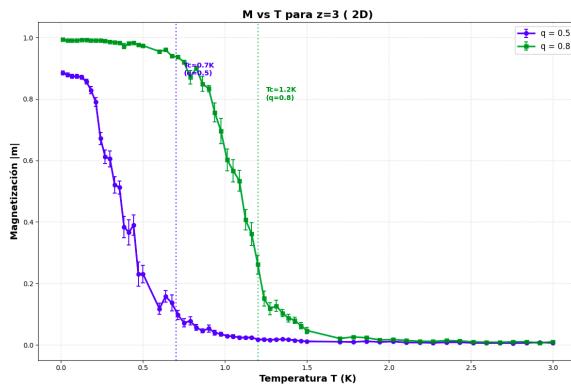
de modo que la función de magnetización es impar en el campo aplicado, tal como se espera teóricamente.

Por último, se puede analizar la variación de la magnetización en función de la temperatura, lo que permite determinar si existe o no una transición de fase en el sistema.

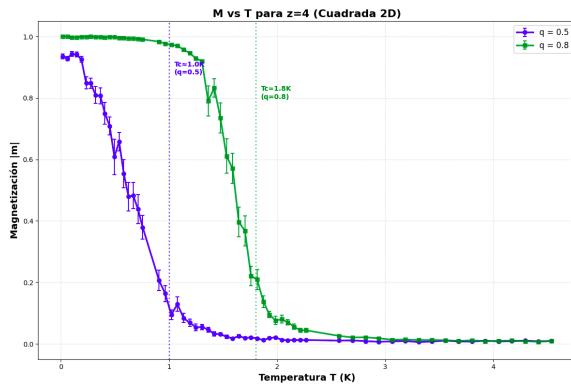
Adicionalmente, es posible estudiar de forma simultánea otras variables relevantes, como la función de concentración o el número de coordinación, para comprender cómo influyen en el comportamiento colectivo de los espines y en la respuesta magnética del sistema.



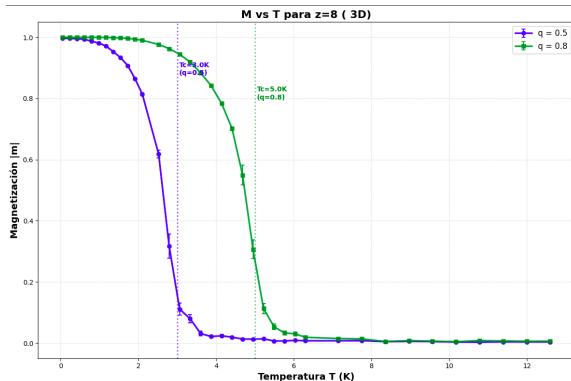
**Figura 17.** Transición de fase ( $J = 1$ ) de una red de tipo lineal.



**Figura 18.** Transición de fase ( $J = 1$ ) de una red de tipo panal.



**Figura 19.** Transición de fase ( $J = 1$ ) de una red de tipo cuadrada.



**Figura 20.** Transición de fase ( $J = 1$ ) de una red de tipo cúbico.

Según se puede observar de las gráficas, al momento de fijar la dilución e ir variando y aumentando el número de coordinación, aumenta la temperatura crítica. Algo que tiene sentido, pues al estar enlazados con más vecinos que los demás, la magnetización intrínseca será mayor, lo cual al exponerse a un campo que vaya en contra les será más difícil seguirlo o si están inmersos en uno con su misma dirección más sencillo.

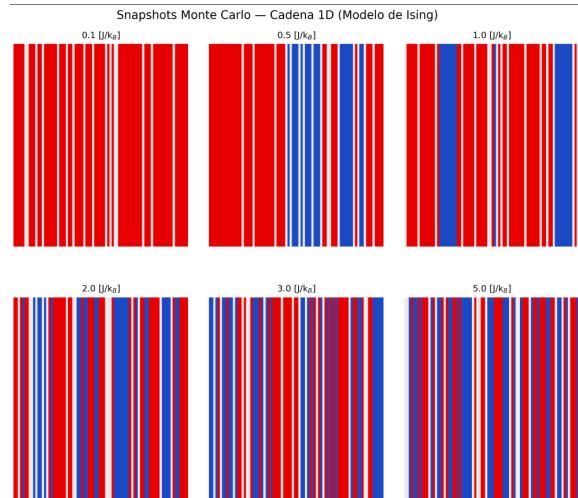
De hecho tiene sentido pues sigue una regla de

$$T_c \propto zqJ. \quad (17)$$

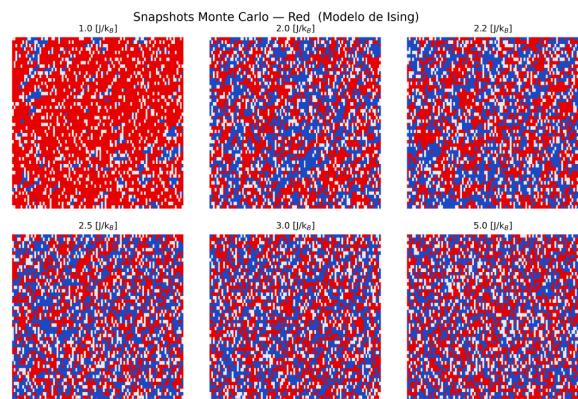
Es de notar que para el caso lineal se observa que no hay transición de fase pues cae abruptamente, esto

es algo que se esperaba desde la teoría debido a la sección 2. Mostrando así las fortalezas de estos métodos computacionales.

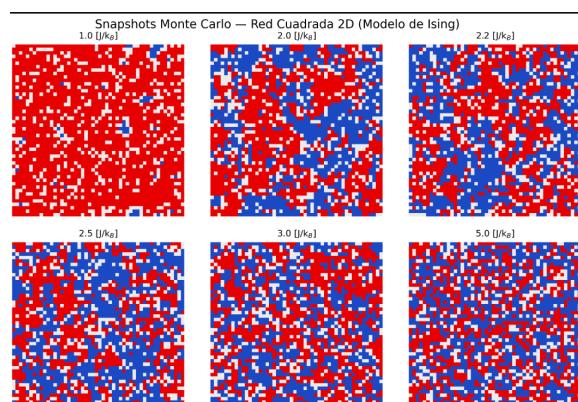
Por último se puede observar cómo varía el sistema en un momento dado, en particular qué sucede en esos momentos en los que la temperatura aumenta.



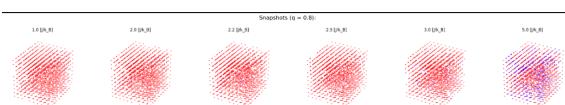
**Figura 21.** Snapshot ( $J = 1$ ) de una red de tipo lineal.



**Figura 22.** Snapshot ( $J = 1$ ) de una red de tipo panal.



**Figura 23.** Snapshot ( $J = 1$ ) de una red de tipo cuadrada.



**Figura 24.** Snapshot ( $J = 1$ ) de una red de tipo cúbico.

Claramente se nota que a medida que se aumenta la temperatura del sistema se va aumentando la cantidad de "desorden."º no alineamiento de los espines que aportan a la magnetización intrínseca del sistema. Es claro que en todos los sistemas tratados con anterioridad presentarán las mismas características.

## 4 Conclusiones

En este trabajo se ha implementado el método de Monte Carlo con dinámica de Metropolis para simular el modelo de Ising en diferentes redes como lo son lineal, de tipo panal, cuadrada y cúbica. Considerando variaciones en la dilución magnética  $q$  y la temperatura  $T$ , tanto en regímenes paramagnéticos como ferromagnéticos.

En el caso paramagnético, se confirma que la magnetización sigue una dependencia simétrica con el campo magnético externo  $H$ , ajustándose perfectamente a la expresión de  $m = q \tanh(H/T)$ , independientemente de la estructura de la red. Esto resalta la independencia de los espines en ausencia de interacciones, donde la topología (número de coordinación  $z$ ) no juega un rol relevante. La temperatura reduce la respuesta magnética debido al desorden térmico, alineándose con la ley de Curie, mientras que la dilución  $q$  escala linealmente la amplitud de la magnetización y acelera la termalización del sistema, como se evidencia en las curvas de relajación energética.

Para el régimen ferromagnético, las simulaciones revelan ciclos de histéresis característicos, con magnetización remanente y simetría impar  $m(H) = -m(-H)$ , atribuible al acoplamiento colectivo entre espines. Estos efectos son más pronunciados a bajas temperaturas, donde las fluctuaciones térmicas son mínimas.

Respecto a las transiciones de fase, se observa que la temperatura crítica  $T_c$  aumenta con el número de coordinación  $z$  y la dilución  $q$ , siguiendo una relación aproximada  $T_c \propto zqJ$ . En particular, la red lineal (1D) no exhibe transición de fase a temperatura finita, coincidiendo con la teoría analítica, mientras que las redes de mayor dimensionalidad muestran una clara transición de ferromagnético a paramagnético, con la magnetización espontánea disminuyendo gradualmente hasta cero al incrementar  $T$ .

Los snapshots ilustran cómo el aumento de la temperatura induce mayor desorden en la alineación de los espines, reduciendo la magnetización intrínseca en todas las configuraciones, lo que subraya el impacto universal del ruido térmico en las interacciones locales.

## Referencias

- [1] Oliver Gutfleisch, Matthew A. Willard, Ekkes Brück, Christina H. Chen, S. G. Sankar, and J. Ping Liu. Magnetic materials and devices for the 21st century: Stronger, lighter, and more energy efficient. *Advanced Materials*, 23(7):821–842, 2011.
- [2] Stephen G. Brush. History of the lenz-isng model. *Reviews of Modern Physics*, 39(4):883–893, 1967.
- [3] Hugo Duminil-Copin. 100 years of the (critical) isng model on the hypercubic lattice. In *Proceedings of the International Congress of Mathematicians (ICM) 2022, Vol. 1*, page –. EMS Press / International Mathematical Union, 2022. Preliminary version available at arXiv:2208.00864.
- [4] Barry M. McCoy and Jean-Marie Maillard. The importance of the isng model. *Progress of Theoretical Physics*, 127(5):791–817, 2012.
- [5] Hugo Duminil-Copin. Lectures on the isng and potts models on the hypercubic lattice. Technical report, Institut des Hautes Études Scientifiques & Université de Genève, France / Switzerland, 2017. Lecture notes of a class given at the PIMS-CRM Summer School in Probability, June 2017.
- [6] Andrew Lucas. Isng formulations of many np problems. *Frontiers in Physics*, 2:5, 2014. arXiv:1302.5843v3.
- [7] Yoshihisa Yamamoto, Kazuyuki Aihara, Timothée Leleu, Ken ichi Kawarabayashi, Satoshi Kako, Martin Fejer, Kyo Inoue, and Hiroki Takesue. Coherent isng machines—optical neural networks operating at the quantum limit. *npj Quantum Information*, 3(49), 2017.
- [8] Yoshihisa Yamamoto. The future of problem solving: The coherent isng machine approach. *NTT Technical Review*, 20(1):16–19, 2022.
- [9] Farnoosh Khosravi, Mathieu Perreault, Axel Scherer, and Pooya Ronagh. Coherent isng machines: The good, the bad, the ugly. *Preprint*, 2025. Available on ResearchGate and arXiv.
- [10] G. M. Viswanathan. What does it take to solve the 3d isng model? minimal necessary conditions for a valid solution. *Entropy*, 24(11):1665, 2022.
- [11] J. Ostmeyer. The isng model with hybrid monte carlo. *Physics Letters A*, 386:126872, 2021.
- [12] Tianshu Gu. Monte carlo simulation of phase transition in classical isng model. *HSET (Higher School of Engineering Technologies) Journal*, 64(8), 2023.
- [13] Kurt Binder and Erik Luijten. Monte carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in isng models (invited review). *Physics Reports*, 344(2-3):179–253, 2001. Invited review on Monte Carlo and critical phenomena.

- [14] Johans Restrepo Cárdenas. *Física Estadística: Teoría, Algoritmos y Problemas*. Profesor del Instituto de Física, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia. Más de 20 años de docencia en Física Estadística.
- [15] Konstantin K. Likharev. 4.5: Modelo ising - resultados exactos y numéricos. In *Posgrado Esencial Física - Mecánica Estadística*. LibreTexts Español, 2024.
- [16] Chen Ning Yang. The spontaneous magnetization of a two-dimensional ising model. *Physical Review*, 85(5):808–816, 1952.
- [17] Raj K. Pathria and Paul D. Beale. *Statistical Mechanics*. Elsevier/Academic Press, 3rd edition, 2011.
- [18] Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 1953.