

Análisis numérico de los modelos de Ising y Blume-Capel a partir del algoritmo de metrópolis

L. Giordano
FISCOM
Instituto Balseiro
13 de octubre de 2018

Se simuló una red de espines a partir del algoritmo de Metrópolis. Se estudiaron los modelos de Ising y Blume-Capel, de los que se obtuvieron la energía, magnetización, susceptibilidad y capacidad de la red en función de la temperatura. Se observaron transiciones de fase para ambos modelos. Para el modelo de Ising, se encontró una temperatura de transición $T_c = 2,2777 \pm 0,0002$ y los exponentes críticos $\beta = 0,142 \pm 0,003$ y $\gamma = 1,79 \pm 0,08$. Para el modelo de Blume-Capel, se encontró que el sistema presenta transiciones de primer y segundo orden dependiendo del valor del parámetro Δ .

I. INTRODUCCIÓN

Gran parte de los materiales ferromagnéticos pueden ser tratados con modelos simples que consideran una red de espines con interacciones a primeros vecinos. La ventaja de utilizar estos modelos al realizar simulaciones es que el cálculo de las interacciones para cada espín es independiente del tamaño del sistema. A partir de esta idea surgió la motivación para este trabajo, en el que se simuló una red de espines siguiendo los modelos de Ising [1] y Blume-Capel [2], implementando el algoritmo de Metrópolis [3].

A. Modelo de Ising

Se considera un material ferromagnético (FM) como una red de espines cuadrada en dos dimensiones de tamaño L , con valor de espín ± 1 . En este caso, el número de espines es $N = L^2$. Si cada espín tiene un término de interacción a primeros vecinos que sólo depende de la orientación de los mismos y no hay campo externo aplicado, el hamiltoniano del sistema se puede escribir como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S^i S^j \\ = -\frac{J}{2} \sum_{n=1}^{L^2} S_{i,j}^n (S_{i+1,j}^n + S_{i-1,j}^n + S_{i,j+1}^n + S_{i,j-1}^n),$$

donde J es una energía de interacción y $S_{i,j}^n$ el valor del espín n -ésimo en la posición (i,j) . La suma considera los primeros vecinos de cada espín de la red y se toman condiciones de contorno periódicas, e.g., $L+1 = 1$.

La función de partición del sistema se obtiene sumando sobre microestados (w) y se escribe como

$$Z = \sum_w e^{-\beta \mathcal{H}_w}, \quad (1)$$

donde $\beta = (k_B T)^{-1}$ con k_B es la constante de Boltzmann y T la temperatura del sistema. Este sistema, resuelto por Lars Onsager [4], presenta un cambio de fase hacia

una fase desordenada, que se comporta como un material paramagnético (PM). La temperatura de transición es

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,269. \quad (2)$$

1. Exponentes críticos

El sistema considerado en el modelo de Ising presenta un cambio de fases a una temperatura crítica T_c . En las cercanías del punto crítico, la hipótesis de escala de Widom [5], propone que el comportamiento de la magnetización $M := \sum_{n=1}^{L^2} S^n$ y la susceptibilidad magnética $\chi := \frac{\partial M}{\partial h}|_{h=0}$ son de la forma:

$$M \propto (T_c - T)^\beta, \quad (3)$$

$$\chi \propto |T_c - T|^\gamma, \quad (4)$$

donde los exponentes críticos valen $\beta = \frac{1}{8} = 0,125$ y $\gamma = \frac{7}{4} = 1,75$.

B. Modelo de Blume-Capel

El modelo de Blume-Capel tiene en cuenta una red de espines que toman los valores ± 1 y 0 . En este sistema se incluye un término extra en el hamiltoniano, que se reescribe como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S^i S^j + \Delta \sum_{n=1}^{L^2} (S^n)^2, \quad (5)$$

donde Δ es un parámetro positivo conocido como campo cristalino y se minimiza cuando los espines valen 0 [7]. Al variar Δ , se genera entonces una competencia por minimizar la energía entre el término de interacción (que es menor cuando los espines están alineados con valor ± 1), y la energía proveniente del campo cristalino.

Planteando la función de partición se puede ver que este modelo presenta una transición magnética de segundo orden para $\Delta/J < \Delta_c/J$ y una de primer orden para $\Delta_c/J < \Delta/J < 2J$ con $\Delta_c/J = 1,965$.

C. Cálculo de observables

Para obtener información de los modelos presentados en las secciones **IA** y **IB** se necesitan conocer observables físicos. El cálculo de un observable \mathcal{O} en el ensamble canónico se define como

$$\langle \mathcal{O} \rangle := \frac{\sum_{\{w\}} \mathcal{O}\{w\} e^{-\beta \mathcal{H}\{w\}}}{\sum_{\{w\}} e^{-\beta \mathcal{H}\{w\}}}, \quad (6)$$

recorriendo todas las configuraciones de los espines. Los observables termodinámicos de interés en este trabajo son la energía $E = \langle \mathcal{H} \rangle$ y la magnetización, que definen el estado del sistema. Para estudiar las fluctuaciones, se consideran la capacidad calorífica $C := \frac{\partial E}{\partial T}$ y la susceptibilidad magnética. Utilizando la ec. 6 estas cantidades se pueden reescribir como

$$C = \frac{1}{T^2} (\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2), \quad (7)$$

$$\chi = \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (8)$$

Se destaca que en este sistema M es una derivada primera de la energía libre y χ es una derivada segunda; si se obtienen estas curvas se puede determinar el orden de la transición. Si esta es de primer orden la magnetización es discontinua y la susceptibilidad tiene un comportamiento asintótico en la T_c . Si la transición es de segundo orden, la magnetización es continua y la susceptibilidad tiene una discontinuidad.

En general, el cálculo del valor medio de un observable con la ec. 6 resulta muy complicado, pero se puede recurrir al método de Montecarlo para simplificar la expresión.

D. Método de Montecarlo

El método de Montecarlo consiste en aproximar expresiones complejas a partir de un muestreo aleatorio [6]. En este caso, se realiza un muestreo de estados por importancia de acuerdo a la distribución de Boltzmann, por lo que la ec. 6 se puede reescribir como

$$\langle \mathcal{O} \rangle := \frac{\sum_{\{\alpha=1\}}^{N_{try}} \mathcal{O}\{s_\alpha\}}{N_{try}}, \quad (9)$$

donde se elige $N_{try} = 10^4 L^2$ para tener una estadística significativa.

E. Algoritmo de Metrópolis

Para obtener el muestreo a partir de la distribución de Boltzmann se implementó el algoritmo de Metrópolis para la red de espines, que consiste en seguir estos pasos:

- Se tiene el sistema en el estado inicial con energía E_0 .
- Se elige secuencial o aleatoriamente un espín y se propone un cambio en su valor, que lleva al sistema a una energía E_f .
- El cambio de espín se acepta con probabilidad 1 si $\Delta E = E_f - E_0 \leq 0$ y con probabilidad $e^{-\beta \Delta E}$ si $\Delta E > 0$.

La idea de este algoritmo es que el muestreo de estados posibles siga la distribución de probabilidades de Boltzmann, por lo que al realizar varias iteraciones este evolucione a su estado de equilibrio. Una forma de medir el tiempo de evolución es en unidades de pasos de Montecarlo (MCS), donde $MCS = L^2$.

El objetivo de este trabajo es simular la red de espines propuesta en los modelos de Ising y Blume-Capel con el algoritmo de Metrópolis y estudiar los observables termodinámicos de estos sistemas.

II. IMPLEMENTACIÓN

Se escribió un programa en C++ con el fin de realizar las simulaciones de los modelos descriptos en la introducción. Se utilizó un tamaño variable en el rango de $L=10$ a $L=1000$, por lo que se simuló redes de 100 a 10^6 espines. Se tomaron observables adimensionalizados, por lo que $J = k_B = 1$. Sin incluir los casos donde se explícite el tiempo de simulación (mencionados debidamente más abajo), se tomó por defecto $t = 10^4 MCS$. En Cod. 1 se incluye la función que implementa el algoritmo de metrópolis.

```

1 void system::update(int midvalues){
2     double DeltaE=0;
3     int nova;
4
5     for(int i=0;i<L;i++){
6         for(int j=0;j<L;j++){
7             nova = Propongo.Nuevo_Spin(i,j);
8             DeltaE = Calculo_deltaE(i,j,nova);
9
10            if(DeltaE<=0||randf.doub()<W[Map(DeltaE)])
11            {
12                E += DeltaE;
13                M += (nova - s[i][j]);
14                s[i][j] = nova;
15            }
16
17            if(midvalues){
18                Emid += E;
19                E2mid += pow(E,2);
20                Mmid += fabs(M);
21                M2mid += pow(M,2);
22            }
23        }
24    }
25 }
```

Cod. 1. Código implementado para el algoritmo de Metrópolis.

Para más detalles acerca del código utilizado, se puede acceder a los archivos por medio de este [link](#).

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A. Ising

En la Fig. 1 se observan la energía y magnetización por sitio en función del tiempo para el modelo de Ising. Para $T = 2,1$ se observa que para $L = 10$ y $L = 30$ la red se encuentra en el estado ordenado. La magnetización por sitio del sistema para $L = 10$ fluctúa rápidamente desde el estado con todos los espines $+1$ al opuesto. Esto se debe a las fluctuaciones aleatorias de los espines; es más fácil cambiar el sistema con menor tamaño. Por esa razón se observa un mayor ruido en la energía para $L = 10$ que para $L = 30$, aunque tienen el mismo valor medio. Para $T = 2,5$ ambas redes se encuentran en un estado desordenado, con un valor medio de magnetización nulo. En este caso la red con $L = 10$ también presenta un mayor ruido en la magnetización y energía del sistema.

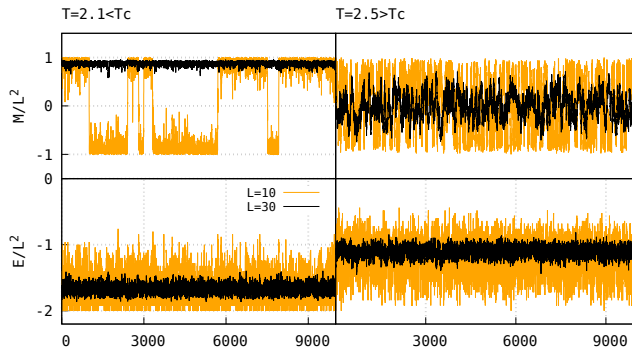


Fig. 1. **Arriba:** Magnetización por sitio en función del tiempo medido en pasos de Montecarlo. **Abajo:** Energía por sitio en función del tiempo. **Izquierda:** Magnetización y energía por sitio para $T = 2,1$. **Derecha:** Magnetización y energía por sitio para $T = 2,5$.

Para estudiar con mayor detalle la transición del estado ordenado al desordenado y la incidencia del tamaño del sistema, se simularon redes de distintos tamaños en un rango de temperaturas de 1,5 a 3 con un paso de 0,02. En la Fig. 2 se observa la energía media por sitio en función de la temperatura. En todos los casos la energía aumenta, consecuencia del desorden de la red. Esto evidencia la tendencia del sistema de maximizar la entropía frente a la disminución de energía que se da a temperaturas menores.

El valor de L no afecta el comportamiento de la energía media apreciablemente, pero sí el de los otros observables físicos simulados. Por ejemplo, en la Fig. 3 se observa la magnetización por sitio en función de la temperatura. La magnetización sufre un descenso abrupto para los sistemas con mayor L en la T_c . Para temperaturas mayores, todas las curvas menos la de $L = 10$ tienden a una magnetización media nula. La curva de $L = 10$ no tiende a 0 ya que las fluctuaciones del sistema tienen tanta importancia que al haber un desbalance mínimo en la magnetización total, el valor de la magnetización por sitio crece fuertemente. Este comportamiento es atípico y no se observa en el límite termodinámico ($N \approx 10^{23}$, $L \approx 10^{12}$).

En las Figs. 4 y 5 se presentan la capacidad calorífica y la susceptibilidad en función de la temperatura. En la capacidad

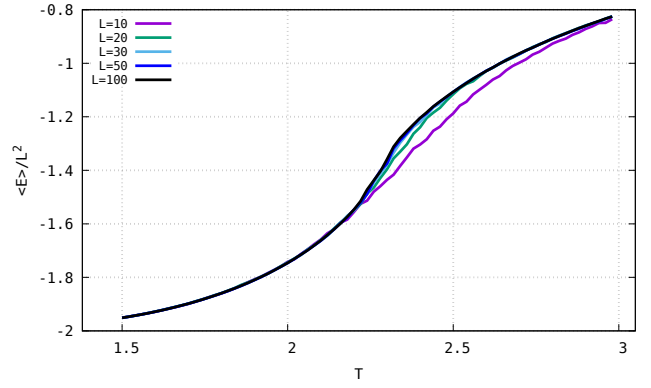


Fig. 2. Energía media por sitio en función de la temperatura para distintos tamaños. La energía aumenta a medida que el sistema se desordena en todos los casos.

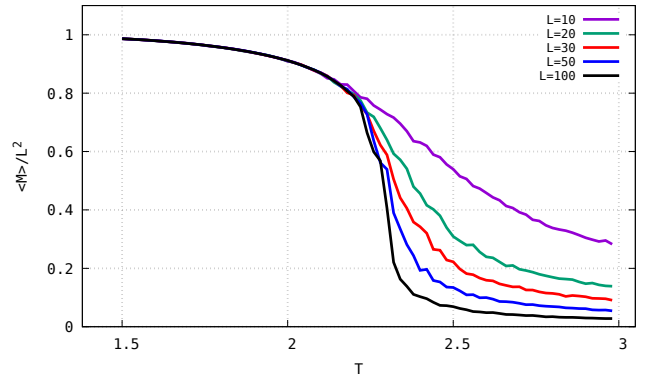


Fig. 3. Magnetización por sitio en función de la temperatura para distintos tamaños del sistema. Se observa una transición desde un estado magnetizado a bajas temperaturas a uno que tiende a tener magnetización nula a temperaturas mayores a T_c .

se observa un máximo y en la susceptibilidad un comportamiento asintótico, ambos en la $T_c \approx 2,25$. En los dos casos se observa que las curvas crecen con el tamaño de la red.

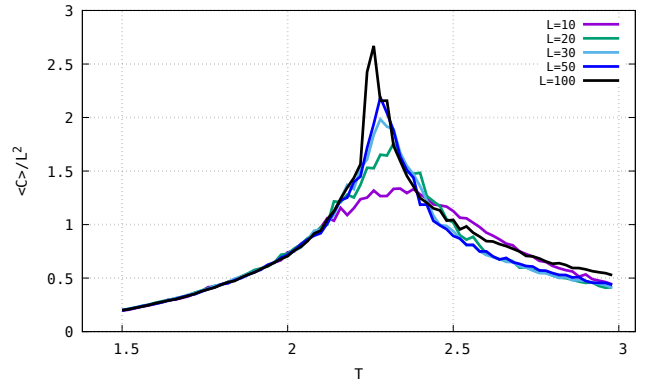


Fig. 4. Capacidad por sitio en función de la temperatura. Se observa un pico que crece con el tamaño cerca de T_c .

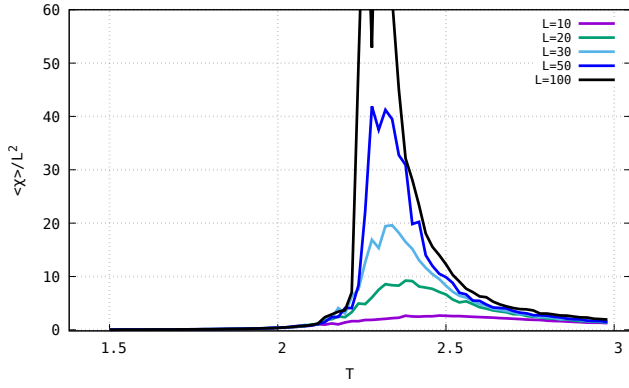


Fig. 5. Susceptibilidad magnética media normalizada en función de la temperatura para distintos tamaños. Cerca de T_c la susceptibilidad es mayor para L más grande.

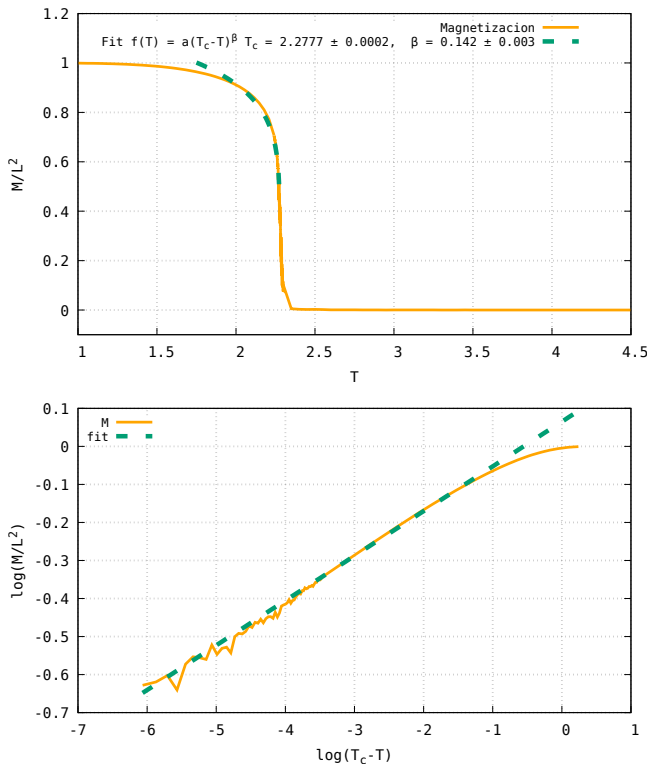


Fig. 6. **Arriba:** Magnetización por sitio en función de la temperatura en un sistema con $L = 1000$ ($N = 10^6$). Se observa detalladamente el cambio de la fase ordenada a la fase desordenada. La curva de trazo discontinuo representa el ajuste realizado para obtener T_c y β . **Abajo:** Logaritmo de la magnetización en función de $\log|T - T_c|$. Se verifica que el comportamiento es lineal en una zona cercana a T_c y se muestra el ajuste en línea de trazos.

Se mencionó en la sección IA 1 que las curvas de magnetización y susceptibilidad presentan un comportamiento descrito por los exponentes críticos cerca de la T_c . Con el fin de calcular estos parámetros, se estudió el comportamiento de M y χ en el rango de temperaturas de 1 a 4.5, con un paso de

0.0005 para temperaturas en el rango de 2.24 a 2.3, entorno cercano a la T_c . En la Fig. 6 se presenta la magnetización en función de la temperatura para una red con $L = 1000$. Del ajuste de esta curva con la ec. 3 se determinó un valor de $T_c = 2,2777 \pm 0,0002$ y el exponente $\beta = 0,142 \pm 0,003$. En la Fig. 7 se observa la susceptibilidad en función de la temperatura. Del ajuste de la ec. 4 se obtuvo $T_c = 2,277 \pm 0,003$ y el exponente $\gamma = 1,79 \pm 0,08$. Las temperaturas críticas de ambos ajustes se incluyen dentro del error. Ambas discrepan con la temperatura de transición del modelo de Ising ($T_{teo} \approx 2,269$), por lo que se argumenta que la transición podría depender del tamaño del sistema. Para los exponentes críticos, el valor de β difiere en un 10% con el valor teórico y el valor estimado de γ se encuentra dentro del error con el teórico.

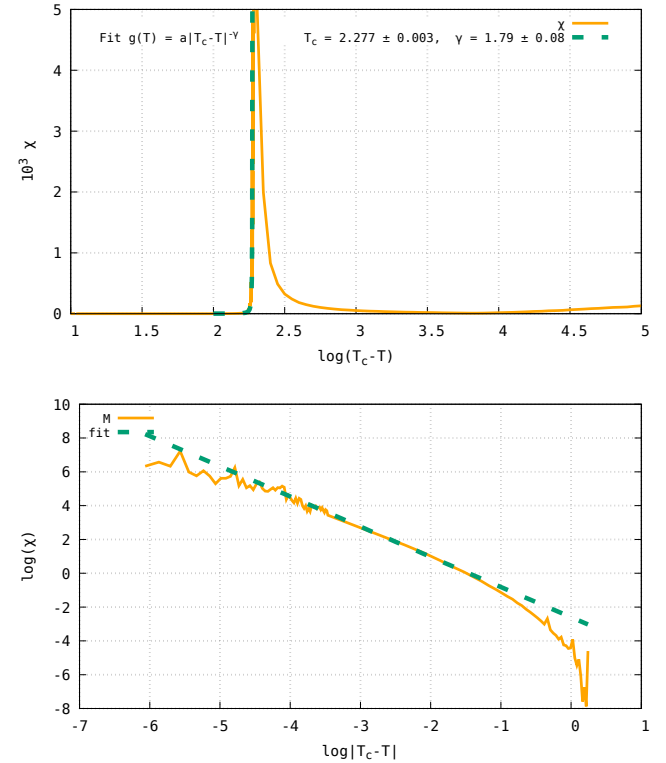


Fig. 7. **Arriba:** Susceptibilidad magnética de un sistema con $L = 1000$. Se observa un comportamiento asintótico cerca de T_c . La curva con trazo discontinuo representa el ajuste realizado para determinar la T_c y γ . **Abajo:** Logaritmo de la susceptibilidad en función de $\log(T_c - T)$. Se observa un comportamiento lineal que es ajustado por la línea de trazos.

Para profundizar más acerca de la naturaleza de la transición, se estudió la energía libre del sistema. Para esto se realizaron histogramas de la magnetización media por sitio para una evolución de $t = 10^6$ MCS y $L = 10$, con un ancho de 0.02. Los resultados se presentan en la Fig. 8. Se observa la tendencia al estado ordenado para $T = 2,1$, con dos picos en cercanos a $\langle m \rangle = \pm 1$. Para $T = 2,5$, el histograma se encuentra más extendido sobre todo el rango, con una probabilidad aproximadamente uniforme, pero un poco más alta cerca de los estados ordenados.

Con los histogramas obtenidos, se calculó la energía libre a

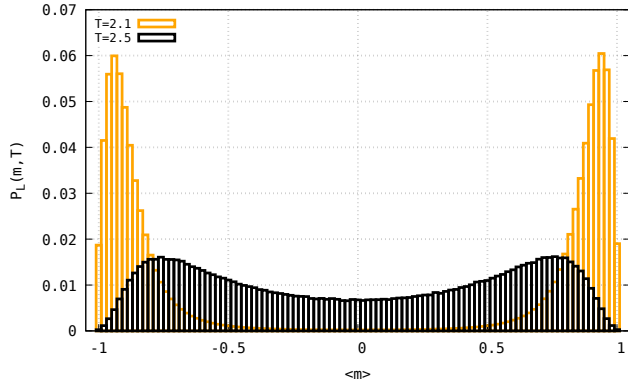


Fig. 8. Histogramas de magnetización media para una evolución de $t = 10^6$ pasos de Montecarlo. Para $T = 2,1 < T_c$ se observan dos picos pronunciados cerca de los estados ordenados. Para $T = 2,5 > T_c$ la distribución aún presenta estos máximos, pero la distribución está extendida sobre todo el rango de valores para la magnetización.

partir de la expresión $F_L(m, T) = -T \log_L(P(m, T))$, donde $P_L(m, T)$ es el valor del histograma de magnetización y se refiere a la distribución de probabilidad de la magnetización para una temperatura dada. Esto se presenta en la Fig. 9. Para ambas temperaturas se observan dos mínimos en los estados ordenados, pero estos son mucho más pronunciados para la temperatura menor a la crítica $T = 2,1$. Esto quiere decir que el sistema prefiere los estados ordenados porque minimizan su energía, frente a la maximización de la entropía.

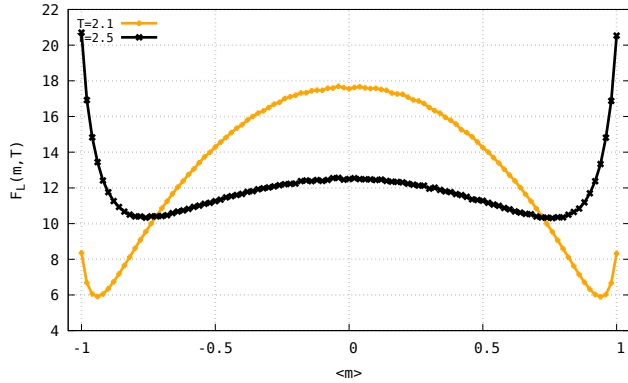


Fig. 9. Energía libre del sistema en función de la magnetización. Para $T = 2,1$ se observan dos mínimos cercanos a los estados ordenados. Para $T = 2,5$ la energía libre todavía presenta los dos mínimos, pero no son tan pronunciados.

Realizando histogramas como los de la Fig. 8 para distintos valores de L , se puede estudiar la incidencia del tamaño en la energía libre. Para esto se define el gap de energía libre $\Delta F_L = F_L(< m > = 0) - \min\{F_L, < m > \in [-1, 1]\}$, que mide la distancia entre el valor de la energía libre en $< m > = 0$ y el valor mínimo de esta cercana a los estados ordenados. Este gap sirve para estimar la probabilidad con la que la se puede invertir el valor de los espines de la red de un estado ordenado al opuesto. Los resultados se presentan en la Fig. 10. Se observa un comportamiento lineal creciente, por lo que

el gap de energía aumenta con L .

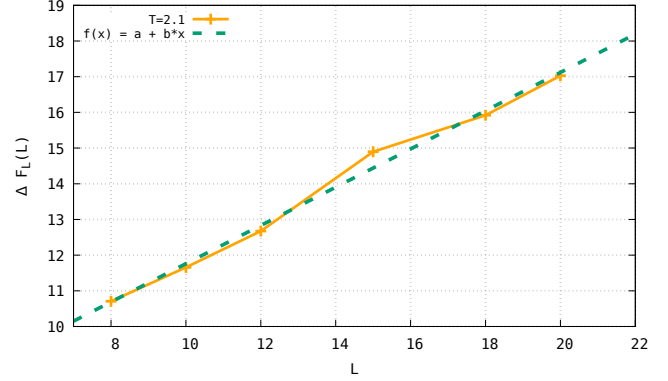


Fig. 10. Gap de energía libre entre el estado de mayor magnetización y el de magnetización nula en función de L para $T = 2,1$. El gap aumenta cuando L crece y se observa una relación lineal.

B. Blume-Capel

En la sección IB se describió el modelo de Blume-Capel, que tiene en cuenta una red de espines que pueden valer ± 1 y 0. Se realizaron simulaciones similares a las del modelo de Ising, con el foco en el estudio de la incidencia del valor de Δ . En la Fig. 11 se observa la energía por sitio en función del tiempo para $L = 20$ y $\Delta = 1,975 > \Delta_c$. La energía media aumenta con la temperatura. Además, se presenta en la Fig. 12 la magnetización en función del tiempo para las mismas condiciones. Para $T = 0,4$ el sistema se encuentra ordenado con $< m > = 1$ y para $T = 1$ su magnetización media es nula. Para $T = 0,585$ el sistema presenta dos transiciones de fase, desde $+1$ a 0 y de 0 a -1 , por lo que esa temperatura debe encontrarse cercana a la crítica.

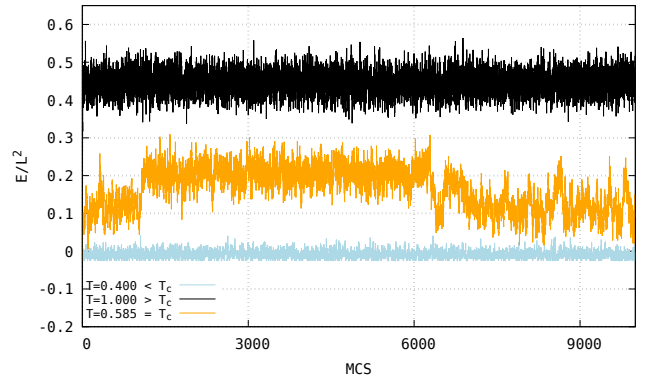


Fig. 11. Energía por sitio en función del tiempo para distintas temperaturas. Se observa que a pesar del ruido las tres energías son aproximadamente constantes y que la energía aumenta con la temperatura. Para $T = 0,585 \approx T_c$ se observa un salto en la energía, que se corresponde a un cambio de fases.

El modelo de Blume-Capel predice un cambio en el orden de la transición para $\Delta = \Delta_c = 1,965$. Esto se puede comprobar en la Fig. 13, donde se grafica la energía en función de la

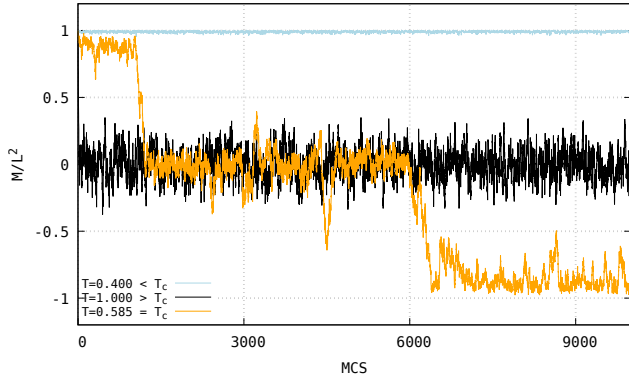


Fig. 12. Magnetización por sitio en función del tiempo para distintas temperaturas.

temperatura para $\Delta = 1,975 > \Delta_c$ (izquierda) y $\Delta = 1 < \Delta_c$ (derecha). En la imagen de la izquierda se observa una discontinuidad, característica de las transiciones de primer orden, del que se puede estimar un calor latente $\Delta E \approx 0,1$. La curva de la derecha es continua y la energía aumenta fuertemente con la temperatura, evidenciando una transición de orden superior.

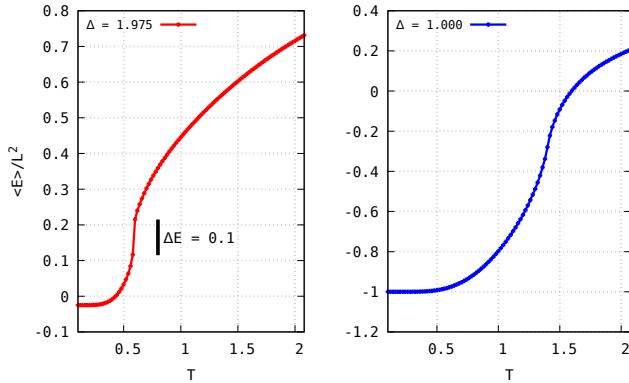


Fig. 13. Energía media por sitio en función de la temperatura para $L = 100$. **Izquierda:** Curva para $\Delta = 1,975$. Se observa una discontinuidad en la energía que revela una transición de primer orden. **Derecha:** Energía para $\Delta = 1$. La curva es continua pero se observa y se observa un aumento de energía con la temperatura.

En la Fig. 14 se presenta la magnetización por sitio en función de la temperatura. En esta imagen se observa que $T_c \approx 0,6$ para la transición de primer orden y que $T_C \approx 1,4$ para la de orden superior. Además, se observa que el tamaño del sistema no incide en la T_c y las curvas se vuelven más suaves para L mayor.

En las Figs. 15 y 16 se presentan la capacidad y susceptibilidad por sitio en función de la temperatura. Para $\Delta = 1,975$ se observa una divergencia en la capacidad y en la susceptibilidad en la temperatura de transición. Para $\Delta = 1$ se observan comportamientos similares al del modelo de Ising para la susceptibilidad. En cambio, para la curva de capacidad el comportamiento no es asintótico; la curva presenta un máximo, que revela que esta transición es de segundo orden [8].

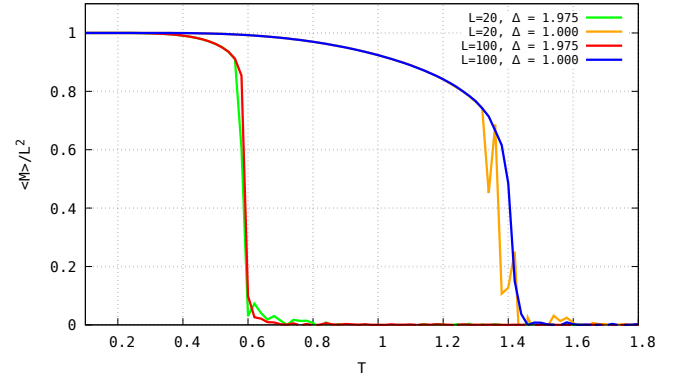


Fig. 14. Magnetización media por sitio en función de la temperatura para distintos L y Δ . Se observan transiciones de un estado ordenado ($|S^z| = 1$) a uno donde la magnetización media es nula. Para $\Delta = 1,975 > \Delta_c = 1,965$ la transición se da para $T \approx 0,6$ y para $\Delta = 1 < \Delta_c$ se da a $T \approx 1,4$.

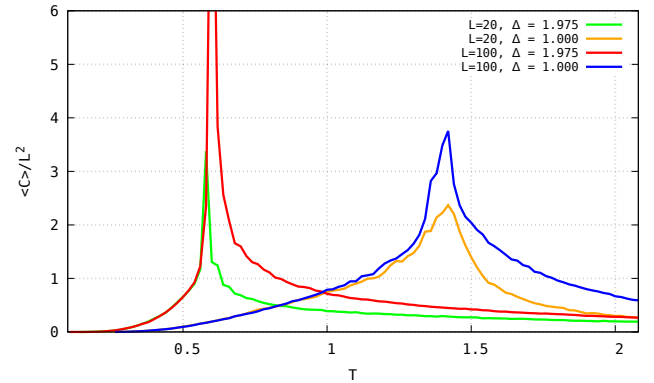


Fig. 15. Capacidad calorífica media por sitio en función de la temperatura.

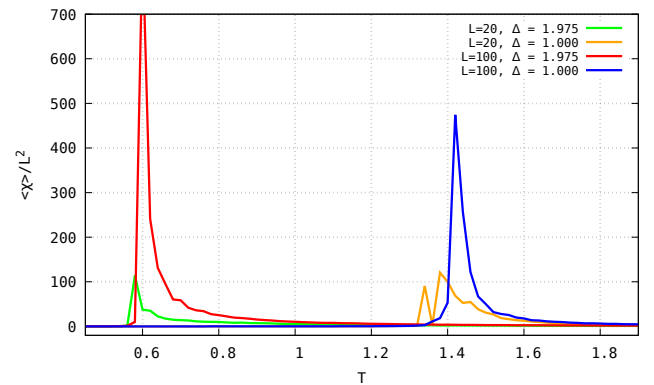


Fig. 16. Susceptibilidad magnética media por sitio en función de la temperatura para distintos valores de Δ y L .

Una propiedad de las transiciones de primer orden es que suelen presentar histéresis. Esto se observa en las Figs. 17 y 18, donde se estudió la energía y magnetización en función de T para un ciclo de temperaturas cercanas a T_c con $L = 100$.

la simulación consiste en:

- Realizar la evolución temporal con $t = 10^4$ MCS para $T_i = 0,5$.
- Aumentar la temperatura un $\Delta T = 0,003$ realizando la evolución para $T = T_0 + \Delta T$, partiendo desde la configuración final anterior.
- Repetir el paso anterior hasta que $T = T_f = 0,8$.
- Realizar la simulación para $T = T_f - \Delta T$ partiendo del estado final anterior.
- Repetir el paso anterior hasta que nuevamente $T = T_i$.

De esta forma se recorre un ciclo de temperaturas en el que el valor de ΔT representa un calentamiento o enfriamiento relativamente pequeño. Volviendo a las Figs. 17 y 18, tanto en la energía como en la magnetización se observa histéresis para $\Delta = 1,975 > \Delta_c$. Esto sirve como otra forma de inferir que la transición es de primer orden para $\Delta > \Delta_c$. Para $\Delta \leq \Delta_c$ no se observa una histéresis significativa.

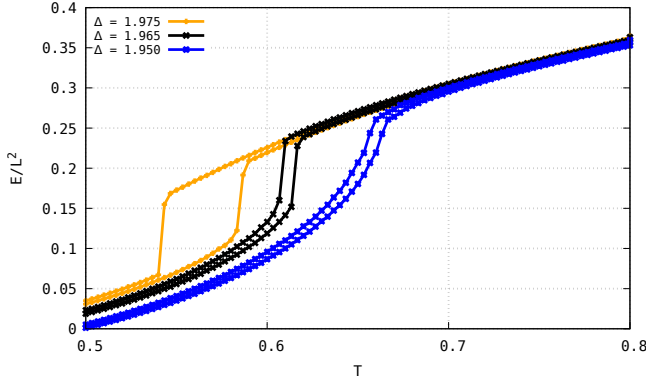


Fig. 17. Energía por sitio en función de la temperatura para $L = 100$ para distintos valores de Δ en un ciclo de temperaturas. Se observa histéresis para $\Delta = 1,975 > \Delta_c$.

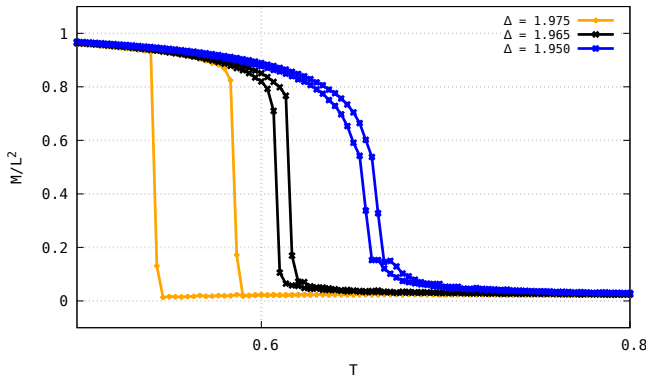


Fig. 18. Magnetización normalizada en función de la temperatura para $L = 100$. Al igual que en la Fig. 17 se observa histéresis para las curvas con $\Delta = 1,975$, característica de las transiciones de primer orden.

Para estudiar la energía libre del sistema, se realizaron histogramas de energía por sitio en temperaturas cercanas a T_c

para $\Delta = 1,975$ y $\Delta = 1$ con una evolución temporal de $t = 10^6$ MCS, que se presentan en la Fig. 19, para $L = 20$. A partir de los histogramas se calcula la energía libre, que se presenta en la Fig. 20. Para $\Delta = 1,975$ se observan 2 mínimos de energía y las distintas temperaturas favorecen uno frente al otro. Para $T = 0,57 \approx T_c$ los mínimos tienen valores cercanos; de esto se espera que a la T_c los mínimos sean iguales. En ese estado, al sistema le da lo mismo estar en cualquiera de los mínimos y salta de un estado a otro, como se observa en la Fig. 12 para $T = 0,585$. Para $\Delta = 1$ se observa un único mínimo que se traslada con la temperatura, que tiene que ver con un valor de energía media en el que se encuentra el sistema para esta transición de segundo orden [8].

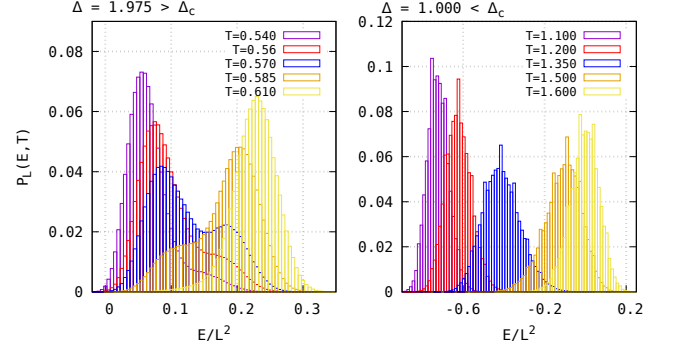


Fig. 19. Histogramas de energía para distintos valores de temperatura. **Izquierda:** histogramas para $\Delta = 1,975$. Se observa que los máximos de energía se corren con la temperatura. Para las curvas con temperaturas cercanas a T_c se observan dos picos de distinta altura. **Derecha:** histogramas para $\Delta = 1$. En este caso hay un único máximo que aumenta con la temperatura.

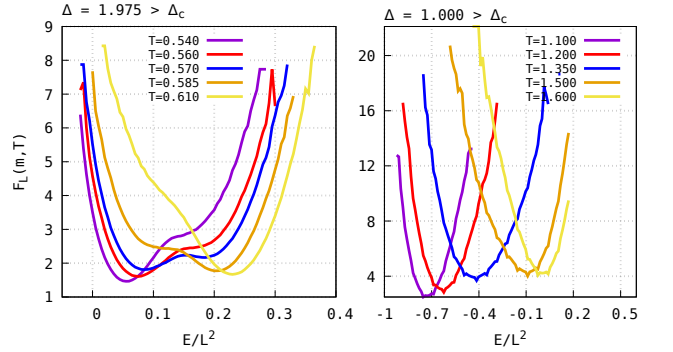


Fig. 20. Curvas de energía libre. **Izquierda:** Energía libre para $\Delta = 1,975$. Se observan 2 mínimos que van cambiando de profundidad con la temperatura. A medida que aumenta T , el mínimo de menor energía crece y se empieza a formar otro a una energía mayor. Para $T > T_c$ este nuevo mínimo es el que tiene un valor menor de energía libre, por lo que se convierte en el más estable. **Derecha:** Energía libre para $\Delta = 1$. En este caso se observa un único mínimo que se corre a valores de mayor energía con la temperatura.

IV. CONCLUSIONES

Se realizaron simulaciones de una red de espines en el modelo de Ising y Blume-Capel mediante el algoritmo de Metrópolis. A partir del acuerdo de los observables, valores de temperaturas de transición y exponentes críticos obtenidos con los predichos por los modelos teóricos, se concluye que el algoritmo de metrópolis un buen algoritmo para simular estos

modelos.

Para el modelo de Ising, se encontró una transición del estado ordenado al desordenado a una temperatura $T_c = 2,2777 \pm 0,0002$. Se calcularon los exponentes críticos $\beta = 0,142 \pm 0,003$ y $\gamma = 1,79 \pm 0,08$.

Para el modelo de Blume-Capel, se determinó que existe una transición de primer orden para $\Delta > \Delta_c = 1,965$ y una de segundo orden para $\Delta < \Delta_c$.

-
- [1] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetismus*. Universität von Hamburg, Diss., 1924
 - [2] M. Blume, *Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO₂*. Phys. Rev. **141**, (1966) p. 517-524.
 - [3] C. P. Robert, *The Metropolis-Hastings algorithm*. Springer Texts in Statistics. Springer, New York, NY (2015).
 - [4] L. Onsager, *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*. Phys. Rev. **65** (1944) p. 117-149.
 - [5] S. Canas, *Teorías de escala*. (2004).
 - [6] N. Metropolis, *The beginning of the Monte Carlo method*. Los Alamos Science Special Issue (1987).
 - [7] P. Butera y M. Pernic, *The Blume-Capel model for spins $S = 1$ and $3/2$ in dimensions $d = 2$ and 3* . Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. **507** (2018).
 - [8] W Selke y J. Oitmaa *Monte Carlo study of mixed-spin $S = (1/2, 1)$ Ising ferrimagnets*. J. Phys.: Condens. Matter **22** (2010).