

# Modelo de Ising. Estudio de exponentes críticos y teoría de tamaño finito de variables termodinámicas

David Jesús Árbol Guerrero

8 de julio de 2023

## Resumen

Se simula una red cuadrada 2D de espines en interacción según el modelo de Ising para estudiar la transición de fase ferromagnética-paramagnética. Mediante cálculos computacionales se obtienen resultados sobre la energía del sistema, magnetización, susceptibilidad magnética, calor específico, función de correlación y longitud de correlación cerca de la temperatura crítica y en las fases ferromagnética y paramagnética. Se estudia la dependencia con la temperatura, evolución temporal, temperatura crítica y exponentes críticos. Todo esto se analiza cualitativa y cuantitativamente con el apoyo de la teoría de cambios de fase de Ehrenfest en Termodinámica y Mecánica Estadística. Finalmente, se estudia el efecto del tamaño finito del sistema.

## 1 Introducción

El modelo de Ising es una herramienta fundamental en la física estadística para estudiar la magnetización y el comportamiento colectivo de sistemas magnéticos. Fue nombrado en honor a Ernst Ising, quien propuso este modelo en la década de 1920. Ha sido ampliamente utilizado para comprender fenómenos como la transición de fase y el ordenamiento magnético en materiales por ser uno de los pocos modelos con solución analítica. Concretamente, la solución en 1D fue derivada por Ernst Ising y la de 2D, por Lars Onsager.

En este trabajo se contempla el modelo 2D y mediremos varias magnitudes termodinámicas en función de la temperatura con un tratamiento computacional-estadístico, describiéndose el efecto del tamaño finito del sistema dentro de la *teoría tamaño finito*. Finalmente se calculan los *exponentes críticos* y la *temperatura crítica* de cambio de fase de un sistema ferromagnético a paramagnético para cada magnitud.

## 2 Fundamento teórico

### 2.1 Modelo de Ising

El modelo de ising 2D se define en una red cuadrada 2D  $N \times N$  con condiciones de contorno periódicas. Cada posición, caracterizada por el par  $(i, j)$ , con  $i, j \in \{1, \dots, N\}$ , se identifica con una partícula, que tiene espín  $s_{ij} = \pm 1$  [1, 2].

La energía de interacción de los espines del sistema para una configuración  $S$  se define como:

$$E(S) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s(i, j) [s(i, j+1) + s(i, j-1) + s(i+1, j) + s(i-1, j)] \quad (2.1)$$

supuesto el campo magnético  $B$  nulo.

Para describir el sistema dentro de la teoría de la Mecánica Estadística se utiliza la colectividad canónica, puesto que se trata de un sistema capaz de intercambiar energía con su entorno (supuesto en contacto con un reservorio térmico a temperatura constante) pero mantiene el número de partículas  $N^2$  y volumen constantes. La probabilidad de que el sistema definido por la colectividad canónica tenga energía  $E(S)$  es:

$$P(S) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(S)} \quad (2.2)$$

siendo  $Z$  la función de partición (con valor igual a la constante de normalización de probabilidad) y  $\beta = 1/(\kappa_B T)$  (siendo  $\kappa_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$ , la temperatura del sistema).

Definimos ahora algunas propiedades macroscópicas de un sistema magnético a partir de la teoría expuesta.

La **magnetización** ( $m_N$ ) es el momento magnético por unidad de volumen. A la hora de calcularse computacionalmente se debe promediar en el tiempo:

$$m_N = \left\langle \frac{1}{N^2} \left| \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s(i, j) \right| \right\rangle \quad (2.3)$$

**Nota 1.** La magnetización total se denota  $M$  y se relaciona con la anterior como  $M = N^2 m_N$ . Es análogo para las demás variables termodinámicas.

La **susceptibilidad magnética** por unidad de volumen es una constante de proporcionalidad adimensional que indica la sensibilidad a la magnetización de un material al que se le aplica un campo magnético. Se define:

$$\chi_N = \frac{1}{N^2 \kappa_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (2.4)$$

El **calor específico** por unidad de volumen es la cantidad de energía que hace falta para subir la temperatura del sistema una unidad de temperatura. Se calcula:

$$c_v = \frac{1}{N^2 \kappa_B T^2} (\langle E(S)^2 \rangle - \langle E(S) \rangle^2) \quad (2.5)$$

La **energía media** por unidad de volumen se calcula:

$$e_N = \frac{1}{N^2} \langle E(S) \rangle \quad (2.6)$$

La **función de correlación** es una función de la distancia, medida en posiciones de la red, que indica la influencia de un espín sobre sus vecinos:

$$f(i) = \frac{1}{N^2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle s(n, m) s(n+i, m) \rangle \quad (2.7)$$

Existe una magnitud estrechamente relacionada con la función de correlación denominada *longitud de correlación* ( $\xi$ ). Se trata de una longitud media a la que los espines se influyen entre sí. Se define [5]:

$$f(r) = C_1 + C_2 e^{-r/\xi} \quad (2.8)$$

Según resultados de termodinámica de transiciones de fase, las variables termodinámicas cerca de la temperatura crítica de cambio de fase  $T_c$  se comportan como:

$$h(T) = A \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^d \quad (2.9)$$

denominándose a  $d$  el exponente crítico, que depende de la variable termodinámica [2].

Utilizando mecánica estadística se puede obtener teóricamente algunos coeficientes anteriores que caracterizan la transición de fase para distintas variables termodinámicas [4]. Según la teoría de Onsager:

$$T_c = \frac{2}{\ln(\sqrt{2} + 1)} \approx 2.269 \quad (2.10)$$

$$m_N \approx 1.2224 \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right)^{1/8} \quad (2.11)$$

$$c_N \approx -0.4945 \left| \frac{T_c - T}{T_c} \right| + \text{cte} \quad (2.12)$$

$$\chi_N \approx \frac{1}{T_c} \begin{cases} C_- \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-7/4} & \text{si } T \leq T_c \\ C_+ \left( \frac{T - T_c}{T_c} \right)^{-7/4} & \text{si } T \geq T_c \end{cases} \quad (2.13)$$

con  $C_- = 0.02554$  y  $C_+ = 0.96258$ .

Así, los coeficientes teóricos son los de la tabla 1.

Tabla 1: Coeficientes teóricos de la transición de fase ferromagnética-paramagnética para  $m_N$ ,  $\chi_N$ ,  $c_N$ .

	$m_N$	$\chi_N$	$c_N$
$A$	1.2224	$A_- = 0.01126$ $A_+ = 0.4242$	-
$d$	1/8	-7/4	0

Es importante saber que se cree que los exponentes críticos  $d$  tienen la propiedad de universalidad: se ha comprobado que numerosos sistemas, en principio muy diferentes entre sí, se comportan cerca del punto crítico como leyes de potencias (2.9) con exponentes críticos iguales. Estos dependen de pocos factores, como las dimensiones o el rango de interacción de las partículas. Así, si se conocen los exponentes críticos en el modelo de Ising 2D, se puede saber el comportamiento de cualquier otro sistema bidimensional cerca del punto crítico [4].

### 2.1.1 Teoría de transiciones de fase

Existe **clasificación de cambios de fase** propuesta por *Ehrenfest* según la continuidad de las primeras derivadas del potencial químico  $\mu$  en el punto crítico (en la transición) [2]. El cambio de fase se dice de orden  $n$  si  $\mu$  y sus primeras  $n - 1$  derivadas son continuas y su derivada  $n$ -ésima es discontinua. Así, se puede demostrar que la transición ferromagnética a paramagnética es de segundo orden.

- **Transición de primer orden:**  $\Delta\mu = 0$ ,  $\Delta s \neq 0$ ,  $\Delta v \neq 0$ .
- **Transición de segundo orden:**  $\Delta\mu = 0$ ,  $\Delta s = 0$ ,  $\Delta v = 0$ ,  $\Delta\alpha \neq 0$ ,  $\Delta\kappa_T \neq 0$ ,  $c_P \neq 0$ .  
(Y también  $\Delta\beta \neq 0$ ,  $\Delta\kappa_s \neq 0$ ,  $\Delta c_v \neq 0$ )

Esto se debe a que  $d\mu = -sdT + vdP$ :

Las derivadas primeras son:

$$\left( \frac{\partial\mu}{\partial T} \right)_P = -s \quad \left( \frac{\partial\mu}{\partial P} \right)_T = v \quad (2.14)$$

Las segundas:

$$\alpha = \frac{1}{v} \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_P \quad \kappa_T = -\frac{1}{v} \left( \frac{\partial v}{\partial P} \right)_T \quad c_P = T \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_P \quad (2.15)$$

$$\beta = \frac{1}{P} \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_v = \frac{1}{P} \left( \frac{\partial s}{\partial v} \right)_T \quad \kappa_s = -\frac{1}{v} \left( \frac{\partial v}{\partial P} \right)_s \quad c_v = T \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_v \quad (2.16)$$

De estas variables sólo estudiaremos  $c_v$ . Se comprobará si el modelo de Ising es coherente con los experimentos que apoyan que la transición de fase ferromagnética-paramagnética es de segundo orden. Se observa el comportamiento en la figura 1 .

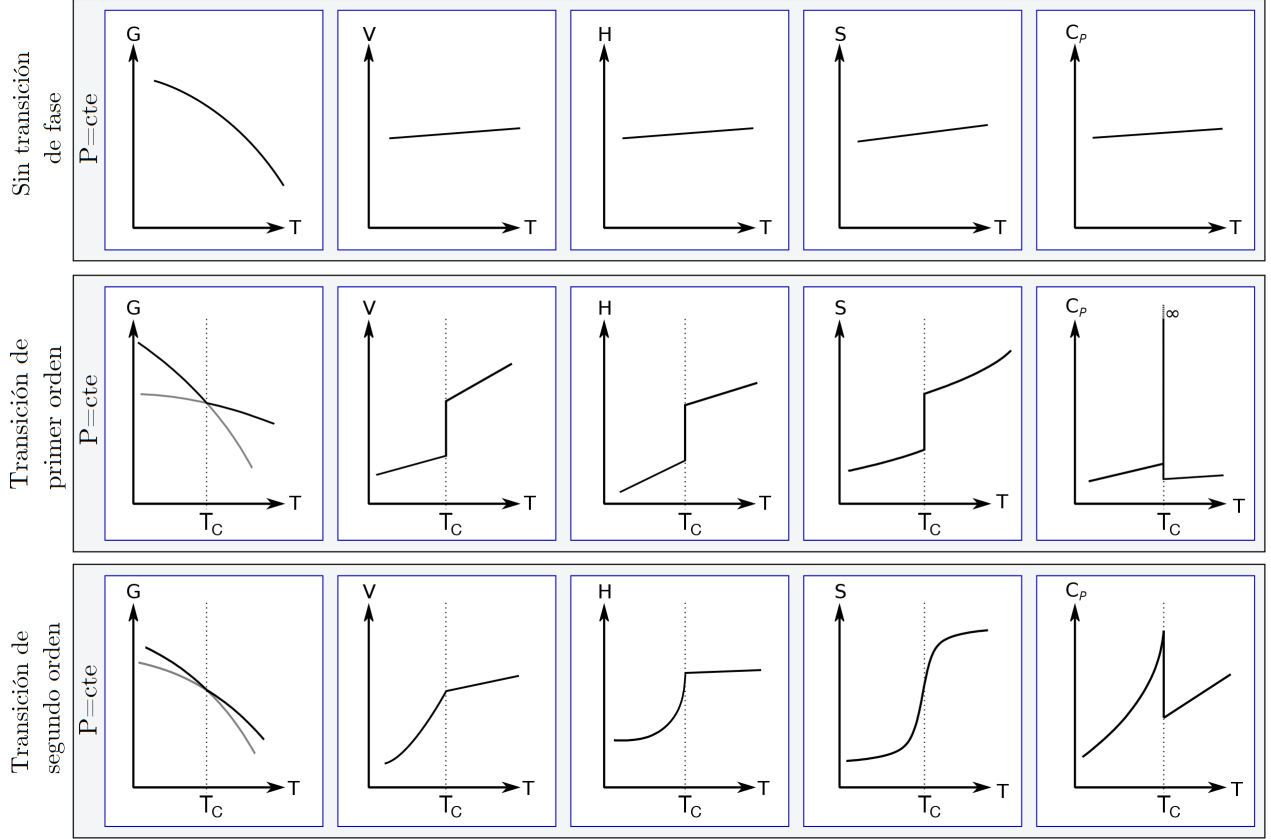


Figura 1: Comportamiento de distintas variables termodinámicas en una transición de fase.

Por último, es importante comentar en qué consiste una **transición**  $\lambda$ . Este tipo no entra en la clasificación de Ehrenfest, quien no contemplaba la divergencia de las variables, sino únicamente saltos finitos. Son transiciones tales que:

$$\Delta\mu = 0 \quad \Delta s = 0 \quad \Delta v = 0 \quad \Delta\alpha \rightarrow \infty \quad \Delta\kappa_T \rightarrow \infty \quad \Delta c_P \rightarrow \infty \quad (2.17)$$

e igualmente:

$$\beta \rightarrow \infty \quad \Delta\kappa_s \rightarrow \infty \quad \Delta c_v \rightarrow \infty \quad (2.18)$$

Se obtiene así un comportamiento en  $c_P$  (y  $c_v$ ) característico en forma de  $\lambda$  que da nombre a la transición (ver figura 2).

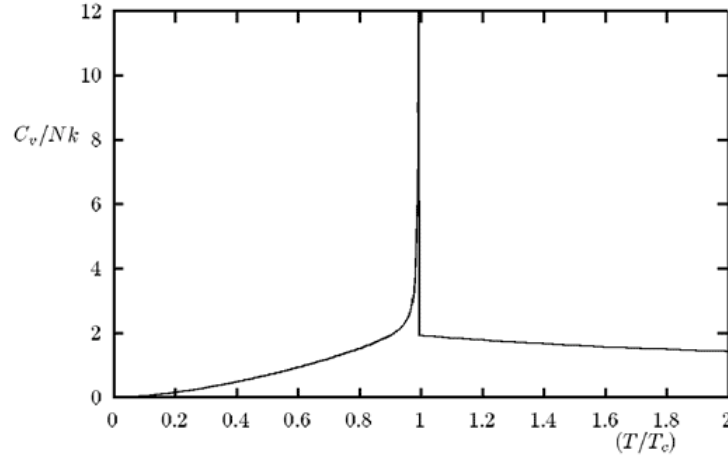


Figura 2: Comportamiento de  $c_v$  en una transición  $\lambda$ .

Cabe destacar que la clasificación de Ehrenfest puede definirse de forma equivalente con la *energía libre de Helmholtz* análogamente a lo explicado antes [4]. Se puede demostrar que:

$$M = - \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} \right)_T \quad \chi = \left( \frac{\partial M}{\partial B} \right)_T \quad (2.19)$$

de modo que  $M$  debe ser continua en el punto crítico (es una derivada primera) pero  $\chi$  será discontinua (es una derivada segunda).

## 2.2 Teoría de tamaño finito

La *teoría de tamaño finito* explica el comportamiento atípico de las variables termodinámicas en el punto crítico de una transición de fase en sistemas con un tamaño finito. Esto hace referencia a volumen finito, o número pequeño de partículas o grados de libertad, en definitiva, cuando no se ha alcanzado satisfactoriamente el límite termodinámico. En el modelo de Ising se puede estudiar esta fenomenología tomando un número pequeño de  $N$ , indicador del tamaño del sistema.

## 2.3 Algoritmo de Metropolis

Para analizar computacionalmente la evolución del sistema introducido en el apartado anterior, se utilizan métodos numéricos aproximados: existen  $2^N$  estados posibles de la red  $N \times N$  y es inabarcable para  $N$  grandes. Por ello se utiliza el algoritmo de Metropolis (1953) desarrollado dentro de la teoría de *cade-nas de Markov*, teoría de evolución de probabilidad a pasos, discreta. Una vez escogida la configuración inicial de espines se procede [1]:

1. Se elige aleatoriamente un espín  $(i, j)$  y se evalúa la probabilidad de cambio de su espín en el siguiente paso:

$$T(X \rightarrow X') = \min(1, e^{\beta[E(X') - E(X)]}) \quad (2.20)$$

2. Se genera un número aleatorio uniforme  $u$  según  $U[0, 1]$ . Si  $u < T(X \rightarrow X')$  se cambia el espín.

**Nota 2.** Se puede calcular que la diferencia de energía de los estados  $X$  y  $X'$  viene dada por:

$$\Delta E = 2s(n, m)[s(n+1, m) + s(n-1, m) + s(n, m+1) + s(n, m-1)] \quad (2.21)$$

**Nota 3.** En cada iteración del algoritmo puede cambiarse un único espín, por la unidad de tiempo básica equivale a realizar  $N^2$  intentos de cambio. Esto es lo que llamamos **paso Monte Carlo** (pMC).

### 3 Resultados y discusión

Se realizan simulaciones para distintos tamaños del sistema  $N = 16, 32, 64, 128$  y once temperaturas distintas  $T = 1.5, 1.8, 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5, 2.8, 3.1, 3.4, 3.7$  partiendo de una configuración inicial de  $s(i, j) = 1 \forall i, j$ , y se comparan las variables termodinámicas en estos casos.

#### 3.0.1 Magnetización

Se representa la **magnetización en función de la temperatura** para los diferentes tamaños del sistema  $N = 16, 32, 64, 128$  en la figura 3.

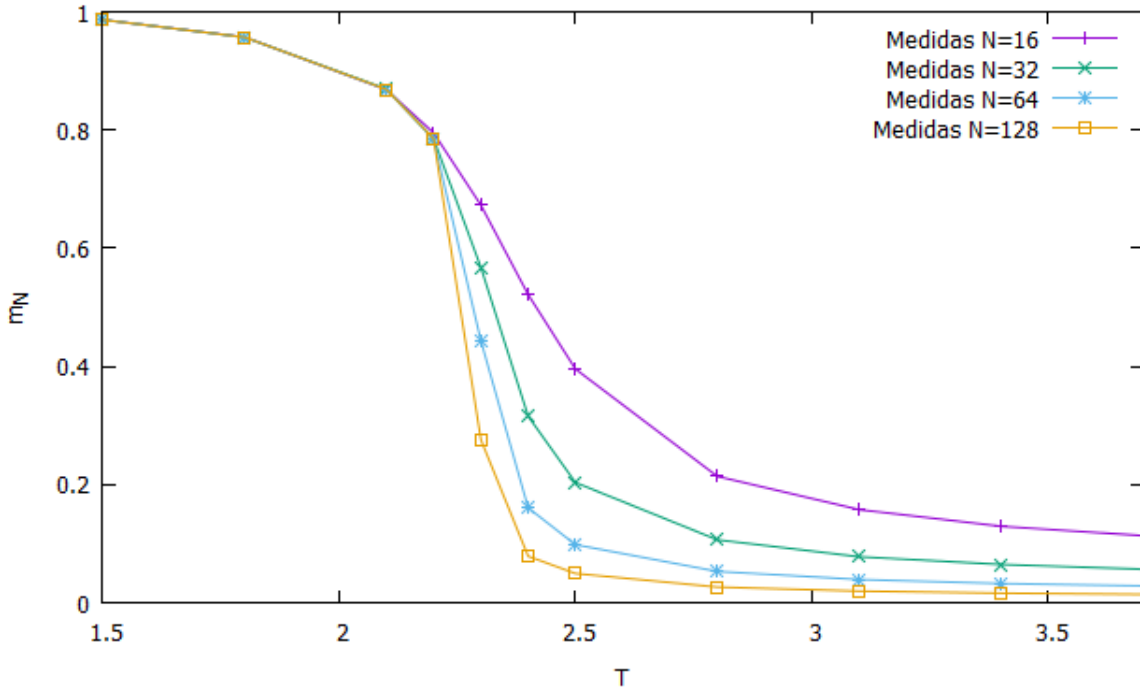


Figura 3: Magnetización en función de la temperatura para  $N = 16, 32, 64, 128$ .

Se observan dos fases bien diferenciadas, una fase activa y otra absorbente según una transición *supercritical pitchfork*. La activa consiste en un sistema con magnetización  $m \approx 1$ , en que los espines están completamente alineados. Cerca de la temperatura crítica teórica  $T_c = 2.269$  sufre el cambio de fase en que drásticamente baja la magnetización a cero a una fase distinta, de magnetización nula  $m \approx 0$ , la fase absorbente. En esta, los espines cambian aleatoriamente y hay un 50 % en cada dirección aproximadamente para maximizar la entropía. Esto resulta en una magnetización nula.

El cambio drástico mencionado se debe a que  $m$  es una variable termodinámica de segundo orden respecto de  $\mathcal{F}$ .

Se muestra también que el cambio es más brusco para tamaños del sistema  $N$  grandes, lo que significa que las mediciones se ajustan mejor a la teoría cuando  $N \rightarrow \infty$ . Esto se debe a que la mecánica estadística explica comportamientos en el límite termodinámico, que requiere un tamaño del sistema grande ( $N \gg 1$ ). Es así que según la teoría,  $m$  debe tener derivada no continua en  $T_c$  por ser una derivada de  $\mathcal{F}$  y justo esto es lo que se obtiene para tamaños grandes.

Un último resultado cuantitativo relevante es que si  $T < T_c$ , el comportamiento no depende del tamaño del sistema, mientras que para  $T > T_c$ , sí depende.

Se obtiene también el **exponente crítico** haciendo un ajuste para  $T < T_c$  según la expresión 2.9 (ver figura 4 y tabla 2). Se realiza para el caso más acorde a la teoría, donde se cumple la condición de límite termodinámico:  $N = 128$ .

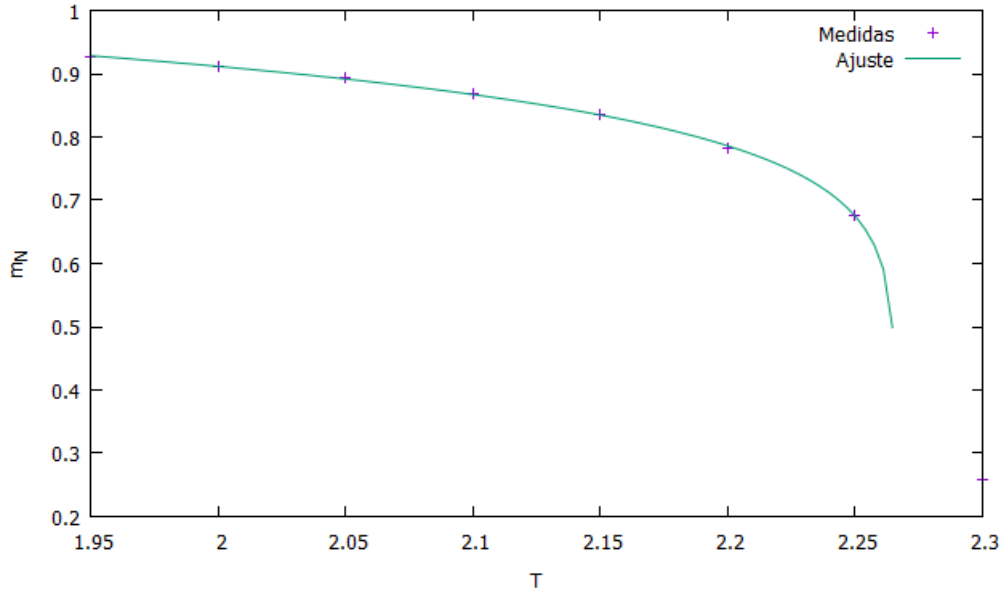


Figura 4: Ajuste del cálculo del exponente crítico de  $m_N$  para  $N = 128$ .

Tabla 2: Ajuste del cálculo del exponente crítico de  $m_N$  para  $N = 128$ .

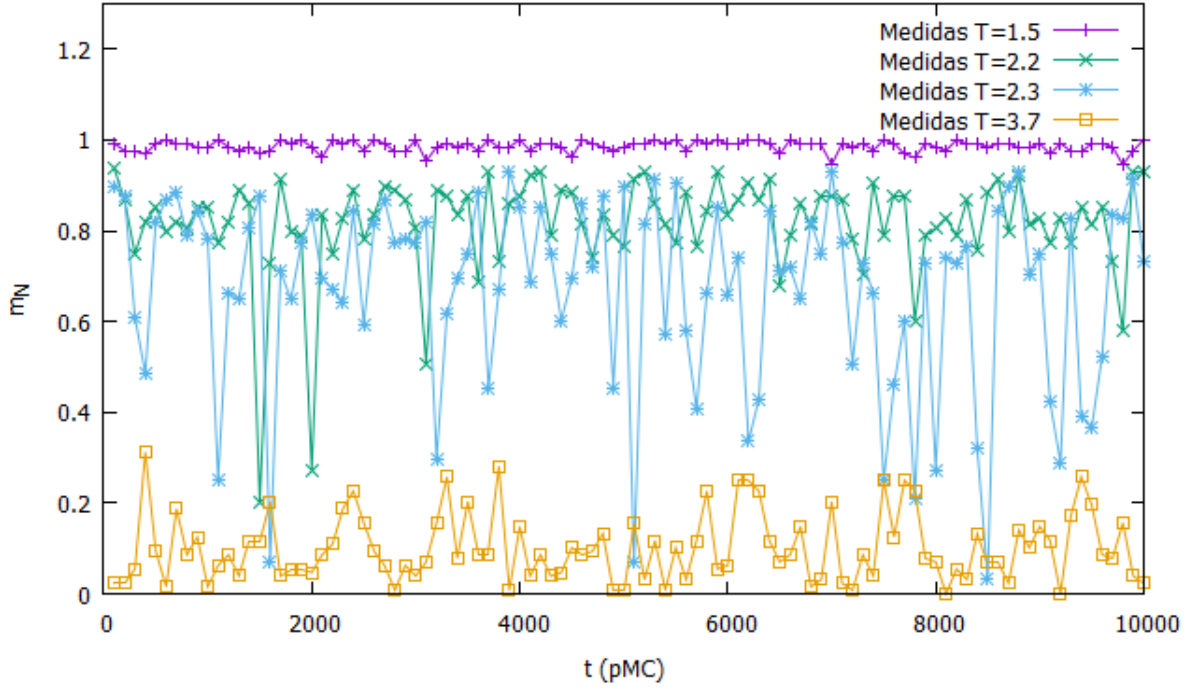
	<b>N = 128</b>	<b>Teórico</b>	$\varepsilon_r$
$A$	$1.144 \pm 0.007$	1.2224	6.4 %
$T_c$	$2.2655 \pm 0.0015$	2.269	0.16 %
$d$	$0.106 \pm 0.003$	1/8	15.2 %

Se tienen resultados muy exactos, por lo que se concluye cuantitativamente que en  $N = 128$  se ha alcanzado el límite termodinámico. Se concluye que la temperatura crítica concuerda con la teoría de Onsager.

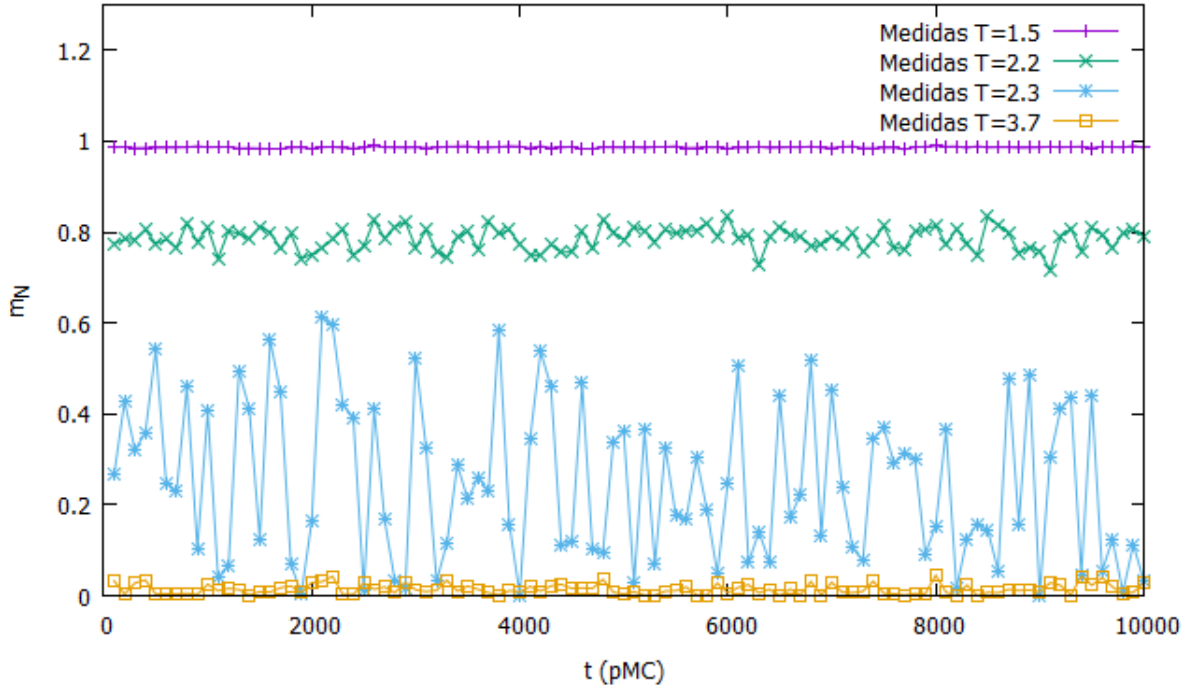
Se muestra ahora **la magnetización media en función del tiempo**, en términos de pasos Montecarlo (pMC), hasta 1000pMC. Se compara la evolución en los casos extremos de tamaños del sistema:  $N = 16$  y  $N = 128$  para temperaturas  $T = 1.5, 2.2, 2.3, 3.7$ .

En ambos casos la magnetización se mantiene constante en el tiempo en  $m \approx 1$  cuando  $T < T_c$ . Para  $T \geq T_c$ , tras el cambio de fase también se mantiene constante con  $m \approx 0$  lo que está dentro de lo esperado. Sin embargo, para temperaturas similares a la crítica  $T \approx T_c$  se tienen oscilaciones que crecen cuanto más cerca está la temperatura del valor crítico, un comportamiento anómalo. Si bien es cierto que en todos los casos, en media, la magnetización disminuye con la temperatura.

Respecto al tamaño de la red, la evolución es similar en ambos casos salvo cerca del punto crítico. La red pequeña  $N = 16$  presenta oscilaciones mucho mayores en la red grande  $N = 128$ . Esto puede deberse a que una red pequeña es más fácil de perturbar que una grande.



(a) Caso  $N = 16$



(b) Caso  $N = 128$

Figura 5: Evolución de la magnetización para  $T = 1.5, 2.2, 2.3, 3.7$  y en los casos  $N = 16$  y  $N = 128$ .



### 3.1 Susceptibilidad magnética

Como se explica en el fundamento teórico, se espera que  $\chi$  tenga un salto finito como consecuencia de que el cambio de fase ferromagnético-paramagnético visualizado en el apartado anterior es de segundo orden. Su **dependencia con la temperatura** se muestra en 6.

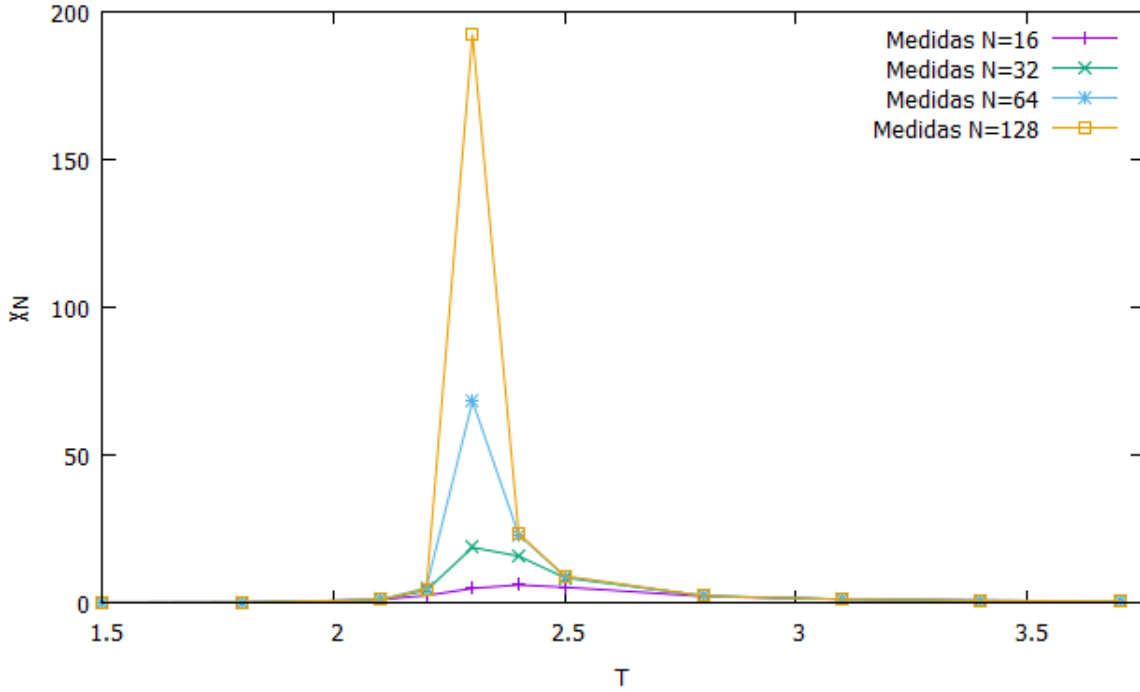


Figura 6: Susceptibilidad magnética en función de la temperatura para  $N = 16, 32, 64, 128$ .

De nuevo se observan comportamientos acordes a la teoría para  $N$  grandes. Si  $N = 64$  y sobre todo si  $N = 128$  el cambio alrededor de  $T_c$  se asemeja a un salto finito como el de la transición de fase de segundo orden de 1. Además, la tendencia es  $\chi(T_c) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \infty$  lo que indica que en este límite se tiene una transición de fase tipo  $\lambda$ . Se destaca la gran similitud del caso  $N = 128$  con la forma teórica de la figura 2.

Es interesante darse cuenta de que cuanto más brusco es la transición de fase de  $m$  más picuda es  $\chi$  en este punto. Esto confirma la relación de derivada discontinua de  $\chi$  con  $m$ .

Se estudia ahora el **exponente crítico** para el caso  $N = 128$ , que es el caso de interés porque satisface la condición de límite termodinámico.

Tabla 3: Ajuste del cálculo del exponente crítico de  $\chi_N$  para  $N = 128$ .

	<b>N = 128</b>	<b>Teórico</b>	$\varepsilon_r$
$A_-$	$0.00493 \pm 0.00024$	0.01126	26.22 %
$T_c$	$2.2820 \pm 0.0006$	2.269	0.57 %
$d$	$-2.09 \pm 0.019$	$-7/4$	16.27 %

En esta ocasión también se consiguen resultados muy exactos, salvo para factor multiplicativo  $A_-$ . Esto puede deberse a la poca cantidad de datos que se usaron para hacer el ajuste (7), sumado a que se necesitaba mucho tiempo de cómputo para conseguir estos datos, por lo que no era posible obtener más. De nuevo se consigue una temperatura crítica muy exacta.

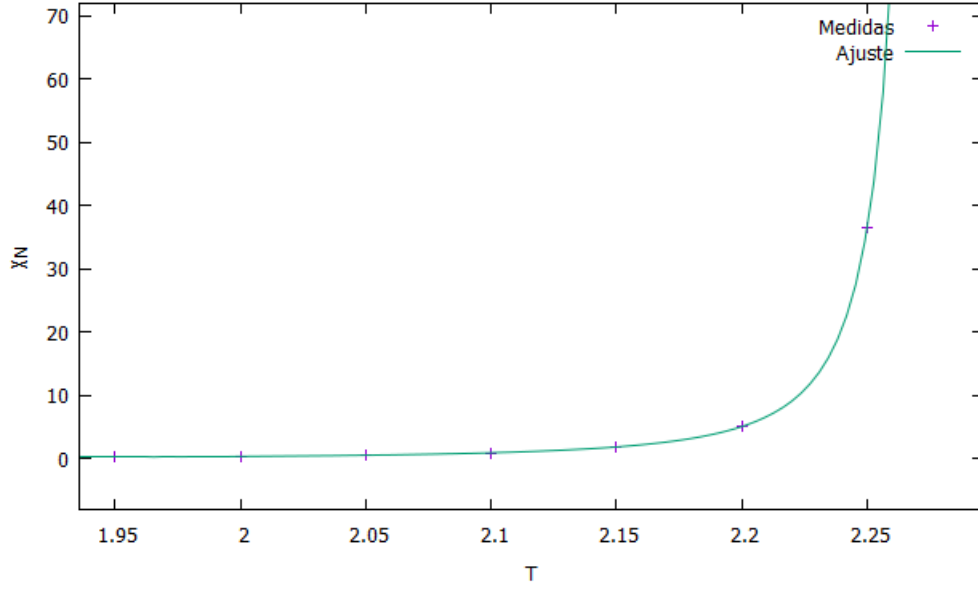


Figura 7: Ajuste del cálculo del exponente crítico de  $\chi_N$  para  $N = 128$ .

### 3.2 Energía

La dependencia de la **energía con la temperatura** es la de la figura 8.

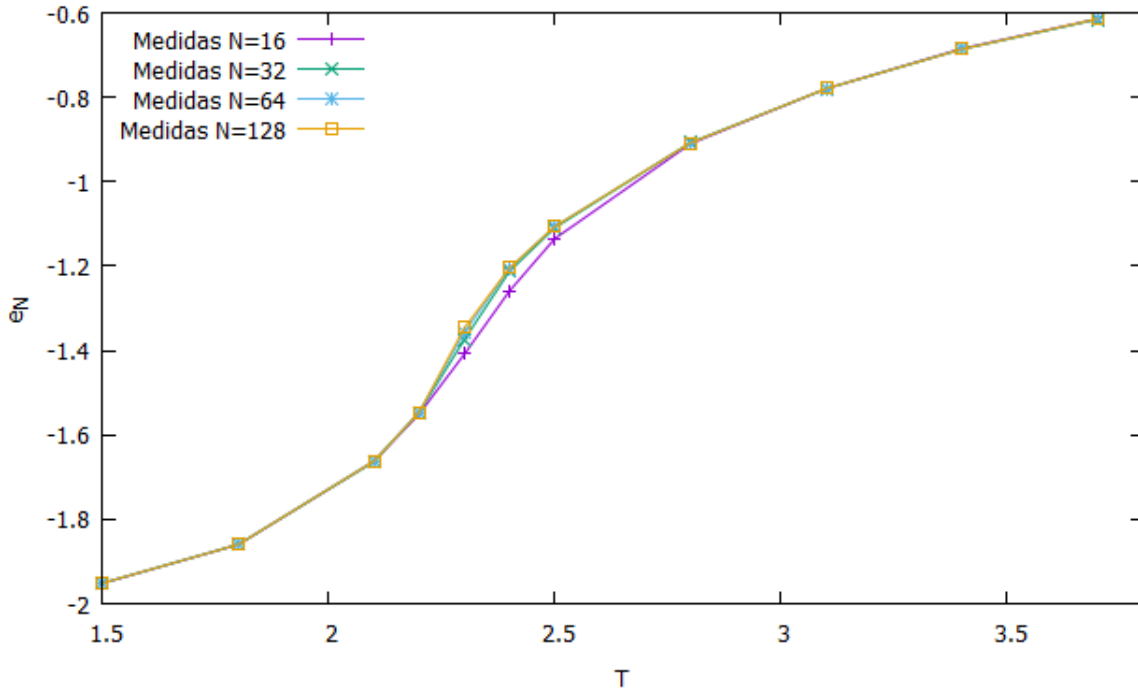
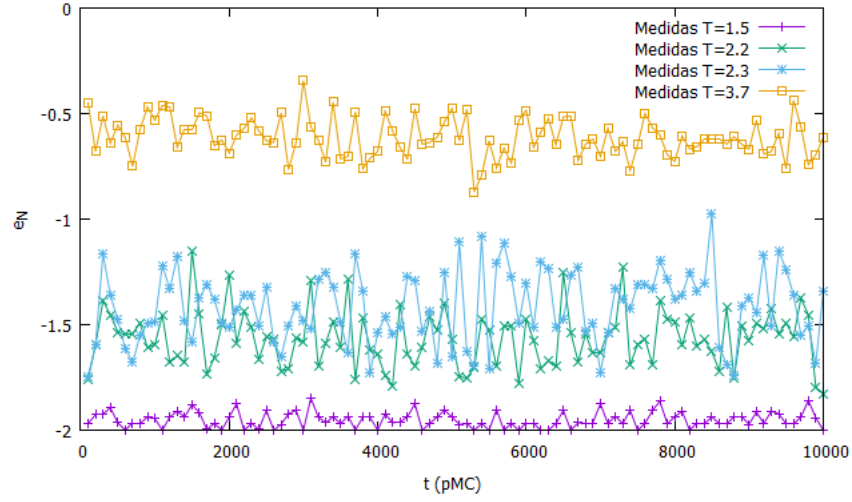


Figura 8: Energía en función de la temperatura para  $N = 16, 32, 64, 128$ .

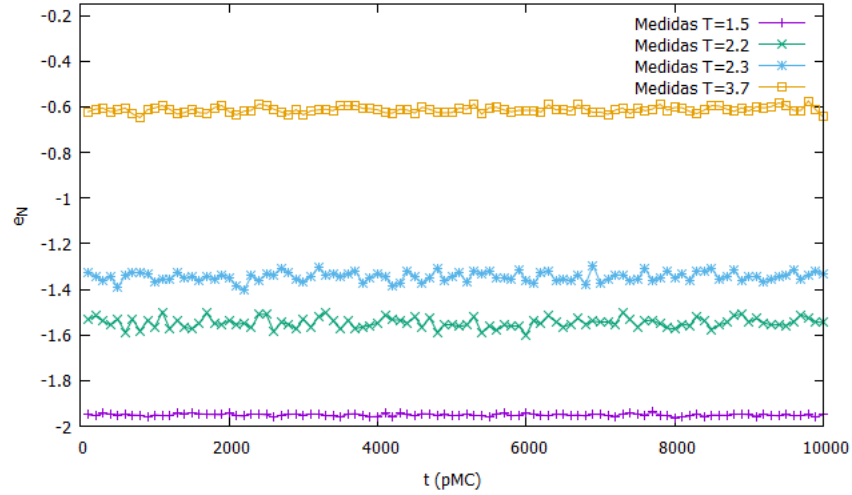
El comportamiento es similar independientemente de la temperatura y se concluye que la energía por unidad de volumen no depende del tamaño de la red. Aun así, cerca de  $T_c$  hay una discrepancia muy poco apreciable, que da cuenta de la diferencia en el comportamiento del calor específico en el

punto crítico. Presenta un punto de inflexión en  $T \approx T_c$ .

La **evolución de la energía con el tiempo** para temperaturas  $T = 1.5, 2.2, 2.3, 3.7$  y tamaños  $N = 16$  y  $N = 128$  se visualiza en la figura 9.



(a) Caso  $N = 16$



(b) Caso  $N = 128$

Figura 9: Evolución de la energía para  $T = 1.5, 2.2, 2.3, 3.7$  y en los casos  $N = 16$  y  $N = 128$ .

De nuevo hay oscilaciones cerca de  $T_c$ , mucho mayores en el caso de red pequeña  $N = 16$ . Presenta energías constantes en los límites  $T < T_c$  y  $T > T_c$  siendo la energía en el primer caso menor que la del segundo, lo esperado. Esto es análogo a la evolución de la magnetización.

### 3.3 Calor específico

El calor específico puede verse como una **función de la temperatura** (manteniendo otras variables termodinámicas constantes) según la figura 10.

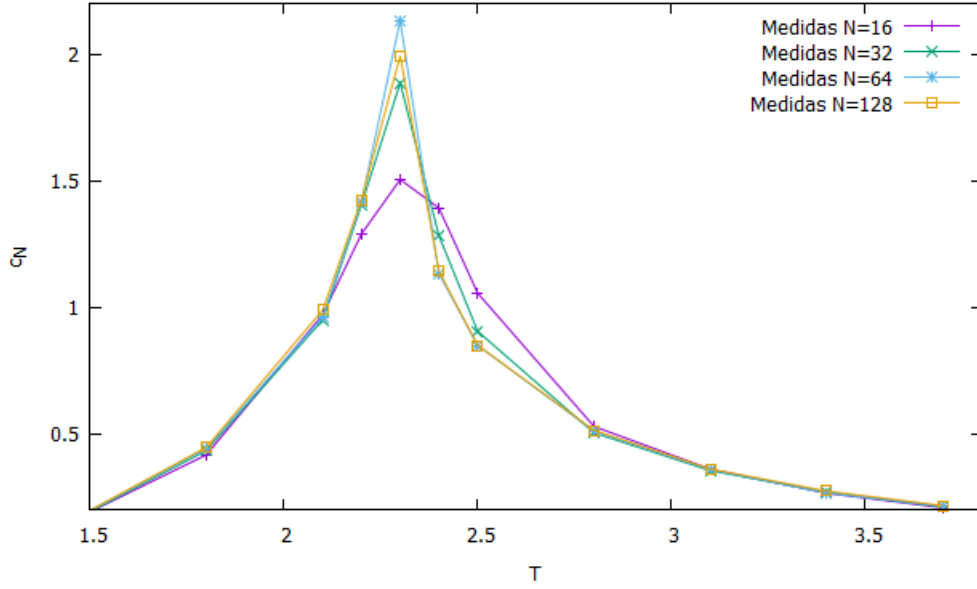


Figura 10: Calor específico en función de la temperatura para  $N = 16, 32, 64, 128$ .

Las relaciones de  $c_N$  con  $e_N$  y  $\chi$  con  $m_N$  son análogas e igualmente se observa el comportamiento de una variable termodinámica que es derivada segunda de la energía libre de Helmholtz  $\mathcal{F}$ . Se tiene lo que para tamaños mayores sería una discontinuidad más acusada. Como ocurre para  $\chi$ ;  $c_N(T_c) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \infty$  pudiéndose asemejar  $c_N$  también en este límite, a una transición  $\lambda$  (ver figura 2).

El **valor máximo** de  $c_N$  se ha calculado en  $T = 2.3$ , valor más próximo al crítico y sus valores se muestran en la tabla 4. Así, aproximadamente, cuando  $N > 64$ ,  $c_{N,m\acute{a}x} = c_N(T_c) \approx 2.133$ .

Tabla 4: Valores máximos del calor específico para  $N = 16, N = 32, N = 64, N = 128$ .

	$N = 16$	$N = 32$	$N = 64$	$N = 128$
$c_{N,m\acute{a}x}$	1.504	1.886	2.133	1.993

Como ocurría con  $\chi$  los valores en el punto crítico divergen cuando  $N \rightarrow \infty$  salvo posibles errores computacionales. Observamos una pequeña anomalía en  $N = 128$ , aunque se trata posiblemente de un defecto en las aproximaciones de nuestro algoritmo y de que  $T_c \neq 2.3$ . Se tiene también que la divergencia con  $N$  es mucho más lenta que para  $\chi$ . Esto concuerda con la teoría, que nos dice que  $c_N$  diverge como  $\sim \log(N)$ .

El **exponente crítico** para el caso  $N = 128$ , el caso que satisface la condición de límite termodinámico, se recoge en la figura 11 y la tabla 5.

Tabla 5: Ajuste del cálculo del exponente crítico de  $c_N$  para  $N = 128$ .

	<b>N = 128</b>	<b>Teórico</b>	$\varepsilon_r$
$A$	$0.170 \pm 0.021$	—	— %
$T_c$	$2.331 \pm 0.014$	2.269	2.7 %
$d$	$-0.758 \pm 0.07$	0	— %

Aunque el exponente crítico no es nulo, ciertamente se encuentra cerca de este valor. Además se tiene el valor de  $T_c$  muy exacto como en los casos anteriores.

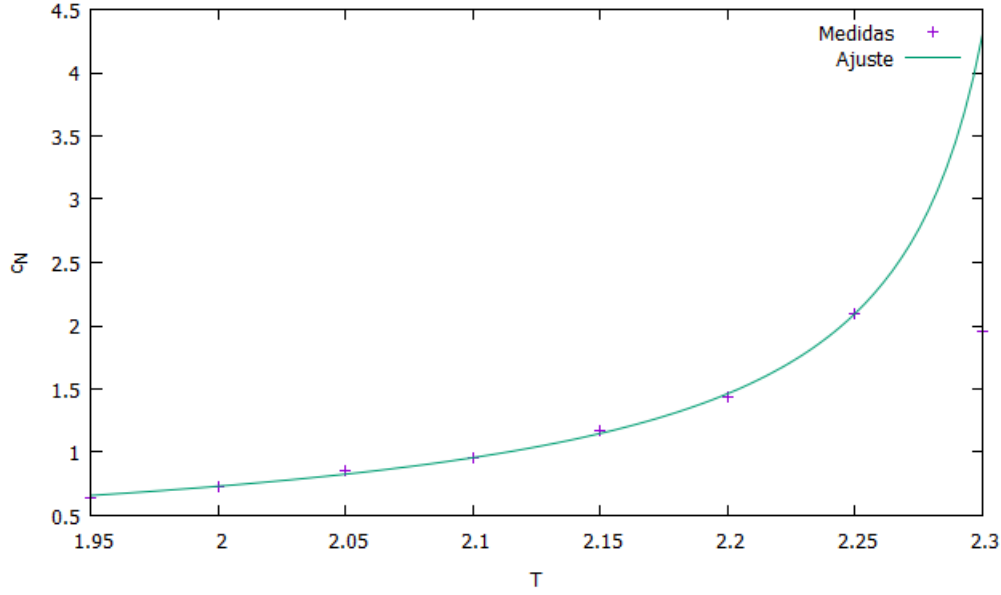


Figura 11: Ajuste del cálculo del exponente crítico de  $c_N$  para  $N = 128$ .

### 3.4 Función de correlación

La representación de la función de correlación en función del tiempo se recoge en la figura 12 para temperaturas  $T = 1.5, 2.2, 2.3, 3.7$ .

Se deduce que para  $T < T_c$  la función de correlación permanece constante y a partir de  $T \approx T_c$  comienza a decrecer. Finalmente, si  $T > T_c$  la función de correlación se anula. Esto da cuenta de que en la fase paramagnética  $T < T_c$  todos los espines están alineados y por ello se influyen más unos a otros. Como veremos, esto implica una longitud de correlación  $\xi \rightarrow \infty$ . En cambio, en la fase ferromagnética los espines cambian de forma aleatoria y no tienen influencia los unos en los otros:  $\xi \approx 0$ .

Al compararse los tamaños extremos en la figura 13 se tiene que la función de correlación no depende del tamaño del sistema. La variación en  $T = 2.3$  se debe a las grandes fluctuaciones que sufre el sistema cerca de  $T_c = 2.269$ .

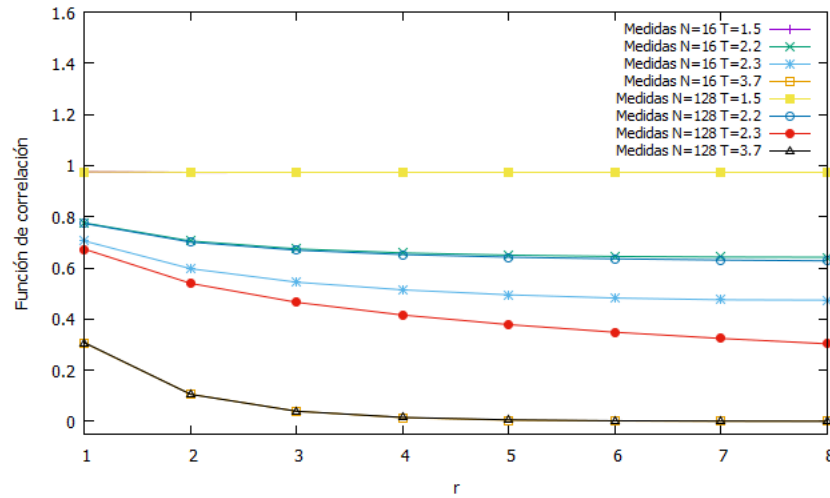
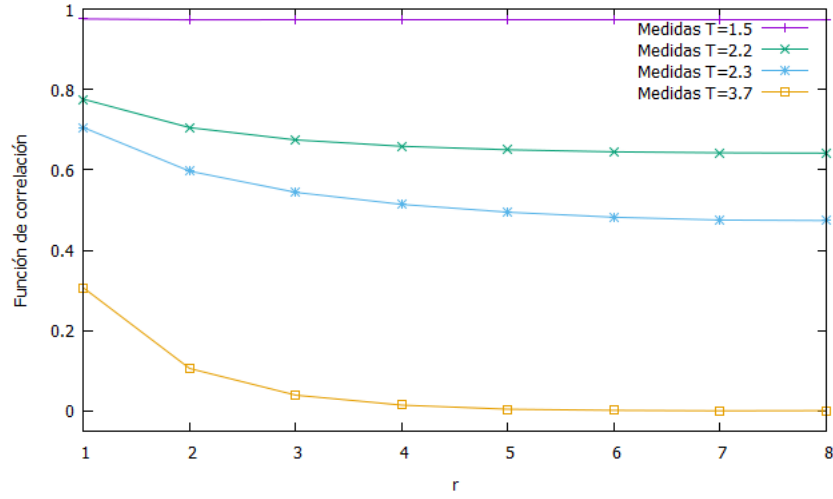
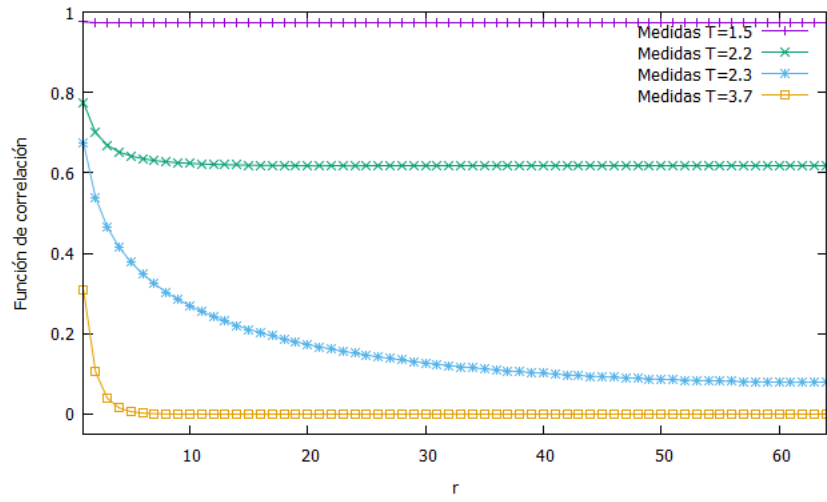


Figura 13: Comparación de la función de correlación para  $N = 16$  y  $N = 128$ .



(a) Caso  $N = 16$



(b) Caso  $N = 128$

Figura 12: Evolución de la función de correlación para  $T = 1.5, 2.2, 2.3, 3.7$  y en los casos  $N = 16$  y  $N = 128$ .

### 3.5 Longitud de correlación

Según la expresión (2.8) se realiza un ajuste a las gráficas anteriores para obtener la longitud de correlación. Se hace para  $N = 128$  únicamente porque, como se observó en el apartado anterior  $f(r)$  no depende del tamaño del sistema. El ajuste se muestra en la figura 14 y la tabla 6.

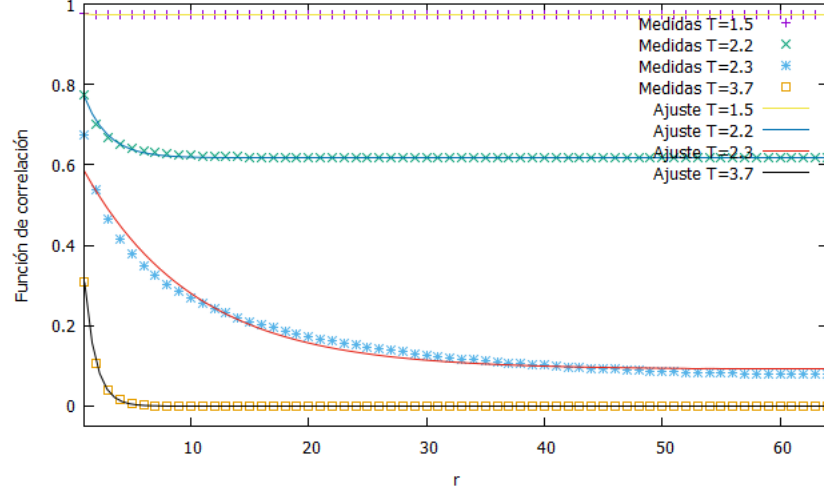


Figura 14: Ajuste de  $f(r)$  para el cálculo de la longitud de correlación para  $T = 1.5, 2.2, 2.3, 3.7$ .

Tabla 6: Ajuste para el cálculo de las longitudes de correlación  $T = 1.5, 2.2, 2.3, 3.7$ .

	$T = 1.5$	$T = 2.2$	$T = 2.3$	$T = 3.7$
$C_1$	$0.97312 \pm 0.0000021$	$0.6175 \pm 0.0003$	$0.092 \pm 0.004$	$(3 \pm 7) \cdot 10^{-5}$
$C_2$	$0.0251 \pm 0.0018$	$0.246 \pm 0.006$	$0.547 \pm 0.013$	$0.872 \pm 0.004$
$\xi$	$0.424 \pm 0.013$	$2.03 \pm 0.05$	$9.4 \pm 0.4$	$0.95702 \pm 0.004$

Las longitudes de correlación se comportan como (2.9) cerca del punto crítico y concretamente esta variable termodinámica diverge en  $T_c$  por eso aumenta cerca de la temperatura crítica, por lo que su exponente crítico será negativo. La dificultad en el ajuste para  $T = 2.3$  puede deberse a esto.

Para temperaturas cercanas a  $T_c$  se tendrá un sistema con  $\xi \rightarrow \infty$ , lo que quiere decir que la orientación de un espín influencia a otros espines a distancias arbitrariamente lejanas. Así, todo espín es muy sensible al alineamiento con cualquier otro espín. Esto es lo que provoca que  $e_N$  y  $m_N$  fluctúen tanto en el tiempo para temperaturas cercanas a  $T_c$ , como vimos.

Por el contrario, lejos de  $T_c$  se tienen  $\xi \approx 0$ , es decir, el cambio de un espín no afecta en gran medida a los demás, por lo que se mantiene una fase estable ya sea paramagnética ( $T > T_c$ ) o ferromagnética ( $T < T_c$ ).

Para calcular **exponentes críticos de la longitud de correlación** se necesita su comportamiento cerca de  $T_c$  para muchos valores, por lo que se mide en  $T = 1.95, 2.00, 2.05, 2.10, 2.15, 2.20, 2.25$ . Los resultados, calculados según (2.8) se muestran en las figuras 15 y 16 y las tablas 7 y 8.

Primero se calcula  $\xi(T)$ :

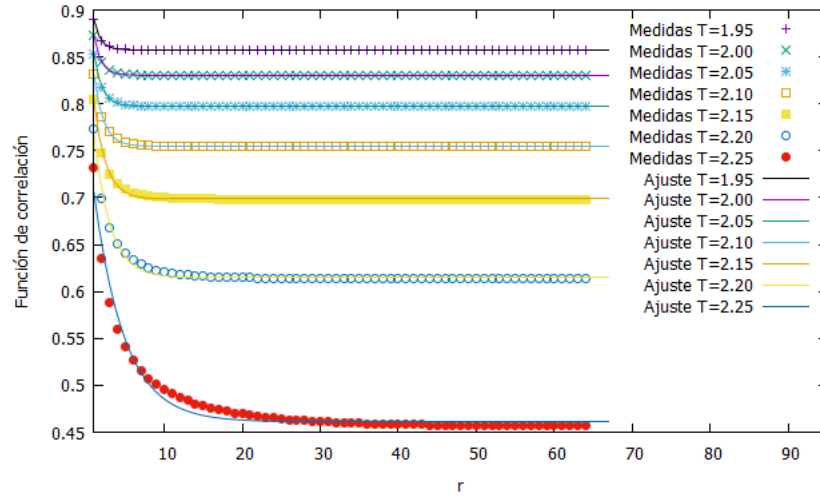


Figura 15: Ajustes de  $f(r)$  para el cálculo de la longitud de correlación para  $T = 1.95, 2.00, 2.05, 2.10, 2.15, 2.20, 2.25$ .

Tabla 7: Ajuste para el cálculo de las longitudes de correlación  $T = 1.5, 2.2, 2.3, 3.7$ .

	$T = 1.95$	$T = 2.00$	$T = 2.05$	$T = 2.10$	$T = 2.15$	$T = 2.20$	$T = 2.25$
$C_1$	$0.857692 \pm 0.000011$	$0.830657 \pm 0.000020$	$0.79732 \pm 0.00003$	$0.75483 \pm 0.00007$	$0.69867 \pm 0.00014$	$0.6146 \pm 0.0003$	$0.4610 \pm 0.0010$
$C_2$	$0.1069 \pm 0.0010$	$0.1248 \pm 0.0013$	$0.1463 \pm 0.0018$	$0.172 \pm 0.003$	$0.204 \pm 0.004$	$0.247 \pm 0.006$	$0.315 \pm 0.010$
$\xi$	$0.8286 \pm 0.006$	$0.920 \pm 0.008$	$1.039 \pm 0.011$	$1.217 \pm 0.017$	$1.49 \pm 0.03$	$2.08 \pm 0.06$	$3.91 \pm 0.16$

Se observa cómo la longitud de correlación aumenta y divergerá en  $T = T_c$ . De hecho, como se observaba en 6, en  $T = 2.3$ , que es el valor más cercano calculado  $\xi = 9.4 \pm 0.4$ .

Finalmente, se tiene el exponente crítico de  $\xi$  ajustando  $\xi(t)$  a 2.9:

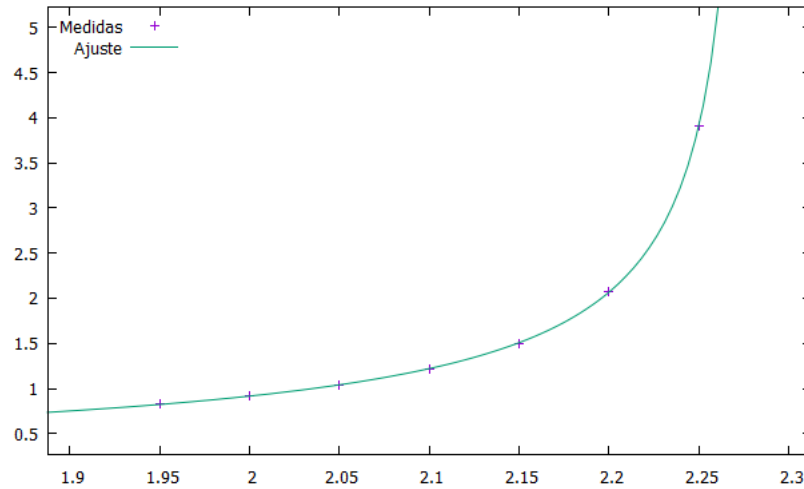


Figura 16: Ajuste de  $\xi(T)$  para el cálculo del exponente crítico con  $N = 128$ .



Tabla 8: Ajuste del cálculo del exponente crítico de  $c_N$  para  $N = 128$ . El exponente teórico se obtiene de [6].

	<b>N = 128</b>	<b>Teórico</b>	$\varepsilon_r$
$A$	$0.234 \pm 0.006$	—	— %
$T_c$	$2.2800 \pm 0.0011$	2.269	0.48 %
$d$	$-0.650 \pm 0.011$	-1	35 %

Se tiene una gran exactitud teniendo en cuenta las grandes dificultades para tratar los datos de la función de correlación  $f(r)$  y que estos resultados fueron los usados para ajustar  $\xi$  y conseguir el exponente crítico.

Se tiene un comportamiento de  $\xi$  similar al de  $\chi$  y  $c_N$  de forma que hay una discontinuidad en el punto crítico que tiende a una transición  $\lambda$  cuando  $N \rightarrow \infty$ .

### 3.6 Aproximamos el valor de la temperatura crítica

Realizando una media en los valores del punto crítico obtenidos a lo largo del trabajo, se tiene:

$$T_c = 2.290 \pm 0.004 \quad (3.1)$$

con un error relativo respecto al valor teórico de  $\varepsilon_r = 0.9\%$ .

## 4 Conclusiones

Se concluye que el tamaño del sistema  $N$  afecta al comportamiento del mismo de forma que para valores grandes se comporta más coherentemente con la teoría de la mecánica estadística y la termodinámica. Esto se visualiza en los cambios de fase de segundo orden que se visualizan en las dependencias con la temperatura de las variables termodinámicas estudiadas. Así, cuando  $N \rightarrow \infty$  el sistema tiende a un comportamiento de transición de fase  $\lambda$ , dejando de ser de segundo orden. No se pudo estudiar el sistema para mayores tamaños porque el tiempo de computación era demasiado alto. Para  $N = 128$  tardó alrededor de 4 horas. Este es una de los principales resultados.

Por otra parte, los coeficientes calculados en los ajustes de las variables termodinámicas cerca del punto crítico (exponentes críticos y temperatura crítica) resultaron ser muy parecidos a la teoría en el caso  $N = 128$ , lo que apoya cuantitativamente lo deducido de las gráficas. Cuando el sistema se aproxima al límite termodinámico de tamaño grande y muchas partículas, se tienen valores más acordes a la teoría. Esta exactitud debe tomarse con cierta flexibilidad, porque hacen falta muchas más medidas y en intervalos más reducidos, pero también mayor potencia de cálculo.

## Referencias

- [1] *Guion de prácticas de la asignatura de Física Computacional*
- [2] J. Biel Gayé,  
*Formalismo y métodos de la Termodinámica* (1998)
- [3] Jon Juel Thomsen,  
*Bifurcation Analysis*  
[https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-68045-9\\_5](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-68045-9_5)
- [4] A. García Berdote,  
*Una revisión del modelo de Ising y su aplicación en sociología a través del modelo de Sznajd* (TFG de 2018)
- [5] N. Giordano,  
*Computational Physics*
- [6] Wuilson A. Estacio R.,  
*El modelo de Ising para explicar las transiciones de fase de un material magnético*